

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA
INSTITUTO DE INGENIERÍA DEL AGUA Y MEDIO AMBIENTE
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA HIDRÁULICA Y MEDIO AMBIENTE



IIAMA

Tesis Doctoral

Modelación de parámetros físicos de la ecuación de advección-dispersión utilizando un tanque de experimentación de escala intermedia

Autor: Israel Sánchez Fuster

Director de tesis: Dr. D. José E. Capilla Romà

Año: 2011

Departamento de Ingeniería
Hidráulica y Medio Ambiente

Tesis Doctoral:

Modelación de parámetros físicos de la
ecuación de advección-dispersión
utilizando un tanque de experimentación
de escala intermedia

Autor: Israel Sánchez Fuster

Director de tesis: Dr. D. José E. Capilla Romà

“El agua es H₂O, dos partes de hidrógeno, una parte de oxígeno. Pero contiene también una tercera cosa, que la hace ser agua y nadie conoce”.

D.H. LAWRENCE (1885-1930),
Pensamientos, 1929

Agradecimientos:

El presente trabajo ha sido realizado en parte en el marco de la Convocatoria de ayudas de Proyectos de Investigación Científica y Desarrollo Tecnológico, del Ministerio de Educación y Ciencia (proyecto MODTANQ, Ref. REN2003-06989) y del Ministerio de Ciencia e Innovación (MODDISP, Ref. CGL2009-07547). El autor agradece profundamente su apoyo y financiación para realizar este proyecto. También queda en deuda por la colaboración de un número importante de personas que realizaron sugerencias y aportaron soluciones efectivas a la gran variedad de problemas de todo tipo que surgieron a lo largo de este trabajo. Desde la iluminación óptima para la fotografía digital hasta el sellado del tanque de experimentación o el empaquetado del medio, muchas personas han ayudado compartiendo desinteresadamente conocimientos en su campo. Entre ellas, cabe destacar a Carmen Monteagudo, de DIN Fotógrafos, por su ayuda en todo lo relacionado con tratamiento de imagen digital e iluminación. Luis López Chacón, técnico de laboratorio del Departamento de Física Aplicada, que cortó las piezas del primer prototipo y estuvo siempre disponible para cualquier consulta y ayuda. En general, numerosas personas del Instituto Universitario de Investigación de Ingeniería del Agua y Medio Ambiente que con sus comentarios y apoyo, animaron a finalizar este trabajo.

Resumen

El proceso de dispersión de solutos en el seno de un medio poroso heterogéneo ha sido el objetivo de numerosas investigaciones en las últimas décadas debido tanto a las limitaciones de las ecuaciones matemáticas que lo describen como a la necesidad de describir y predecir el movimiento de contaminantes en acuíferos reales, con la complejidad derivada de los patrones espaciales de heterogeneidad reales y otras incertidumbres en el conocimiento del medio.

Si asumimos que la ecuación clásica de convección-dispersión (Advection-Dispersion Equation, ADE) es válida a escala microscópica, se identifican dos aproximaciones principales. La primera se centra en la búsqueda de parámetros efectivos en el dominio, de forma que la evolución del penacho de contaminante pueda ser predicha con éstos por medio de la ADE. Conforme un penacho evoluciona, va atravesando diferentes heterogeneidades, y a distintas escalas, en su camino, por cuyo efecto va evolucionando el valor del parámetro que rige la dispersión hasta que, teóricamente, a partir de cierto momento llegaría a estabilizarse. Sin embargo, distintos estudios demuestran que no siempre se alcanza un valor asintótico para la dispersividad. Esto se ha achacado tanto al efecto combinado de las distintas conductividades hidráulicas a distintas escalas como a un posible comportamiento no fickiano de la dispersión.

Otros autores han demostrado la importancia de modelar adecuadamente la heterogeneidad de la conductividad hidráulica a las distintas escalas, asumiendo el comportamiento fickiano de la dispersión y achacando las desviaciones de los resultados reales frente a los teóricos a heterogeneidades de la conductividad a escalas inferiores a la de trabajo. Para resolver esta limitación, recurren a conceptos como los medios de porosidad dual, el transporte multitasa (multirate transport) u otros.

Ambos puntos de vista se centran generalmente en un único parámetro para explicar la desviación del comportamiento de un penacho de soluto frente a los resultados predichos por la ADE: la variabilidad de la conductividad hidráulica. En ningún caso se hace referencia o se tiene en cuenta la variabilidad espacial de la dispersividad. Aunque se reconoce que este parámetro representa de forma efectiva la heterogeneidad de la conductividad hidráulica a pequeña escala, no se caracteriza su variabilidad espacial tratando de representar patrones de heterogeneidad análogos a los de formaciones reales. La dificultad para medir o estimar este parámetro y su enorme dependencia de la escala de la discretización numérica han limitado esta vía de investigación. Es frecuente que se calcule el valor efectivo de la dispersividad en todo el dominio en que evoluciona un penacho utilizando el método de los momentos espaciales o a partir de las curvas de llegada a ciertos puntos del medio. Así, se pierde

el detalle de la posible influencia en la dispersión de la variabilidad local de la dispersividad a través del medio poroso.

Esta tesis presenta el primer intento de modelar la variabilidad local de la dispersividad basándose en un experimento de flujo y transporte de solutos en un tanque de experimentación de escala intermedia (Intermediate Scale Experiment, ISE). Los medios disponibles actualmente para la monitorización, adquisición y procesamiento de datos en este tipo de experimentos permiten la obtención de información exhaustiva de ensayos controlados constituyendo una oportunidad todavía no agotada para la investigación en aspectos básicos del flujo y transporte. Hasta ahora, la experimentación en laboratorio se había centrado en la estimación de valores efectivos basados en el análisis de las curvas de llegada o de momentos del penacho, en algunos casos con el objetivo de verificar las teorías estocásticas del transporte. En esta investigación, se ha construido un medio poroso artificial inserto en un tanque de experimentación cuasi-2D, cuyos patrones de heterogeneidad estaban basados en datos de conductividad hidráulica procedente de una formación natural altamente heterogénea de características no gaussianas (MADE-2 site, Columbus Air Force Base en Mississippi, EEUU). Controlando el potencial hidráulico a la entrada y la salida del tanque, de longitud 1,2 m, altura 0,50 m y espesor 0,05 m, se crearon condiciones de flujo estacionario en las que se llevaron a cabo varios ensayos de transporte de trazadores conservativos. Este tanque, construido en metacrilato, fue monitorizado con una red de transductores de presión de alta precisión y se tomaron fotografías digitales de la evolución del penacho de trazador coloreado. El procesado de estas imágenes permitió obtener información exhaustiva en una malla de alta resolución de la distribución de concentraciones del trazador para distintos instantes del experimento.

Los resultados de los diferentes ensayos realizados fueron analizados cuidadosamente para calcular las dispersividades tanto locales como efectiva, centrándose esta investigación en un experimento seleccionado. Se observa que incluso a escala de laboratorio ocurren fenómenos de transporte anómalo y que la dispersividad efectiva central, obtenida de los momentos de segundo orden del penacho, es más dependiente de los patrones de heterogeneidad de la conductividad hidráulica que de las propiedades de los distintos materiales que forman el medio poroso del tanque. Las imágenes sucesivas tomadas fueron procesadas sobre una malla de discretización para la que, asumiendo la validez de la ADE, se calcularon los valores locales efectivos de la dispersividad en distintos instantes de tiempo. Se observa cómo, para cada elemento de la discretización, la dispersividad local efectiva instantánea varía según una forma típica que depende de la evolución del gradiente de concentración en su interior y del material de que está compuesto. Esta investigación proporciona la primera evidencia disponible, basada en un experimento de laboratorio controlado, de cómo la dispersividad local estimada, debido a que es un parámetro efectivo, varía en el tiempo y el espacio, su correlación con la conductividad hidráulica y también su dependencia de la “historia” de concentraciones y gradientes en cada elemento de la discretización.

Abstract

Solute dispersion processes in porous media remain as a subject of research due to both the limitations of available mathematical approaches, and to the need of properly reproducing the real patterns of the medium heterogeneity. Yet, building models able to accurately predict transport processes in real formations require dealing with dispersion processes. Assuming that the classical Advection-Dispersion Equation (ADE) is valid at some fine scale referred to as Representative Elementary Volume, two main and important research lines are identified. The first focused on the average and effective dispersivity parameter that allows reproducing a solute plume development using the ADE. As a plume evolves, it flows through different heterogeneities, each of them with its own effect on the plume. These make the dispersion parameter value to increase until reaching an asymptotic value. But, different studies show that dispersivity does not reach an asymptotic value possibly due to the combined effect of different scales of hydraulic conductivity (K) heterogeneity and to the non-Fickian behavior of transport.

A second line assumes the importance of properly modeling K at different scales, and that non-Fickian features can be approached by modeling heterogeneity occurring at very fine scale. Then, some mathematical approaches, such as the multirate transport formulation, allow incorporating the effects of this fine scale heterogeneity in a coarse scale, using effective values of dispersivity. Besides, the spatial variability of this parameter is not addressed in these approaches; only K variability is accounted for.

Both points of view focus on a unique parameter in order to explain the deviation of real plume behavior from ADE predictions. This parameter is the heterogeneity of hydraulic conductivity, K. No attention is given to the heterogeneity of dispersivity distribution. The difficulty to estimate this parameter, and its scale dependence, has limited the number and scope of researches. Though it is usual to estimate an average value for dispersivity, these methods are not able to predict the details of local heterogeneities on the plume shape or velocity.

This research is based on a solute transport intermediate scale experiment in which local and instantaneous values of dispersivity are estimated, using a laboratory tank. The available means for data monitoring, acquisition and process avoid to gather exhaustive information of the evolution of a tracer plume evolution experiment. Current researches have focused on estimating the dispersivity value using the spatial moments method or breakthrough curve analysis, mostly to verify different stochastic theories. In this research, we have built an artificial porous media, within a quasi-2D tank, with patterns of heterogeneity based on K data from a real non-Gaussian formation (MADE-2 site, Columbus Air Force base, Mississippi, USA). By controlling the head gradient between both ends of the tank (1,2 meters long, 0,40 high and 0,05 m deep) steady state

flow conditions were created, and several conservative tracer tests have been conducted. The lab tank, built in plexiglas, is monitored by means of a grid of pressure transducers and by taking digital images of the evolution of dye tracer tests. By processing these digital images exhaustive information of solute concentration evolution was obtained.

Results for different tracer tests have been carefully analyzed to compute both average and local dispersivities. It is found that even at this small lab scale transport anomalous behavior is observed and that average dispersivities, computed from the plume second order moments, are more dependent on the heterogeneity patterns than on the physical properties of the individual materials that make up the tank porous medium. Moreover, the successive plume images obtained have been processed over a discretization grid where, assuming the validity of the ADE, local effective dispersivities have been computed for different time steps. It is found how local dispersivity varies, in every grid cell, following a typical pattern that significantly depends on the concentration gradient evolution and the material type within it. Although these results are consistent with some of the theoretical formulations to explain anomalous transport found in literature, provide the first available evidence, based on a controlled experiment, on how dispersivity varies in space and time, and how might be correlated with K .

Resum

El procés de dispersió de soluts en el si d'un mitjà porós heterogeni ha sigut l'objectiu de nombroses investigacions en les últimes dècades hagut de tant a les limitacions de les equacions matemàtiques que ho descriuen com a la necessitat de descriure i predir el moviment de contaminants en aqüífers reals, amb la complexitat derivada dels patrons espacials d'heterogeneïtat reals i altres incerteses en el coneixement del mitjà.

Si assumim que l'equació clàssica de convecció-dispersió (Advection-Dispersion Equation, ADE) és vàlida a escala microscòpica, s'identifiquen dues aproximacions principals. La primera se centra en la recerca de paràmetres efectius en el domini, de manera que l'evolució del plomall de contaminant pugui ser predita amb aquests per mitjà de la ADE. Conforme un plomall evoluciona, va travessant diferents heterogeneïtats, i a diferents escales, en el seu camí, per l'efecte del qual va evolucionant el valor del paràmetre que regeix la dispersió fins que, teòricament, a partir de cert moment arribaria a establir-se. No obstant açò, diferents estudis demostren que no sempre s'aconsegueix un valor asimptòtic per a la dispersivitat. Açò s'ha atribuït tant a aquest efecte combinat de les diferents conductivitats hidràuliques a diferents escales com a un possible comportament no fickiano de la dispersió.

Altres autors han demostrat la importància de modelar adequadament l'heterogeneïtat de

la conductivitat hidràulica a les diferents escales, assumint el comportament fickiano de la dispersió i atribuint les desviacions dels resultats reals enfront dels teòrics a heterogeneïtats de la conductivitat a escales inferiors a la de treball. Per a resoldre aquesta limitació, recorren a conceptes com els mitjans de porositat dual, el transport multitasa (multirate transport) o uns altres.

Tots dos punts de vista se centren generalment en un únic paràmetre per a explicar la desviació del comportament d'un plomall de solut enfront dels resultats predits per la ADE: la variabilitat de la conductivitat hidràulica. En cap cas es fa referència o es té en compte la variabilitat espacial de la dispersivitat. Encara que es reconeix que aquest paràmetre representa de forma efectiva l'heterogeneïtat de la conductivitat hidràulica a petita escala, no es caracteritza la seua variabilitat espacial tractant de representar patrons d'heterogeneïtat anàlegs als de formacions reals. La dificultat per a mesurar o estimar aquest paràmetre i la seua enorme dependència de l'escala de la discretització numèrica han limitat aquesta via d'investigació. És freqüent que es calcule el valor efectiu de la dispersivitat en tot el domini en què evoluciona un plomall utilitzant el mètode dels moments espacials o a partir de les corbes d'arribada a certs punts del mitjà. Així, es perd el detall de la possible influència en la dispersió de la variabilitat local de la dispersivitat a través del mitjà porós.

Aquesta tesi presenta el primer intent de modelar la variabilitat local de la dispersivitat basant-se en un experiment de flux i transport de soluts en un tanc d'experimentació d'escala intermèdia (Intermediate Scale Experiment, ISE). Els mitjans disponibles actualment per al monitoratge, adquisició i processament de dades en aquest tipus d'experiments permeten l'obtenció d'informació exhaustiva d'assajos controlats constituint una oportunitat encara no esgotada per a la investigació en aspectes bàsics del flux i transport. Fins ara, l'experimentació en laboratori s'havia centrat en l'estimació de valors efectius basats en l'anàlisi de les corbes d'arribada o de moments del plomall, en alguns casos amb l'objectiu de verificar les teories estocàstiques del transport. En aquesta investigació, s'ha construït un mitjà porós artificial inserit en un tanc d'experimentació quasi-2D, els patrons de la qual d'heterogeneïtat estaven basats en dades de conductivitat hidràulica procedent d'una formació natural altament heterogènia de característiques no gaussianes (MADE-2 site, Columbus Air Force Base en Mississipi, EUA). Controlant el potencial hidràulic a l'entrada i l'eixida del tanc, de longitud 1,2 m, altura 0,50 m i espessor 0,05 m, es van crear condicions de flux estacionari en les quals es van dur a terme diversos assajos de transport de trazadors conservatius. Aquest tanc, construït en metacrilat, va ser monitoritzat amb una xarxa de transductors de pressió d'alta precisió i es van prendre fotografies digitals de l'evolució del plomall de trazador acolorit. El processament d'aquestes imatges va permetre obtenir informació exhaustiva en una malla d'alta resolució de la distribució de concentracions del trazador per a diferents instants de l'experiment.

Els resultats dels diferents assajos realitzats van ser analitzats acuradament per a calcular les dispersivitats tant locals com a efectiva, centrant-se aquesta investigació en

un experiment seleccionat. S'observa que fins i tot a escala de laboratori ocorren fenòmens de transport anòmal i que la dispersivitat efectiva central, obtinguda dels moments de segon ordre del plomall, és més dependent dels patrons d'heterogeneïtat de la conductivitat hidràulica que de les propietats dels diferents materials que formen el mitjà porós del tanc. Les imatges successives preses van ser processades sobre una malla de discretització per a la qual, assumint la validesa de la ADE, es van calcular els valors locals efectius de la dispersivitat en diferents instants de temps. S'observa com, per a cada element de la discretització, la dispersivitat local efectiva instantània varia segons una forma típica que depèn de l'evolució del gradient de concentració en el seu interior i del material que està compost. Aquesta investigació proporciona la primera evidència disponible, basada en un experiment de laboratori controlat, de com la dispersivitat local, a causa que és un paràmetre efectiu, varia en el temps i l'espai, la seua correlació amb la conductivitat hidràulica i també la seua dependència de la "història" de concentracions i gradients en cada element de la discretització.

Índice

1. Introducción	1
<hr/>	
1.1 Presentación del problema	1
1.2 Objetivos.....	4
1.3 Organización del documento.....	10
2. Estado del arte	11
<hr/>	
2.1 Modelación matemática del transporte en medios porosos saturados	11
2.2 Ley de Darcy y transporte convectivo.....	13
2.2.1 Flujo en medio poroso	13
2.2.2 Generalización de la Ley de Flujo.....	14
2.2.3 Balance de masa y enfoque euleriano del transporte convectivo.....	15
2.2.4 Enfoque lagrangiano del transporte convectivo	18
2.3 Dispersión, difusión y transferencia de masa	20
2.3.1 Introducción	20
2.3.2 Procesos microscópicos	21
2.4 Desarrollo de la ecuación de convección-dispersión	33
2.5 Dispersión macroscópica	36
2.6 Aproximaciones alternativas al proceso de flujo y transporte.....	38
2.6.1 Comportamiento no fickiano	38
2.6.2 ADE estocástica.....	41
2.6.3 Modelo de Transferencia Multitasa (Multi-rate Transfer Model o MRMT) 44	

2.6.4	Modelo lagrangiano de transporte no fickiano.....	46
2.6.5	Modelo de trayectorias aleatorias continuo en el tiempo (CTRW)..	47
2.6.6	Modelos de convección-dispersión en derivadas fraccionales	49
2.7	Conclusiones	52
2.8	Experimentación en medios físicos de laboratorio	56
2.8.1	Experimentación a escala intermedia	56
2.8.2	Tratamiento de imagen digital como sistema de medida de concentraciones.....	60
2.8.3	Estudio de la dispersión no-fickiana mediante tanques de experimentación	63
3.	Modelo de experimentación a escala intermedia	67
<hr/>		
3.1	Descripción del dispositivo físico, justificación de materiales y detalles constructivos.....	67
3.1.1	Construcción del tanque de experimentación	67
3.2	Descripción del medio utilizado.....	69
3.2.1	Origen de los datos de conductividad.....	69
3.2.2	Diseño del campo de conductividades hidráulicas	73
3.3	Construcción del medio poroso	77
3.4	Sistema de adquisición de datos	80
3.4.1	Sistema de medida de alturas piezométricas	80
3.4.2	Sistema de medida de concentraciones	82
3.5	Descripción de los ensayos realizados.....	88
3.5.1	Experimentos realizados	88
3.5.2	Justificación y detalles del experimento.....	89
3.5.3	Establecimiento de un gradiente hidráulico.....	89
3.5.4	Descripción del ensayo.....	90
3.6	Modelación numérica del experimento	92

3.6.1	Tamaño de malla y condiciones de contorno.....	92
3.6.2	Conductividad hidráulica y observaciones de alturas	92
3.6.3	Calibración del modelo numérico y estimación del campo de velocidades del flujo.....	94

4. Determinación de la dispersividad local instantánea 103

4.1	El parámetro dispersividad en la ecuación del transporte 103	
4.2	Dispersividades dependientes de la escala soporte de estimación y del tiempo.	107
4.2.1	Dispersividad instantánea dependiente del tiempo $\alpha(t)$	108
4.2.2	Dispersividad media temporal $\alpha'(t)$	109
4.3	Estimación de las dispersividades en un dominio tridimensional.....	111
4.3.1	Determinación del valor de la dispersividad efectiva media temporal $\alpha'(t)$ 111	
4.3.2	Determinación de las dispersividades efectivas locales instantáneas $\alpha(x_i,t)$ mediante modelación inversa	113
4.3.3	Obtención de las dispersividades locales instantáneas en cada celda (i, j) 117	

5. Resultados y discusión 121

5.1	Dispersividades medias efectivas	121
5.1.1	Momentos centrales del penacho.....	121
5.2	Dispersividad local efectiva instantánea.....	130
5.2.1	Estimación del balance de masa instantáneo.....	130
5.2.2	Componente convectiva instantánea del balance de masa	132
5.2.3	Componente dispersiva instantánea	133

5.3 Cálculo de las dispersividades locales efectivas instantáneas.....	135
5.4 Comportamiento temporal de la dispersividad	136
5.5 Mapa de dispersividades máximas.....	137
5.6 Evolución temporal de las dispersividades locales instantáneas.....	138
5.6.1 Selección de puntos de control de la evolución de la dispersividad local efectiva instantánea.....	138
5.6.2 Comportamiento temporal de la dispersividad local instantánea según su distancia al cdm	138
5.6.3 Comportamiento según su distancia al punto de inyección	144
5.7 Correlación entre el valor máximo de la dispersividad y el valor máximo del gradiente	147
5.8 Comportamiento de la dispersividad efectiva local máxima según el tipo de material	150
5.9 Modelación numérica utilizando los valores de dispersividad local efectiva instantánea	155
6. Síntesis y Conclusiones	163
<hr/>	
6.1 Conclusiones	167
6.2 Futuras líneas de investigación	169
7. Referencias	171
<hr/>	

Anexo A Descripción del modelo físico construido y funcionamiento. 179

A.1 Descripción general del tanque de experimentación.	179
A.1.1 Montaje de la pared lateral.....	179
A.1.2 Montaje de la parte exterior del tanque.....	181
A.1.3 Montaje de las cámaras de entrada y salida de agua	182
A.1.4 Colocación de los transductores de presión.....	186
A.2 Características del medio poroso	190
A.2.1 Granulometría y conductividad	190
A.2.2 Llenado del tanque	191

Anexo B. Instrumentación de las medidas de concentración 196

B.1 Introducción.....	196
B.1.1 Teoría del color	196
B.1.2 Relación entre intensidad de color y concentración. Ley de Beer	199
B.2 Cámara fotográfica y formato gráfico.....	202
B.3 Corrección de la influencia de otros factores en la imagen digital.....	208
B.3.1 Temperatura de color.....	208
B.3.2 Corrección por iluminación no homogénea	209
B.3.3 Corrección de color de fondo no homogéneo y cálculo de concentraciones.....	216

Índice de figuras

Figura 2.1 - Representación esquemática de la experiencia de Darcy.....	13
Figura 2.2 – Balance de masa en un diferencial de volumen $A \cdot \Delta l$	15
Figura 2.3 – Diferencial de volumen no alineado de dimensiones $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$	17
Figura 2.4 – Factores que causan la dispersión longitudinal a escala de poro (Fuente: Fetter, 1993)	20
Figura 2.5 – Diferencial de volumen $A \cdot dx$	22
Figura 2.6 – Perfil de velocidades en el interior de un poro (Fuente: Fetter, 1993).....	25
Figura 2.7 – Efectos de la dispersión longitudinal y transversal sobre una inyección puntual (Fuente: Fetter, 1993)	25
Figura 2.8 – Dispersión causada por el flujo a través de medios porosos heterogéneos (Fuente: Fetter, 1993)	26
Figura 2.9 – Efecto de la dispersión sobre la curva de llegada (Fuente: Fetter, 1993).....	27
Figura 2.10 – Componentes de la velocidad de flujo.....	27
Figura 2.11 – Componentes del vector de transporte \mathbf{W}	30
Figura 2.12 – Elemento de volumen alineado con el flujo.....	33
Figura 2.13 - Efecto de las heterogeneidades sobre la dispersión (de Skibitze y Robinson, 1963).....	36
Figura 3.1 – Vista general del tanque de experimentación.....	68
Figura 3.2 – Situación del MADE site y localización de los pozos de medida y muestreo (fuente: Liu y Chen, 2008)	70
Figura 3.3 – Datos de conductividad hidráulica obtenidos a partir de los sondeos ejecutados en el MADE site (fuente: Llopis-Albert y Capilla, 2009).....	71
Figura 3.4 – Mapa de conductividades de la formación, en m/día, generado por krigado de los datos de conductividad horizontal a partir de los datos de los sondeos existentes (fuente: Liu y Chen, 2008).....	71
Figura 3.5 – Capa n° 21 del MADE site, origen de los datos utilizados en el tanque (escala logarítmica)	74
Figura 3.6 – Subconjunto de la capa 21 del MADE site a modelar, datos agrupados en 5 grupos y medio construido en el interior del tanque (escala logarítmica)	76
Figura 3.7 – Detalle de la operación de relleno húmedo con la plantilla	77

Figura 3.8 – Diferentes operaciones de llenado del tanque: a) colocación de la arena en la plantilla; b) retirada de la plantilla; c) elevación de la lámina de agua.....	79
Figura 3.9 – Detalle de uno de los sensores de presión roscado a la pared del tanque (obsérvese el agujero roscado sin sensor en la parte inferior izquierda).....	80
Figura 3.10 – Imágenes de la pared trasera del tanque, utilizada para la instrumentación, y situación geométrica de la posición de los 36 sensores insertados en la pared del tanque	81
Figura 3.-3.11 – Montaje del sistema de imagen digital destinado a la estimación de concentraciones en el medio	84
Figura 3.12 – Fotografía de un instante de la evolución del trazador en el tanque (a), del tanque sin trazador utilizado como “blanco” (b), y diferencia en el color entre ambas imágenes debida a la absorción de luz por el trazador.	85
Figura 3.13 – Mapa del canal de color rojo (a), verde (b) y azul(c), y mapa del logaritmo de la concentración en el interior del tanque (en gr/litro, escala logarítmica)	87
Figura 3.14 – De arriba a abajo: Imágenes del primer al tercer experimento, donde se aprecia cómo la importancia relativa de la dispersión hidrodinámica aumenta conforme disminuye el gradiente	89
Figura 3.15 – Vista lateral y superior de la discretización del modelo numérico (en color gris las celdas inactivas, en color azul las celdas de nivel constante).....	92
Figura 3.16 – Mapa de conductividades del modelo numérico (las zonas de mayor conductividad en rojo y las de menor conductividad en azul)	93
Figura 3.17 – Discretización de los elementos del modelo físico en conjuntos de 3 por 2 por 5 celdas (en profundidad)	93
Figura 3.18 – Imagen en la que se aprecia la discretización del modelo numérico superpuesta a una fotografía del medio real.....	93
Figura 3.19 – Correlación entre los valores calculados (eje vertical) y los medidos (eje horizontal).....	95
Figura 3.20 – Parametrización del modelo numérico	95
Figura 3.21 Valor calibrado de la conductividad hidráulica (en cm/s).....	96
Figura 3.22 Correlación entre alturas observadas y medidas en medio calibrado	96
Figura 3.23 Mapa de alturas piezométricas del modelo numérico	97

Figura 3.24 Esquema de diferencias finitas para el cálculo de las componentes vertical y horizontal del flujo entre celdas del modelo	98
Figura 3.25 Mapa del flujo horizontal y vertical entre celdas.....	98
Figura 3.27 Mapa del módulo de la velocidad de flujo en el interior del tanque	100
Figura 3.28 Trayectorias de flujo en el interior del tanque de experimentación	100
Figura 4.1 Esquema de diferencias finitas	115
Figura 5.1 - Evolución temporal del momento de orden 0	122
Figura 5.2 - Coordenadas del Cdm a lo largo del tiempo.....	123
Figura 5.3 - Trayectoria del Centro de masas (momento orden 1)	124
Figura 5.4 - Módulo de la velocidad del centro de masas del penacho a lo largo del tiempo	124
Figura 5.5 - Evolución del momento de 2° orden.....	126
Figura 5.6 - Evolución de los valores de los elementos de la matriz de dispersión	127
Figura 5.7 - Evolución de los valores de la dispersión longitudinal y vertical	128
Figura 5.8 Evolución de los valores globales de dispersividad longitudinal y transversal	129
Figura 5.9 Mapa de concentración de trazador en el instante $t = 900$ min....	130
Figura 5.10 Media aritmética de los valores de concentración asociados a cada elemento del tanque en el instante $t = 900$ min.....	131
Figura 5.11a Balance de masa en el instante $t = 900$ min	131
Figura 5.12 Balance de masa en el instante $t = 1650$ min.	132
Figura 5.13 Componente convectiva del balance de masa en el instante $t = 900$ min.....	132
Figura 5.14 Componente convectiva del balance de masa en el instante $t = 1650$ min.....	133
Figura 5.15 Componente dispersiva en el instante $t = 900$ min (en gr./litro)	134
Figura 5.16 Componente dispersiva en el instante $t = 1650$ min (en gr./litro)	134
Figura 5.17 Dispersividades locales instantáneas en el instante $t = 54000$ seg	135
Figura 5.18 Comportamiento típico de la dispersividad en función del tiempo	136
Figura 5.19 Mapa de dispersividades máximas (en cm).....	137

Figura 5.20 Situación de los puntos seleccionados en función a la distancia al centro de masas del penacho.....	140
Figura 5.21 Comportamiento de la dispersividad en los puntos del grupo A	141
Figura 5.22 Comportamiento de la dispersividad en los puntos del grupo B.....	142
Figura 5.23 Comportamiento de la dispersividad en puntos del grupo C.....	143
Figura 5.24 Situación de los puntos agrupados según su distancia al punto de inyección	144
Figura 5.25 Correlación entre el valor máximo local del gradiente y de la dispersividad local efectiva máxima.....	147
Figura 5.26 Correlación entre el instante en que aparece el máximo gradiente y el máximo valor de dispersividad.....	149
Figura 5.27 Correlación entre la dispersividad y log K.....	153
Figura 5.28 Dispersividad según el material.....	154
Figura 5.29 – Resultados para el elemento situado en la fila 25, columna 120	156
Figura 5.30 – Resultados para el elemento situado en la fila 30, columna 100	156
Figura 5.31 – Resultados para el elemento situado en la fila 30, columna 85.....	157
Figura 5.32 - Resultados para el elemento situado en la fila 25, columna 80.....	157
Figura 5.33 - Resultados para el elemento situado en la fila 25, columna 55.....	158
Figura 5.34 - Resultados para el elemento situado en la fila 20, columna 55.....	158
Figura A.1 – Colocación de los refuerzos laterales	179
Figura A.2 – Colocación de los refuerzos superior e inferior.....	180
Figura A.3 – Aspecto de la pared lateral del tanque con los refuerzos colocados	180
Figura A.4 – Presentación de los elementos que forman el tanque previa a su pegado	181
Figura A.5– Planta (a), alzado (b) y perfil (c) del montaje exterior del tanque	182
Figura A.6 – Detalle de la malla de entrada	183
Figura A.7 - Detalle de los tubos ranurados	183
Figura A.8 – Detalle del montaje de la zona de entrada.....	184
Figura A.9 - Detalle del relleno de perlas de vidrio en la cámara de entrada.....	184
Figura A.10 – Plataformas móviles y tanques de nivel constante	185
Figura A.11 - Funcionamiento del tanque del nivel constante	186
Figura A.12 - Aspecto final del tanque de experimentación.....	186

Figura A.13 - Detalle de un sensor de presión roscado a través de la pared (abajo: agujero roscado sin sensor ni aguja).....	187
Figura A.14 – Colocación de los sensores de presión a través de la pared del tanque.....	188
Figura A.15 – Situación de los sensores a lo largo de la pared lateral	188
Figura A.16 - Mecanismo de un transductor de presión.....	189
Figura A.17 – Gráfico de los residuos del sensor n° 24 y ajuste lineal	190
Figura A.18 - Diferentes operaciones de llenado del tanque: a) colocación de la arena en la plantilla; b) retirada de la plantilla; c) elevación de la lámina de agua.....	193
Figura A.19 - Diseño de zonas de alta (oscura) y baja permeabilidad (clara)	193
Figura B.1 - Absorción de un fotón de longitud de onda γ	197
Figura B.2- Espectro de absorción típico. Las bandas negras muestran las longitudes de onda no absorbidas.....	197
Figura B.3 - Espectros de emisión y absorción de un mismo elemento	198
Figura B.4 - Diagrama de la molécula de Brilliant Blue FCF.....	198
Figura B.5– Solución de Brilliant Blue en agua, contenida en una probeta ...	201
Figura B.6 - Máscara de color del CMOS (Filtro de Bayer).....	204
Figura B.7 - Software de procesado de archivos RAW de Canon	207
Figura B.8 – Dominantes en la temperatura de color.....	209
Figura B.9 - Marcas de posición de los focos de iluminación y la cámara fotográfica (arriba)	210
Figura B.10 – Montaje del panel de color gris medio	211
Figura B.11 - Matriz tridimensional en Matlab. Cada uno de los planos informa del valor del píxel en los distintos canales de color	212
Figura B.12 - Herramienta de imagen imtool	213
Figura B.13 - Aspecto gráfico del campo de Valor (V)	214
Figura B.14 – Modelo del inverso de la variable “valor”, $V_{\text{mod}(x,y)}$	215
Figura B.15 - Campo de iluminación corregido	216

1. Introducción

1.1 Presentación del problema

Es evidente que el agua es un factor esencial para la vida y que por ello todos los asentamientos humanos se localizan cerca de una fuente de agua. Sin embargo, frente a la importancia puesta desde siempre en obtener un abastecimiento de agua en suficiente cantidad, el disponer de un agua de calidad suficiente no fue considerado como algo importante hasta entrada la segunda mitad del siglo XIX. Hasta ese momento, la principal preocupación por el abastecimiento de agua se centraba en obtenerla en cantidad suficiente. Sin embargo, quizá debido a la falta de comprensión del papel de los microorganismos en la aparición de enfermedades, la calidad de las fuentes de agua no tuvo una atención preferente.

La relación entre la contaminación del agua y las enfermedades no fue deducida hasta mediados del siglo XIX. En 1854, una epidemia de cólera apareció en el Soho, barrio del sur de Londres, originada en un pozo de Broad Street. El doctor John Snow, en una de las investigaciones médicas más conocidas, demostró que el foco de la epidemia se debía al agua del propio pozo. Una vez clausurado, la epidemia desapareció por sí sola. Posteriormente, se descubrió que la fuente de la enfermedad estaba en un pañal sucio enterrado cerca del pozo y que filtraba microorganismos a éste. De este modo, se comenzaron a prescribir los primeros perímetros de protección, que prohibían algunas actividades en un área centrada en el propio pozo.

En todo el mundo, los residuos de origen antrópico han acabado fluyendo en los ríos durante milenios. No solo porque los cauces hayan sido utilizados como vertederos de las ciudades, sino que las industrias también han vertido sus desechos en los ríos. Los residuos de curtidurías y mataderos fueron los principales contaminantes hasta la revolución industrial. Con la aparición de la industria moderna, tanto la cantidad como la variedad de residuos que se vertían a los ríos crecieron exponencialmente. Esta tendencia se mantuvo hasta más de la mitad del siglo XX. Aún actualmente, en los países en vías de desarrollo, enfermedades como el cólera o el tifus acaban con la vida de decenas de miles de personas al año por no disponer éstas de una fuente de agua de calidad suficiente.

El río Cuyahoga (en Ohio) se incendió en varias ocasiones en los años 30 debido al vertido de aceites inflamables por parte de las industrias de la zona. Pero fue el incendio ocurrido en el Cuyahoga en 1969 el que llevó a la promulgación de la Clean Water Act (CWA), ley pionera en la conservación de la calidad ambiental del agua. La

CWA prohíbe el vertido de desechos industriales en ríos navegables y, desde su promulgación, ha servido para mejorar la calidad medioambiental de ríos, embalses y, en consecuencia, acuíferos y humedales. Pese a ello, se ha criticado a la CWA por no establecer sistemas de control y monitoreo efectivos, en gastar demasiado en “limpiar” frente a “prevenir”. Esto es debido a la dificultad inherente en el control de la contaminación difusa, cuya fuente no es fácilmente identificable, que es una tarea mucho más compleja que controlar la contaminación puntual, cuyas fuentes pueden ser controladas y monitorizadas.

La segunda mitad del siglo XX vio los rápidos avances industriales y tecnológicos en los países desarrollados. Incluso muchos avances en el campo bélicos demostraron posteriormente ser muy útiles en la vida civil: el desarrollo de los antibióticos, los fertilizantes nitrogenados o pesticidas como el DDT. Pero paralelamente a estos avances, muchos residuos nuevos comenzaron a verterse en las aguas. Y a menudo, residuos químicos muy tóxicos letales a muy bajas concentraciones. Estos residuos han causado la desaparición de gran cantidad de fauna y flora salvaje, así como son causantes de elevar la tasa de cáncer o de malformaciones de nacimiento en las comunidades cercanas a este tipo de industrias.

El incidente más conocido de este tipo de contaminación, aunque no el único ni el más grave, ocurrió en 1976 en el llamado Canal Love, en el estado de Nueva York. A finales del siglo XIX, William T. Love construyó un canal entre dos ramas del río Niágara para generar energía hidroeléctrica que abasteciera la industria química de su propiedad cercana al río. Sin embargo, las dificultades económicas hicieron que la construcción del canal jamás se terminara. Hacia mediados de la década de 1920, parte del canal fue utilizado para verter residuos químicos. Hacia 1953, la Hooker Chemical Company enterró el canal y vendió los terrenos a la ciudad de Niágara Falls. A principios de los años 60, sobre el antiguo vertedero se situaban ya una escuela y un centenar de viviendas. Los contaminantes de este vertedero percolaron hacia el acuífero vecino y, tras una serie de años húmedos, el nivel freático subió hasta alcanzar los sótanos, patios y garajes de las viviendas cercanas. Esta exposición causó una gran alarma en todo Estados Unidos, no sólo por su gravedad, sino por el enorme número de lugares donde también podía llegar a suceder. El incidente del Canal Love es un ejemplo de libro de cómo los contaminantes procedentes de vertederos mal diseñados y mal manejados pueden crear catástrofes capaces de amenazar la vida y el medioambiente de la zona.

Tras la alarma, se descubrieron otros casos similares como el de Times Beach (Missouri), donde el pavimentado de los caminos con aceites de desecho contaminado con dioxinas causó la contaminación del suelo. La operación de limpieza costó al gobierno 110 millones de dólares. Otros casos fueron el llamado “Valle de los barriles” (Valley of the Drums) en Kentucky, donde la falta de una legislación clara sobre el almacenamiento de residuos permitió la existencia de un vertedero a cielo abierto de cerca de 100,000 m² de barriles de residuos tóxicos de composición desconocida. La

alarma social creada por esta serie de casos llevaron a la creación de la Comprehensive Environmental Response, Compensation, and Liability Act, también llamada “Superfund”, para la investigación, descontaminación, regulación y la prevención de la contaminación de las aguas.

Además del esfuerzo legislativo, esta alarma social reveló la necesidad de investigar el movimiento de los contaminantes en las aguas subterráneas a fin de poder proteger a las poblaciones cercanas y las fuentes de abastecimiento de agua de potenciales contaminaciones, así como establecer perímetros de protección que impidan actividades peligrosas en zonas cercanas a pozos o zonas de valor medioambiental.

Del mismo modo, la creación de vertederos de combustible nuclear ya agotado para la generación de energía, pero muy peligroso, hizo necesario crear nuevos métodos de caracterización de la geología de las zonas susceptibles de alojar este tipo de vertederos. Puesto que se trata de residuos cuya vida media es de miles de años, es necesario garantizar la seguridad de estos vertederos a muy largo plazo. Para ello, se necesita un conocimiento exhaustivo de las heterogeneidades presentes en el terreno. Puesto que el conocimiento determinístico de la totalidad del terreno es imposible, esto llevó al desarrollo de métodos estocásticos donde el conocimiento determinístico de las heterogeneidades queda reemplazado por una distribución de probabilidades y una estimación de la incertidumbre.

Pero todos estos esfuerzos han ido acompañados, además, por un exhaustivo esfuerzo a la hora de comprender y caracterizar los procesos que rigen el transporte de contaminantes en las aguas subterráneas. Hasta el punto de generar un debate sobre si las ecuaciones constitutivas para el transporte están bien formuladas, a la vista de que en la naturaleza se dan fenómenos que las ecuaciones clásicas no describen adecuadamente

1.2 *Objetivos*

A fin de describir el comportamiento de los solutos en el seno de un medio poroso saturado, se han utilizado diversas aproximaciones basadas en reemplazar un medio poroso heterogéneo por un medio continuo equivalente donde el proceso de mezcla pueda ser analizado mediante ecuaciones matemáticas analíticas. Así, por ejemplo, Taylor (1953) reduce el medio poroso a un conjunto de tubos capilares o de celdas, que permiten un tratamiento matemático exacto. Taylor (1953), describe analíticamente el comportamiento de un soluto introducido en un tubo capilar que evoluciona por el efecto combinado de la difusión molecular y la diferencia de velocidad del fluido en la sección del tubo. Concluye que la dispersión a lo largo de la sección del tubo está regida por un “coeficiente virtual de difusividad” que puede ser determinado a partir de la distribución de concentraciones observada. Posteriormente Aris (1953) ampliaría el trabajo de Taylor desarrollando un método para obtener el valor de los parámetros de la distribución de soluto en términos de los momentos de la distribución de soluto en la dirección del flujo. Aris demuestra que la tasa de aumento de la varianza de la distribución es proporcional a la suma del coeficiente de difusión molecular D y el “coeficiente de difusión de Taylor” formado por el producto de $K \cdot a^2 \cdot U^2 / 48 D$, donde K es una constante, U es la velocidad de flujo, D es el coeficiente de difusión molecular y a una dimensión característica de la sección del tubo. También determina que la distribución de una cantidad finita de soluto tiende a adoptar forma normal en la sección del tubo. Sin embargo, conforme más se simplifica un modelo, menos factores que afectan a la dispersión se tienen en cuenta.

Otro enfoque histórico es el de Bear (1960), en el que considera el medio poroso como una larga serie de celdas unidas entre sí mediante pequeños canales a fin de estudiar la dispersión en sentido longitudinal. El modelo supone que cuando un líquido con cierta concentración de soluto entra en una celda ocupada por líquido con una concentración de soluto diferente, desplaza parte de éste y el líquido entrante se mezcla inmediatamente con lo que queda del anterior para formar un nuevo líquido con una nueva concentración homogénea. Para obtener esta mezcla, la velocidad del soluto debe ser mayor que la velocidad media de flujo, debido a la difusión molecular o la turbulencia. De ese modo, el fenómeno de dispersión es debido a la mezcla perfecta en las celdas elementales y el movimiento del soluto entre celdas elementales debido a la velocidad media de flujo a través de los canales que interconectan esas celdas.

Estos primeros estudios dejaron clara la dificultad de realizar una descripción lo suficientemente detallada tanto del medio como del movimiento de las partículas como para obtener una solución analítica del comportamiento del soluto. Puede verse la trayectoria de una molécula de soluto como el resultado de dos movimientos diferentes: uno a lo largo de la trayectoria de una partícula del líquido y otro movimiento de una trayectoria a la adyacente. Una es debida a la geometría del medio y otra debida al

carácter aleatorio de la difusión molecular. Esta naturaleza aleatoria impide la predicción determinística de la trayectoria de una partícula de soluto (Bear, 1972).

Ya que resulta imposible la predicción determinística debida al gran número de factores que afectan al movimiento de una partícula individual, otro enfoque estima que es posible predecir la distribución espacial de un conjunto grande de partículas en un momento dado, utilizando las reglas de la teoría de probabilidad (Josselin de Jong, 1958, Saffman, 1959, 1960). La distribución de probabilidad de la posición de una partícula concreta se interpreta como la distribución de probabilidad de la concentración relativa de un conjunto de partículas que parten del mismo punto en el mismo momento, y que se mueven bajo las mismas condiciones generales. Utilizando así la Teoría de los Grandes Números (Feller, 1958), se asume que el desplazamiento de una partícula se puede considerar como la suma de un número grande de desplazamientos elementales independientes uno de otro.

Bear y Bachmat (1967) emplearon un modelo de tubos capilares para obtener una expresión del tensor que rige el flujo de masa debido a la dispersión en base a la geometría del medio, la velocidad de flujo y la difusión molecular representada por una función dependiente del número de Péclet y el radio hidráulico del tubo capilar. La difusión molecular actúa de dos formas diferentes: uno es como fenómeno a escala microscópica que tiene efecto a escala macroscópica. El otro es permitiendo el movimiento de moléculas de soluto entre trayectorias adyacentes, convirtiendo así el fenómeno de dispersión hidrodinámica en irreversible. El coeficiente que rige la dispersión hidrodinámica es la suma del efecto de la dispersión mecánica (debida a las diferentes trayectorias que adoptan las moléculas de soluto) y la difusión molecular.

Saffman (1960) propuso distinguir la dispersión hidrodinámica en una dispersión longitudinal (en dirección de la velocidad de flujo) y una dispersión transversal, y para ello desarrolló una larga expresión para sus coeficientes en el que se tenía en cuenta la velocidad media de flujo, el radio y longitud de los tubos capilares del modelo (obtenidos del tamaño de grano del medio poroso), y el ángulo que éstos tubos forman con la dirección media de flujo.

Bear (1967), desarrolla analíticamente el flujo de masa en un volumen elemental, y atendiendo al balance de masa y la ecuación de continuidad deduce que el proceso de dispersión molecular puede describirse con una ley de tipo fickiano. Así que a la ecuación que integra estos tres procesos para explicar el transporte de solutos en un medio poroso saturado, se la conoce como Ecuación de Convección-Dispersión Fickiana (Advection-Dispersión Equation, o ADE)

En la literatura en castellano se observa un uso casi indistinto de los términos “advección” y “convección” como traducción del término en inglés “advection”. Desgraciadamente, entre los escasos libros destinados a fijar un vocabulario técnico homogéneo en el campo de la hidrogeología (entre los que cabe destacar el

“Vocabulario de Hidrología Subterránea”, editado por la Fundación Centro Internacional de Hidrología Subterránea, 1996) no se establece ninguna traducción precisa para el término. De hecho, incluso en inglés la diferencia entre los términos “advection” y “convection” es bastante difusa. De ese modo, para establecer un criterio en este trabajo, se ha consultado el Diccionario de la Real Academia Española, que determina que:

Convección (Del lat. *convectio*):

1. *f. Fís. Transporte en un fluido de una magnitud física, como masa, electricidad o calor, por desplazamiento de sus moléculas debido a diferencias de densidad o cualquier otra propiedad.*

De ese modo, en adelante se utilizará el término “convección” como traducción al castellano del término “advection”, sin ninguna otra trascendencia que la de usar siempre la misma.

Así pues, la Ecuación de Convección-Dispersión Fickiana proviene de la aproximación clásica a los mecanismos que controlan la evolución de un soluto conservativo en un medio poroso sometido a un gradiente de potencial hidráulico. En ese caso, los procesos considerados son tres procesos fundamentales que ocurren de manera simultánea. Éstos son: convección, difusión y dispersión. La convección consiste en el proceso por el que, si el agua se mueve en determinada dirección a determinada velocidad, todas las sustancias disueltas en el agua se moverán con esa misma dirección y velocidad. La difusión es igualmente fácil de entender y consiste en el transporte de soluto desde las zonas de mayor concentración a las de menor concentración por una serie de movimientos al azar (brownianos), con lo que acabarán ocupando volúmenes cada vez mayores (y, por tanto, su concentración máxima disminuirá). El último proceso, conocido como dispersión, está causado por el hecho de que las trayectorias que deben adoptar las moléculas de soluto sometidas a un gradiente piezométrico nunca son rectas ni en la dirección del gradiente global. De ese modo, las moléculas de soluto se ven forzadas a adoptar trayectorias que cada vez se apartan más unas de otras, con la consiguiente expansión del cuerpo del penacho. Este proceso también hace que el soluto se mueva de zonas con mayor concentración a zonas de menor concentración.

La ecuación de convección-dispersión se formula usando un parámetro clave denominado “dispersividad”, que es una propiedad del acuífero, que describe la distribución de las concentraciones alrededor del centro de masas del penacho originado. Si la dispersión fuese fickiana, esta dispersividad tendría un valor constante en formaciones homogéneas, o lo alcanzaría con el tiempo en formaciones heterogéneas. Sin embargo, numerosos estudios y experimentos ponen en duda esto último, ya que se observa que la dispersividad tiende a aumentar conforme el penacho evoluciona, a un ritmo superior al esperado. Se han propuesto varias explicaciones para este problema, desde la existencia de heterogeneidades no caracterizadas de tamaño

inferior a la escala de trabajo que causarían una dispersión muy alta atribuida al elemento discretizado, hasta que simplemente no se puede considerar correcta la hipótesis de una dispersión fickiana.

La falta de comprensión del funcionamiento del proceso de dispersión en medios porosos ha resultado siempre una limitación para la construcción de modelos numéricos que puedan predecir de manera fiable la evolución de un soluto en el seno de un acuífero. Este fenómeno es importante porque es la causa de que un soluto (sea tóxico o no) en el seno de un acuífero, alcance un punto determinado antes del tiempo calculado a partir del análisis de la velocidad obtenida únicamente a partir del análisis del gradiente piezométrico y la conductividad del medio. Esto, cuando cada vez existe un mayor número de compuestos en el medio ambiente y en el que algunos de ellos son tóxicos aún a concentraciones muy pequeñas, hacen de este problema un asunto importante.

Analizando el fenómeno de la dispersión, se observa que se da por motivos a dos escalas diferentes:

- Microscópica: A nivel de poro, existen diferencias de velocidad entre el agua que discurre por la zona central del poro frente a la que discurre cercana a las paredes. Del mismo modo, al tener que seguir trayectorias de mayor o menor tortuosidad en el seno del medio poroso, la velocidad local del agua a nivel microscópico experimenta desviaciones muy importantes frente a la velocidad media definida por el gradiente medio y la conductividad macroscópica.

- Macroscópica: Parte de la dispersión está causada por la presencia de heterogeneidades en el terreno que hacen que partes del penacho se muevan a mayor o menor velocidad que el resto. A menudo estas heterogeneidades son de una escala menor que aquella en que se ha discretizado el acuífero para su estudio, por lo que su existencia puede pasar desapercibidas a la hora de modelar el transporte. El resultado es que materiales con una dispersividad determinada en el laboratorio, parezcan tener una dispersividad varias órdenes de magnitud superior en el medio natural.

Para tratar estas dificultades, la aproximación general ha sido ajustar los valores de la dispersividad del terreno a posteriori, de manera que el modelo reproduzca de forma correcta la distribución de los datos de concentración de que se dispone. Y una vez ajustado este valor, se asigna esa dispersividad a todos los puntos en los que existe el penacho, como una propiedad común de estos. Es la llamada dispersividad global o central. Esto conlleva una serie de problemas. Hace, por una parte, que el valor de la dispersividad asignada a los diferentes puntos varíe continuamente conforme el penacho evoluciona. Así, la dispersividad deja de ser una constante para ser un parámetro dependiente del tiempo o de la distancia recorrida por el penacho. Del mismo modo, la mayoría de valores obtenidos son demasiado altos para ser representativos, ya que en

realidad se trata de dispersividades equivalentes que recogen la contribución de todas las dispersividades locales de todos los puntos en los que existe el penacho.

En principio, si se pudiese definir el campo local de velocidades con nivel de detalle suficiente, hasta llegar al nivel de poro, el transporte podría ser hipotéticamente modelado únicamente con el término convectivo y una pequeña contribución de la difusión molecular. Sin embargo, el término de dispersión en la ecuación general se introduce debido a que no es posible definir el campo de velocidades de una manera tan exhaustiva que represente las desviaciones locales de la velocidad en todos los puntos. Una alternativa defendida por varios autores (Schwartz, 1977; Smith y Schwartz; 1980, 1981) ha sido la de representar el campo de conductividades de manera estocástica, y de ese modo simular los efectos de la dispersión macroscópica directamente. De ese modo, se demuestra que la forma y la distribución de las heterogeneidades de escala menor que la de discretización son fundamentales en la dispersión final.

Actualmente las vías de investigación principales se centran en el desarrollo de métodos estocásticos de identificación de heterogeneidades o de cálculo de parámetros efectivos. La generalización de los modelos numéricos ha hecho que éstos se utilicen para validar las distintas aproximaciones matemáticas de la difusión o estructuras de conductividad generadas de forma estocástica para intentar reproducir las anomalías del transporte mediante modelos basados en la ecuación de transporte clásica.

Esta investigación sigue un camino diferente al tratar la dispersividad como un parámetro físico local variable espacialmente, frente al punto de vista más frecuente centrado en obtener valores medios en el tiempo y en el espacio de este parámetro. Para ello se ha recurrido a la construcción de un medio artificial en laboratorio, de dimensiones limitadas, que se ha equipado con un sistema de adquisición de datos capaz de definir la evolución de un penacho de trazador y el campo de velocidades locales con el suficiente detalle como para, mediante una adecuada modelación inversa, estimar los valores locales instantáneos de la dispersividad en cada uno de los elementos en que se ha discretizado el medio. Así, mediante una formulación numérica adecuada, puede observarse la evolución temporal de las dispersividades locales y se abre una vía de investigación para analizar la influencia de las dispersividades locales instantáneas sobre el valor de la dispersividad global calculada a partir de los momentos espaciales de segundo orden.

Otro de los problemas relativos al uso de modelos matemáticos para el estudio del transporte de masa surge de la necesidad de discretizar el continuo en una serie de elementos de propiedades homogéneas, momento en que se pierde el efecto de la heterogeneidad de las distintas conductividades presentes en la realidad. Al bloque discretizado se le asigna una conductividad hidráulica equivalente, que no recoge la influencia de estas heterogeneidades en fenómenos como la macrodispersión. Este trabajo, como objetivo adicional, abrir una nueva vía para observar la evolución de la dispersividad local instantánea a distintas escalas, ya que proporciona datos suficientes

como para comparar los resultados de la dispersividad local instantánea a varias escalas de discretización.

Los objetivos de esta tesis son varios. Por una parte trata de la construcción de un dispositivo físico de experimentación de escala intermedia (Intermediate Scale Experiment, ISE) en cuyo interior se construye un medio poroso con patrones de heterogeneidad basados en las características de una formación natural altamente heterogénea. En este tanque se llevarán a cabo varios ensayos de flujo y transporte de solutos en condiciones controladas, monitorizados por un sistema de adquisición de datos capaz de recoger información exhaustiva de la evolución de un penacho de soluto coloreado. Estos datos serán posteriormente tratados según un proceso de tratamiento de imagen digital destinado a proporcionar mapas de concentración de muy alto detalle.

Que tengamos noticia, hasta este momento la bibliografía que describe la experimentación en tanques de laboratorio se ha centrado en la estimación de valores efectivos de la dispersividad, obtenidos mediante el análisis de las curvas de llegada o de momentos espaciales del penacho. Sin embargo, en esta tesis los datos de velocidad local y concentración a lo largo del tiempo, son analizados cuidadosamente para obtener una estimación de los valores de la dispersividad a nivel local y su evolución en el tiempo. Esta investigación pretende proporcionar una evidencia de cómo la dispersividad local estimada, debido a que es un parámetro efectivo, varía en el tiempo y el espacio, su correlación con la conductividad hidráulica y también su dependencia de la “historia” de concentraciones y gradientes en cada elemento de la discretización.

1.3 Organización del documento

El presente documento se organiza en 7 capítulos y dos anexos. En este primer capítulo se introduce el problema del transporte de solutos en medios porosos y los problemas asociados a la predicción de la evolución de un soluto conservativo en el seno de un acuífero. También se han fijado los objetivos que se persiguen con la experimentación en un dispositivo de laboratorio a escala intermedia.

El capítulo 2 supone una revisión de las distintas ecuaciones utilizadas para describir el proceso de transporte, analizando sus limitaciones y relaciones entre ellas. En realidad, debido a la amplitud del tema, algunos conceptos se amplían a lo largo de los distintos capítulos de la tesis, en los momentos en que se recurre a ellos. Este capítulo también presenta una revisión de los experimentos de escala intermedia llevados a cabo en el estudio del transporte de solutos conservativos hasta la fecha y las conclusiones que se han podido extraer de ellos.

El dispositivo de escala intermedia utilizado en este estudio se describe brevemente en el capítulo 3. Sus dimensiones, las características del medio poroso utilizado, las características del sistema de medida y toma de datos, así como su precisión y exactitud son descritas en este capítulo.

El capítulo 4 expone la estrategia a seguir para determinar las dispersividades locales de cada uno de los elementos en que se han discretizado el medio, utilizando para ello los datos obtenidos en la experimentación llevada a cabo en el dispositivo de escala intermedia. El capítulo 5 expone los resultados experimentales y los compara con los obtenidos mediante el modelo numérico construido para reproducir estos experimentos. Las discrepancias serán objeto de análisis y estudio en el capítulo 6, en el que se exponen las conclusiones obtenidas en la investigación llevada a cabo y se apuntan distintas posibilidades para continuar el trabajo iniciado con este documento aprovechando los datos obtenidos.

El capítulo 7 detalla las referencias bibliográficas utilizadas a lo largo de la tesis.

En el primer anexo incluido se describe con mayor profundidad las soluciones constructivas utilizadas en el montaje del dispositivo físico, así como las características técnicas de la instrumentación utilizada. La idea es servir de utilidad y guía para la construcción de otros posibles dispositivos en un futuro. El anexo 2 realiza un estudio detallado sobre la teoría del color y el uso de la imagen digital para obtener medidas de concentración de una elevada resolución espacial y de magnitud, así como la estrategia seguida para la utilización de estas imágenes en el estudio realizado

2. Estado del arte

2.1 Modelación matemática del transporte en medios porosos saturados

Al introducir en el seno de un acuífero un volumen discreto de un soluto conservativo, su evolución posterior vendrá determinada por tres procesos fundamentales: el proceso de difusión, el de convección y el de dispersión hidrodinámica. Este volumen discreto de trazador de concentración conocida evolucionará hacia un tamaño mayor y una menor concentración máxima conforme se desplaza aguas abajo del punto de inyección, sufriendo una dispersión longitudinal en el eje definido por la velocidad del agua subterránea y una dispersión transversal en los ejes perpendiculares.

El fenómeno de dispersión hace que el contaminante acabe ocupando un volumen de acuífero mayor que el debido sólo al arrastre por el movimiento del agua subterránea y la difusión molecular. Caracterizar correctamente este fenómeno tiene especial importancia cuando se trata de predecir la evolución del comportamiento de contaminantes tóxicos o peligrosos. La dispersión es la causa de que los contaminantes lleguen a puntos sensibles (pozos de abastecimiento, ríos o humedales...) antes de lo previsto si tenemos en cuenta únicamente la velocidad media del agua subterránea. Esta llegada más rápida es una característica del proceso de dispersión y se debe a que partes del penacho se mueven más rápido que otras.

Los trabajos pioneros a la hora de caracterizar matemáticamente el fenómeno de dispersión a menudo vienen firmados por Taylor (1921, 1953), y sus esfuerzos tuvieron fruto durante las décadas entre 1950 y 1970 en el que se llevaron a cabo numerosos estudios sobre la dispersión de contaminantes en aguas subterráneas.

La dispersión está creada por causas tanto microscópicas como macroscópicas. A escala microscópica, está causada por diferencias en la velocidad entre las moléculas de fluido que pasan por el centro del espacio poroso y las que pasan cercanas a la pared del poro. También aparece porque, debido a la difusión molecular, algunas moléculas de soluto saltan de una trayectoria de flujo a la trayectoria adyacente, creándose así una propagación todavía mayor.

Entre las primeras investigaciones sobre la dispersión se encuentra la realizada por Slichter (1905), en la que obtuvo curvas de llegada sigmoidales en un ensayo de trazadores en campo. El autor atribuyó la forma de estas curvas a la difusión, aunque posteriormente estudió el fenómeno en laboratorio para concluir que “la propagación del electrolito no puede explicarse únicamente por la difusión molecular, sino por la

continua ramificación y subdivisión del espacio poroso alrededor de los granos de arena de medio”.

Además de este efecto a escala microscópica, la dispersión también viene causada por la presencia de heterogeneidades en el campo de conductividad hidráulica, tal como explican Skibitze y Robinson (1963), en un estudio en que un trazador coloreado evoluciona en el interior de un tanque de arena en el que se construyeron pequeñas zonas de alta conductividad. Skibitze y Robinson demostraron que la presencia de heterogeneidades tiene un efecto muy superior a la dispersión de orden microscópico, tal como confirman estudios en campo entre los que cabe destacar el de Anderson (1979).

Junto a la dispersión, la difusión molecular es el proceso por el cual las moléculas de un soluto se mueven de zonas con mayor concentración a zonas de menor concentración debido al movimiento browniano, de forma que las concentraciones entre las diferentes zonas en las que existe el soluto tienden a homogeneizarse. Está gobernada por la ley de Fick, que establece que el flujo másico debido a la difusión es igual al gradiente de concentración entre un punto y otro del medio multiplicado por una constante de difusión (o “difusividad molecular”) D_d .

La separación entre la dispersión y la difusión es una separación artificial, puesto que ambos son de por sí inseparables. Aún así, la dispersión es un efecto de la heterogeneidad del campo de velocidades y la difusión ocurre incluso en masas de agua en reposo. Por ello, es de esperar que a velocidades muy bajas sea la difusión molecular la que resulte más significativa a velocidades bajas.

Estos mecanismos, junto con el movimiento por el arrastre del agua subterránea a su velocidad media no son los únicos fenómenos que afectan la distribución de las concentraciones de un soluto que se mueve en un acuífero. El soluto puede, además, interactuar con la superficie sólida de la matriz en procesos de adsorción, deposición, disolución en la matriz, intercambio de iones, etc. Otros efectos debidos al propio soluto, como la descomposición radioactiva o reacciones químicas, pueden modificar también la distribución de concentraciones.

Se define como “trazador ideal” aquel soluto inerte que no reacciona con el medio ni afecta a las propiedades de viscosidad o densidad del fluido. En los siguientes puntos, se tratará sobre el comportamiento de trazadores ideales en un medio poroso saturado.

2.2 Ley de Darcy y transporte convectivo

2.2.1 Flujo en medio poroso

En 1856, Henry Darcy presentó la ley básica que describe el flujo en un medio poroso. Esta ley indica que el flujo de agua a través de una columna llena de arena es proporcional al área de la sección de la columna y la diferencia de carga entre sus extremos, e inversamente proporcional a la longitud de la columna. En sistemas multidimensionales, la Ley de Darcy se expresa, de forma simplificada, como:

$$Q = -K \cdot A \frac{h_2 - h_1}{L} \quad (2.1)$$

Donde K es la conductividad hidráulica de la arena, h_1 el potencial hidráulico aguas arriba, h_2 el potencial hidráulico aguas abajo, A es el área transversal y L la longitud de la columna (figura 2.1).

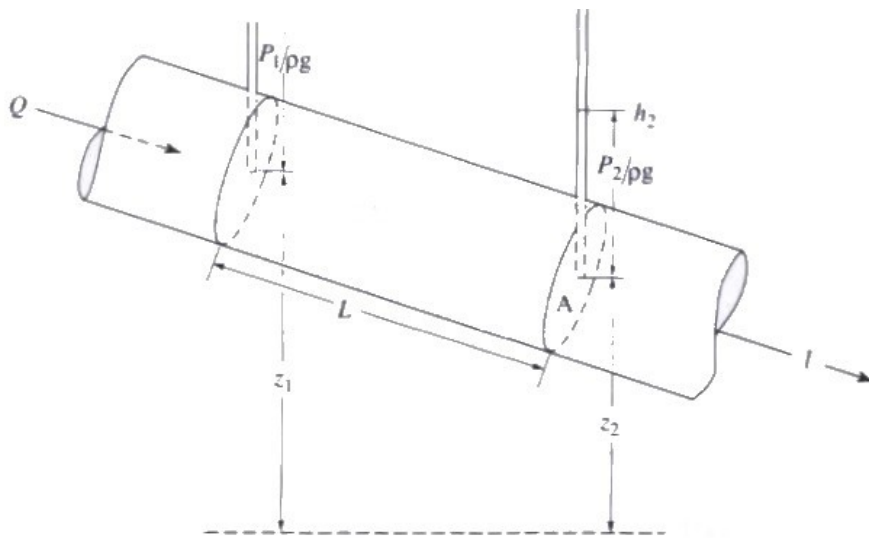


Figura 2.1 - Representación esquemática de la experiencia de Darcy (de “Applied Contaminant Transport Modelling”, Zheng y Bennet, 1995)

Si expresamos esta ecuación en términos de gradiente, la ecuación de Darcy puede expresarse como:

$$Q = -KA \frac{dh}{dl} \quad (2.2)$$

Donde l representa la distancia a lo largo de la columna.

Por lo general no se trata sólo de la cantidad de fluido que pasa a través de la columna, sino el tiempo que necesita el fluido en llegar desde un extremo de la columna al otro. Esta velocidad real es:

$$v = -\frac{K}{\theta_e} \cdot \frac{dh}{dl} \quad (2.3)$$

En realidad, el fluido sólo puede discurrir a través de parte del área transversal (el espacio poroso). A la velocidad que tendría el fluido si circulara por toda la sección del medio poroso (caudal/sección) se la conoce como velocidad de descarga específica o “velocidad de Darcy”). A través del uso de este término, la Ley de Darcy se simplifica a:

$$q = \frac{Q}{A} = -K \frac{dh}{dl} \quad (2.4)$$

2.2.2 Generalización de la Ley de Flujo

En la realidad, rara es la situación en que se pueda asumir que la velocidad de descarga específica o la velocidad real de flujo sea unidimensional y además coincidente con el sistema de coordenadas elegido, por lo que la formulación propuesta en el punto anterior no suele ser adecuada y es necesaria una generalización de esta Ley para que pueda ser aplicada al mayor número posible de casos reales.

En el caso más general, un flujo tridimensional, la velocidad de Darcy puede ser expresada como un vector de componentes:

$$\mathbf{q} = q_x \mathbf{i} + q_y \mathbf{j} + q_z \mathbf{k} \quad (2.5)$$

Donde \mathbf{q} es el vector de la velocidad de Darcy, $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ los vectores unitarios en las direcciones x, y, z , mientras que q_x, q_y, q_z son las componentes escalares del vector \mathbf{q} en las direcciones x, y, z . Podemos caracterizar en el medio poroso tres ejes principales de conductividad hidráulica. Y si los hacemos coincidir con los ejes coordenados, los componentes de la velocidad de Darcy vienen dados por

$$q_x = -K_x \frac{dh}{dx} \quad (2.6)$$

$$q_y = -K_y \frac{dh}{dy} \quad (2.7)$$

$$q_z = -K_z \frac{dh}{dz} \quad (2.8)$$

Donde K_x , K_y , K_z son los componentes de la conductividad hidráulica a lo largo de las direcciones x, y, z . definidas.

Si sustituimos estas expresiones en la ecuación de Darcy, y la expresamos en términos de potencial hidráulico, obtenemos la conocida expresión para la ecuación de flujo (Freeze, 1993):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) + q_s = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.9)$$

Donde q_s es el término debido a las fuentes/sumideros de flujo y S_s es el llamado “coeficiente de almacenamiento”, o volumen de agua liberado en una unidad de volumen de acuífero cuando el nivel hidráulico disminuye en una unidad.

2.2.3 Balance de masa y enfoque euleriano del transporte convectivo

Establecemos un balance de masa para un volumen diferencial definido por dos secciones de una columna de área transversal separadas una distancia Δl . La masa Q_m de soluto transportada a través del área transversal A será la correspondiente a la que viene en el caudal que la atraviesa disuelta a una concentración C .

$$Q_m = QC \quad (2.10)$$

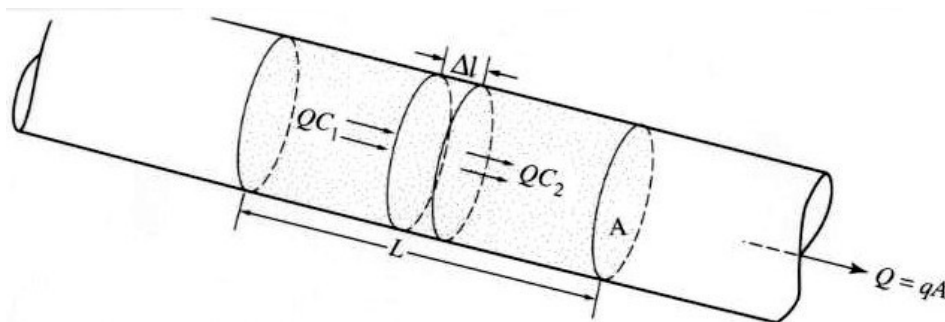


Figura 2.2 – Balance de masa en un diferencial de volumen $A \cdot \Delta l$ (de “Applied Contaminant Transport Modelling”, Zheng y Bennet, 1995)

Si utilizamos el vector de la velocidad de Darcy, \mathbf{q} , puede calcularse un vector de flujo másico \mathbf{q}_m de dirección igual a la de \mathbf{q} y módulo igual a la masa de soluto

transportada de forma convectiva por unidad de tiempo a través de una unidad de área normal al flujo. Este vector de flujo másico viene definido por la expresión:

$$\mathbf{q}_m = \mathbf{q}C = C \cdot (q_x \mathbf{i} + q_y \mathbf{j} + q_z \mathbf{k}) \quad (2.11)$$

La tasa de acumulación de masa de soluto por unidad de tiempo en el diferencial de volumen, si consideramos que el flujo es estacionario, vendrá dada por la diferencia de concentración de soluto a la entrada y a la salida:

$$\frac{dM}{dt} = Q(C_1 - C_2) = qA(C_1 - C_2) \quad (2.12)$$

Lo que es cierto si asumimos que no hay transporte de masa desde o hacia columnas de arena vecinas debido a otras componentes del transporte como la dispersión, que trataremos más adelante. El volumen de agua contenido en el diferencial de volumen $A \cdot \Delta l$ es igual a $\theta_e \cdot A \cdot \Delta l$. Y si consideramos que C representa la concentración media en ese diferencial de volumen, la masa de soluto contenida en él en cualquier instante t viene dada por $\theta_e \cdot A \cdot \Delta l \cdot C$. Por tanto, el ritmo al que esta masa de soluto del interior del diferencial de volumen cambia, viene dada por:

$$\frac{dM}{dt} = \theta_e A \cdot \Delta l \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.13)$$

Igualando ambas expresiones:

$$qA(C_1 - C_2) = \theta_e A \Delta l \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.14)$$

Si consideramos el término $(C_1 - C_2)$ como un gradiente entre los dos extremos del diferencial de volumen y lo introducimos en la fórmula, obtenemos la ecuación del transporte convectivo:

$$-q \frac{\partial C}{\partial l} = \theta_e \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.15)$$

Bajo condiciones más generales, podemos suponer un diferencial de volumen que no esté alineado con la dirección de flujo sino con un sistema de coordenadas tal que podamos definirlo como el producto de $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ (figura 2.4). El área transversal a la componente q_x del flujo será $\Delta y \cdot \Delta z$. Así que la diferencia neta entre la entrada y salida de masa de soluto en el elemento a través de la dirección x vendrá dada por:

$$-\frac{\partial}{\partial x} (q_x C) \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \quad (2.16)$$

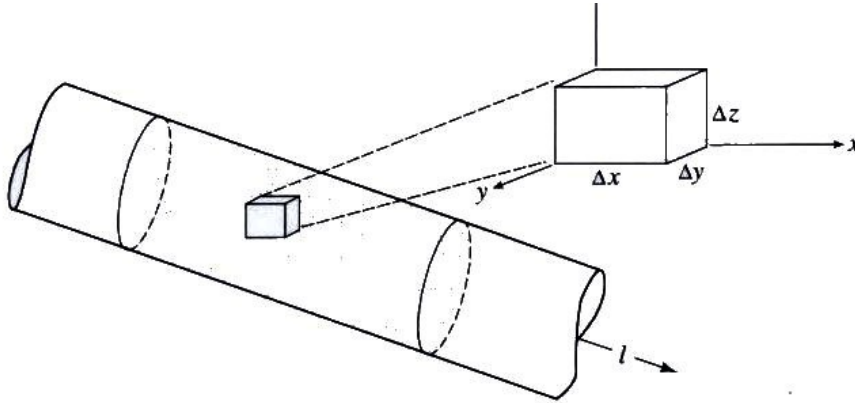


Figura 2.3 – Diferencial de volumen no alineado de dimensiones $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$ (de “Applied Contaminant Transport Modelling”, Zheng y Bennet, 1995)

Podemos, del mismo modo, generalizar para las direcciones y, z, de forma que la diferencia neta entre la entrada y la salida total de masa de soluto viene dada por:

$$-\left[\frac{\partial}{\partial x}(q_x C) + \frac{\partial}{\partial y}(q_y C) + \frac{\partial}{\partial z}(q_z C) \right] \Delta x \Delta y \Delta z \quad (2.17)$$

Si definimos como Q_s la tasa volumétrica a la que se añade o sustrae agua del diferencial a través de las fuentes o sumideros, y C_s la concentración de soluto en el agua añadida o sustraída, el producto $Q_s C_s$ representará la tasa neta a la que se añade o sustrae masa de soluto del diferencial de volumen a través de sus fuentes o sumideros. Así que este término debe ser añadido como una componente más en el cálculo de la tasa neta de cambio de masa de soluto.

$$-\left[\frac{\partial}{\partial x}(q_x C) + \frac{\partial}{\partial y}(q_y C) + \frac{\partial}{\partial z}(q_z C) \right] \Delta x \Delta y \Delta z + Q_s C_s \quad (2.18)$$

La tasa de acumulación de masa de soluto en un elemento es, por definición, la tasa de cambio de la concentración de soluto en el diferencial de volumen:

$$\theta_e \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \frac{\partial C}{\partial t}$$

Igualando y simplificando, obtenemos la expresión general para el transporte convectivo:

$$-\frac{\partial}{\partial x}(q_x C) - \frac{\partial}{\partial y}(q_y C) + \frac{\partial}{\partial z}(q_z C) + Q_s C_s = \theta_e \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.19)$$

Que, si recordamos que $v = \frac{q}{\theta_e}$, podemos seguir simplificando a otra expresión, en función de la velocidad real:

$$-\frac{\partial}{\partial x}(v_x C) - \frac{\partial}{\partial y}(v_y C) + \frac{\partial}{\partial z}(v_z C) + \frac{q_s}{\theta_e} C_s = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.20)$$

Donde q_s es la tasa volumétrica de entrada de flujo a través de fuentes o sumideros. Esta última ecuación puede expresarse de manera más compacta utilizando su forma vectorial o su forma en subíndices:

$$-\nabla \cdot (\mathbf{v}C) + \frac{q_s}{\theta_e} C_s = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.21)$$

$$-\frac{\partial}{\partial x_i}(v_i C) + \frac{q_s}{\theta_e} C_s = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.22)$$

Que son distintas formas, en definitiva, de la componente convectiva de la Ecuación de transporte. Este tipo de ecuaciones, en las que la derivada $\frac{\partial C}{\partial t}$ indica la tasa de cambio en la concentración de soluto para un punto fijo en el espacio se conocen como “expresiones eulerianas”. Para obtener la solución de las ecuaciones eulerianas se pueden utilizar directamente la mayoría de métodos numéricos. Sin embargo, en ciertas ocasiones la solución directa de la forma euleriana de la ecuación de transporte de masa viene dificultada por un problema serio, llamado “dispersión numérica”

2.2.4 Enfoque lagrangiano del transporte convectivo

Una forma de evitar esta dispersión numérica consiste en adoptar otro enfoque para tratar el fenómeno del transporte de masa convectivo. Bajo este otro punto de vista, la concentración de soluto no se asocia a puntos o elementos de volumen del espacio, sino que se asigna una determinada concentración a partículas concretas del fluido, que se mueven con la dirección y velocidad del flujo. Para averiguar la concentración de soluto en un punto, se hace un recuento de cuántas de estas partículas marcadas hay en esa posición. A este enfoque se lo conoce como “enfoque lagrangiano”, y se puede derivar una expresión matemática para ello a partir de la ecuación de transporte por flujo convectivo:

$$-\frac{\partial}{\partial x_i}(v_i C) + \frac{q_s}{\theta_e} C_s = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.23)$$

Desarrollando el primer elemento de la ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) = v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} + C \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (2.24)$$

El término $\frac{\partial v_i}{\partial x_i}$ es lo que se conoce como “divergencia de flujo”, o flujo de salida de masa por unidad de volumen de poro. Es decir, igual a $\frac{q_s}{\theta_e}$

Sustituyendo en la ecuación de transporte convectivo (2.23):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \frac{q_s}{\theta_e} (C_s - C) \quad (2.25)$$

El término de la izquierda representa la tasa de cambio de concentración asociada a una partícula o elemento de fluido que se mueve a lo largo de una trayectoria de flujo. Puesto que según el enfoque lagrangiano, la concentración C está asociada a un elemento del fluido, en el caso de transporte puramente convectivo en régimen estacionario, la concentración asociada a las partículas procedentes de una fuente es igual a la concentración asociada a la propia fuente. Y la concentración asociada a los sumideros es igual a la asociada a las partículas que entran ese sumidero. El significado de esto es que los términos C y C_s son equivalentes en el caso del transporte convectivo estacionario. Por tanto:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = 0 \quad (2.26)$$

Esta ecuación indica que la concentración asociada a un elemento de fluido, según este enfoque permanece constante a lo largo de todo su camino a través de la trayectoria de flujo. Por ello, la solución al problema del transporte convectivo bajo el enfoque lagrangiano pasa por establecer correctamente las trayectorias de flujo en un medio de conductividad hidráulica heterogénea.

2.3 *Dispersión, difusión y transferencia de masa*

2.3.1 Introducción

En el punto anterior se ha hecho una generalización que en los casos reales no se observa: que todas las partículas de fluido y soluto se mueven a lo largo de sus trayectorias con una velocidad igual a la velocidad media del fluido. Sin embargo, existen numerosos factores por los cuales la velocidad instantánea de una partícula fluctúa en un ancho rango. Por ejemplo, las partículas de soluto pueden ver modificada su velocidad instantánea por la existencia de gradientes de concentración. Aunque este efecto sea despreciable a velocidades altas, si la velocidad es muy pequeña, puede ser una componente significativa del campo de velocidades. Del mismo modo, la tortuosidad y la heterogeneidad microscópica a escala de poro hace que las partículas de soluto tengan velocidades instantáneas diferentes según discurren por el centro del poro o por su parte externa. Y, finalmente, la alta heterogeneidad de los medios naturales hace que las distintas trayectorias de flujo discurren por zonas de muy diferente conductividad hidráulica, por lo que las partículas de soluto desarrollan velocidades instantáneas muy diferentes según la trayectoria por la que discurren (figura 2.4)



Figura 2.4 – Factores que causan la dispersión longitudinal a escala de poro (Fuente: Freeze y Cherry, 1993)

Históricamente la principal causa para explicar la desviación de los resultados de campo frente a los resultados teóricos en el transporte ha sido la heterogeneidad de la conductividad hidráulica no descrita. Sin embargo, la teoría de la dispersión parte de la descripción de la influencia de distintos fenómenos tanto a escala microscópica como macroscópica.

2.3.2 Procesos microscópicos

2.3.2.1 Difusión fickiana

La experiencia nos demuestra que cuando introducimos un soluto en agua, éste se difunde desde las zonas de mayor concentración a las zonas de menor concentración. De esta observación simple se comprende que para que tenga lugar el fenómeno de la difusión, la distribución espacial de moléculas no puede ser homogénea, sino que debe existir una diferencia o gradiente de concentración de ese soluto entre dos puntos del medio.

Si suponemos que la concentración de un soluto n varía con la posición a lo largo del eje x , y llamamos J a la densidad de corriente de partículas de soluto (es decir, al número efectivo de partículas que atraviesan en la unidad de tiempo un área unitaria perpendicular a la dirección en la que tiene lugar la difusión), la ley de Fick afirma que la densidad de corriente de partículas es proporcional al gradiente de concentración:

$$J = -D^* \frac{\partial c}{\partial x} \quad (2.27)$$

La constante de proporcionalidad se denomina coeficiente de difusión D y es característico tanto del soluto como del medio en el que se disuelve. Si realizamos un balance de masa en un diferencial de volumen formado por dos áreas A transversales al flujo separadas una distancia Δl (figura 2.5), la acumulación de partículas en la unidad de tiempo que se produce en el elemento de volumen $A \cdot dx$ es igual a la diferencia entre el flujo entrante $J \cdot A$, menos el flujo saliente $J' \cdot A$, es decir

$$J \cdot A - J' \cdot A = \frac{\partial J}{\partial x} \cdot A dx \quad (2.28)$$

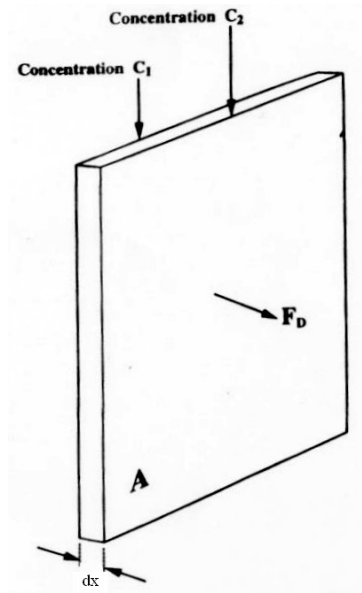


Figura 2.5 – Diferencial de volumen $A \cdot dx$ (de “Groundwater”, Freeze y Cherry, 1979)

Por lo que la acumulación de partículas en el elemento diferencial de volumen por unidad de tiempo es:

$$(A dx) \frac{\partial c}{\partial t} \quad (2.29)$$

Igualando ambas expresiones y utilizando la Ley de Fick (ecuación (2.27)), se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D^* \frac{\partial c}{\partial x} \right) = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (2.30)$$

Que es la ecuación diferencial en derivadas parciales que describe el fenómeno de la difusión. Si el coeficiente de difusión D^* no depende de la concentración, la ecuación (2.30), se puede expresar como:

$$\frac{1}{D^*} \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.31)$$

Si consideramos el problema de la difusión unidimensional de una masa M de soluto, a lo largo del eje x , la solución de la ecuación diferencial nos da la concentración en los puntos x del medio en cada instante de tiempo t .

$$c(x,t) = \frac{M}{2\sqrt{\pi D^* t}} \cdot \exp\left(\frac{-x^2}{4D^* t}\right) \quad (2.32)$$

Aplicando el principio de conservación de la masa M y considerando que la difusión es unidimensional a lo largo del eje x :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} c(x,t) dx = 2 \int_0^{\infty} \frac{M}{2\sqrt{\pi D^* t}} \exp\left(\frac{-x^2}{4D^* t}\right) dx = M \quad (2.33)$$

Para resolver esta ecuación, se emplea el resultado de la integral

$$\int_0^{\infty} \exp(-\alpha x^2) dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad (2.34)$$

La solución de la ecuación de la difusión, (2.31) es:

$$c(x,t) = \frac{c_0}{2} \left[1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{D^* t}}\right) \right] \quad (2.35)$$

Siendo erf la función de error, que se define como:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-z^2) dz \quad (2.36)$$

Un detalle importante a desarrollar ocurre cuando introducimos el desplazamiento cuadrático medio de la nube de partículas a lo largo del eje:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{M} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 c(x,t) dx = \frac{1}{\sqrt{\pi D^* t}} \int_0^{\infty} x^2 \exp\left(\frac{-x^2}{4D^* t}\right) dx \quad (2.37)$$

Lo que arroja como resultado:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi D^* t}} \int_0^{\infty} x^2 \exp\left(\frac{-x^2}{4D^* t}\right) dx = 2D^* t \quad (2.38)$$

Esto supone que la contribución de la difusión al desplazamiento de una masa M de partículas es proporcional a la raíz cuadrada del tiempo.

El valor de D^* es menor que el valor del coeficiente de difusión molecular establecido en laboratorio, puesto que en el medio poroso hay que tener en cuenta la tortuosidad de las trayectorias (Bear, 1972). Puesto que es imposible tener una idea suficientemente detallada de las trayectorias de flujo individuales, el factor de tortuosidad que relaciona D_0 (coeficiente de difusión molecular en agua libre) y D^* (coeficiente de difusión molecular efectivo en medio poroso), se establece por métodos empíricos, aunque su valor es siempre menor que 1. Freeze y Cherry (1979) establecen valores para el factor de tortuosidad en el rango de entre 0,5 y 0,01. De Marsily (1986) cita valores de 0,1 para arcillas y 0,7 para arenas. Los valores de D_0 para la práctica totalidad de especies químicas solubles pueden encontrarse en la literatura química.

2.3.2.2 Mecanismo no fickiano de difusión

Hace cerca de 80 años, investigando la difusión de dos fluidos en régimen turbulento desarrollado, Richardson observó la existencia de un fenómeno de transporte caracterizado por un desplazamiento cuadrático medio (MSD) proporcional no al tiempo t (tal como se predice en la ecuación de Fick), sino a t elevado al cubo (Richardson, 1926). Estas conclusiones dieron lugar a finales de los 60 a un nuevo enfoque en el fenómeno de la difusión, basado en las cinéticas fraccionarias. Hoy en día, el fenómeno del transporte está caracterizado por un desplazamiento cuadrático medio proporcional a t^α , y cuando α es distinto de 1, el fenómeno es conocido como transporte anómalo, aunque en realidad sea un fenómeno más habitual que el caso “no anómalo”.

En el caso en que $\alpha < 1$, la difusión es más lenta que en el caso de la difusión estándar y se conoce con el nombre de subdifusión; y análogamente cuando $\alpha > 1$ la difusión es más rápida y se conoce como superdifusión. Se han observado numerosas evidencias experimentales desde los trabajos de Richardson que confirman la existencia de estos fenómenos en campos como la física, química, biología, geología, etc. La mayoría de las interpretaciones teóricas se basan en el enfoque de la cinética fraccionaria, que generaliza la segunda Ley de Fick, la ecuación de Fokker-Planck y el marco de trabajo de los random-walks continuos en el tiempo (CRTW) desarrollados por Montroll y Weiss (Montroll y Weiss, 1965).

2.3.2.3 Mecanismo de dispersión hidrodinámica

Si observamos el flujo de agua en el interior de un poro microscópico, nos damos cuenta de que la velocidad instantánea de las moléculas de agua o soluto que se encuentren en el centro de la trayectoria es de módulo mayor que la de aquellas

partículas más cercanas al borde, llegando ésta a ser nula en las paredes del poro (figura 2.6). Puesto que las trayectorias a lo largo del medio poroso son, por fuerza, tortuosas, la velocidad instantánea varía asimismo de dirección de un punto a otro.

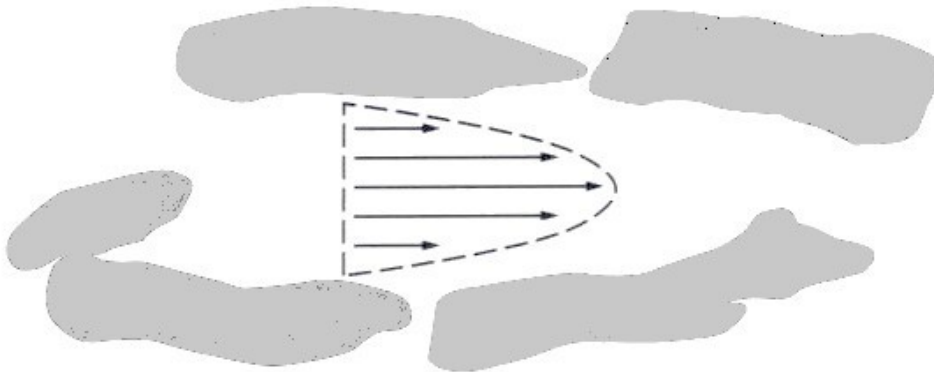


Figura 2.6 – Perfil de velocidades en el interior de un poro (de “Applied Hydrogeology”, Fetter, 1993)

La dispersión consiste en la suma de dos fenómenos: la difusión molecular y la dispersión mecánica a escala de poro. El medio poroso consiste en un complejo sistema de pequeños canales por los que fluye el agua y los materiales que lleva disueltos. Las variaciones en la velocidad local, tanto en magnitud como en dirección, a lo largo de estas trayectorias tortuosas en el interior de los poros, causan la dispersión de la masa inicial para pasar a ocupar un volumen cada vez mayor del medio. Este proceso de mezcla y dispersión, cuyo eje se considera a lo largo del eje de la trayectoria, se conoce como **dispersión longitudinal**, mientras que si se considera en las direcciones normales a la de la trayectoria se llama **dispersión transversal** (Figura 2.7). En ambos casos, la dispersión es resultado de la interacción de dos fenómenos básicos: convección y difusión.

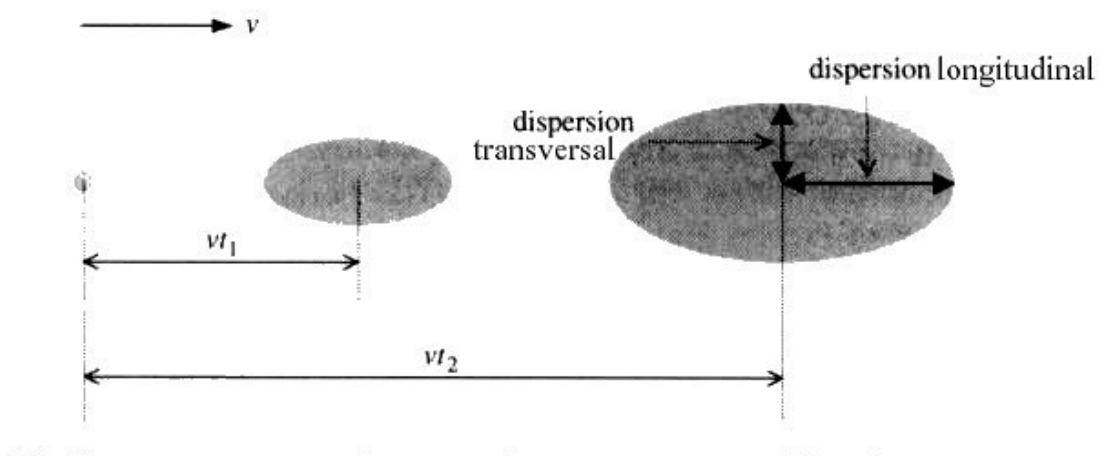


Figura 2.7 – Efectos de la dispersión longitudinal y transversal sobre una inyección puntual (de “Applied Hydrogeology”, Fetter, 1993)

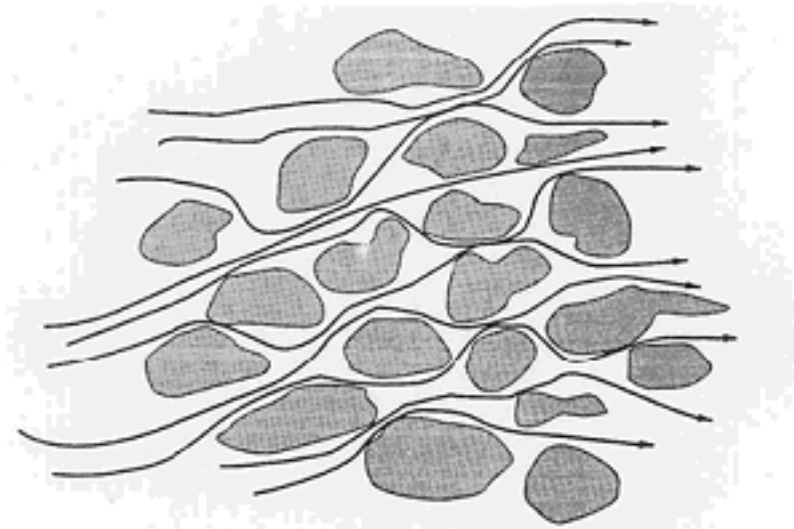


Figura 2.8 – Dispersión causada por el flujo a través de medios porosos heterogéneos (de “Applied Hydrogeology”, Fetter, 1993)

En los cálculos del campo de velocidades, estas variaciones microscópicas no se tienen en cuenta, puesto que la variación en un punto se contrarresta con la variación en otro y los resultados globales son el valor de la velocidad y dirección promedio, que es lo que se recoge en la ley de transporte convectivo.

Sin embargo, si el transporte de masa se diera solamente por transporte convectivo, cualquier inyección puntual de soluto en un medio conservaría su forma y concentración máxima intactas a lo largo de toda su trayectoria, pudiendo obtener el tiempo de llegada a cualquier punto sin más que utilizando la velocidad instantánea.

Esto no es lo que sucede en la realidad. Si observásemos las curvas de llegada a lo largo de una serie de puntos colocados en el centro de masas de una inyección puntual de soluto, veríamos que la concentración máxima disminuye, y la curva concentración/tiempo ensancha su base conforme nos alejamos del origen. Esto indica que con la distancia recorrida cada vez más partículas llegan antes o después de lo que la velocidad promedio de flujo indica, debido a que cada vez más partículas de soluto se desvían por trayectorias diferentes a la del centro de masas de la pluma. (Figura 2.9)

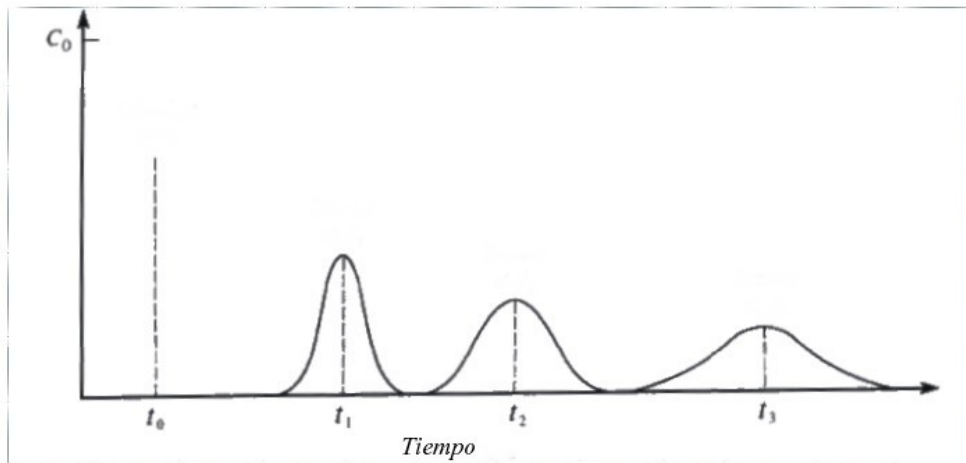


Figura 2.9 – Efecto de la dispersión sobre la curva de llegada (de “Applied Contaminant Transport Modelling”, Zheng y Bennet, 1995)

Tal como hemos explicado, una partícula de soluto experimenta una velocidad instantánea que es el resultado de dos componentes. Una debida al gradiente de flujo, v , que la lleva a desplazarse según la dirección y velocidad promedio establecidos en la ecuación de transporte convectivo. Y otra componente instantánea debida al efecto conjunto de gradientes de concentración, tortuosidad de los poros y los efectos de borde, v'

Si observamos la figura 2.10, veremos que existen dos componentes en la velocidad instantánea. Una longitudinal, v'_l a lo largo de la velocidad y dirección media del flujo, y otra transversal, normal a la dirección del flujo medio, v'_N .

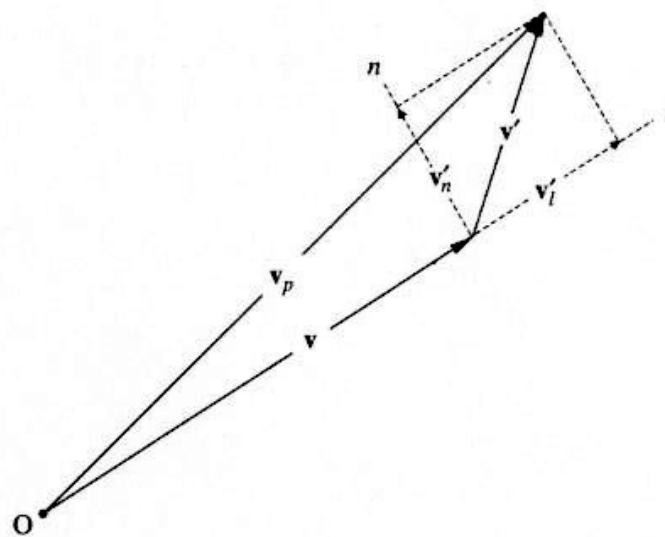


Figura 2.10 – Componentes de la velocidad de flujo (de “Applied Contaminant Transport Modelling”, Zheng y Bennet, 1995)

Puesto que hemos supuesto un régimen estacionario, es de esperar que la velocidad instantánea sea una función de la posición, y que con un conocimiento suficientemente detallado del medio, podríamos modelar correctamente las componentes de la velocidad instantánea en cualquier punto. Y, en consecuencia, ser capaces de conocer la distribución exacta de la pluma de soluto en cualquier momento t .

Obviamente esto es imposible, puesto que no podemos conocer ni la estructura del medio poroso con tal nivel de exactitud ni la influencia que esta estructura tiene sobre la velocidad instantánea. En lugar de ello se adopta otro enfoque, consistente en tomar la diferencia entre la velocidad instantánea y la velocidad promedio como una cantidad aleatoria, que puede ser conocida únicamente como una función de distribución de probabilidad. Se asume con ello que, a partir de un número suficientemente representativo de poros (es decir, un tamaño de medio lo suficientemente grande), los vectores diferencia generados puedan llegar a simular la distribución real de soluto sin más que ajustando los parámetros estocásticos que rigen la distribución aleatoria.

Por tanto, dividimos el problema de la dispersión hidrodinámica en dos partes:

- un movimiento promedio determinístico generado por el gradiente hidráulico, que viene descrito en la ecuación del transporte convectivo
- un movimiento pseudo-aleatorio debido a efectos no descritos en la ecuación general de flujo que da lugar a la dispersión hidrodinámica o transporte dispersivo. Éste incluye los efectos conjuntos de la dispersión mecánica y la difusión molecular

2.3.2.4 Analogía entre el flujo dispersivo y la Ley de Fick (Dispersión fickiana)

El modelo clásico de difusión, o Ley de Fick, describe cómo las partículas de soluto, sometidas al efecto del movimiento browniano, tienden a desplazarse de las zonas donde están con mayor concentración a las zonas con menor concentración hasta (en un sistema cerrado) llegar a igualar su concentración en todos los puntos del sistema. Este tema se ha tratado ya en detalle en el punto anterior.

Puesto que la Ley de Fick parte de la existencia de un movimiento aleatorio de las partículas en presencia de un gradiente de concentración, podemos utilizar analogías a la Ley de Fick para modelar el comportamiento de un vector diferencia de velocidad de las partículas de soluto (Taylor, 1953; Aris, 1956). De hecho, puesto que uno de los

efectos a los que se ven sometidas las partículas de soluto en el transporte de masa es a un transporte difusivo según la Ley de Fick, resulta muy adecuado utilizar esta misma ley para describir también la componente dispersiva del movimiento. Al menos con una serie de modificaciones. Entre ellas se establece que la componente longitudinal del transporte dispersivo es proporcional al gradiente de concentración en dirección longitudinal, que es diferente a la componente transversal, dependiente del gradiente de concentración transversal.

Puesto que el transporte dispersivo sucede tanto en dirección normal al flujo como transversal, la dirección adoptada por una partícula de soluto tendrá componentes normal y transversal al flujo medio. Por ello es conveniente definir un vector \mathbf{W} de dirección la del flujo dispersivo resultante y magnitud igual a la masa de soluto que atraviesa una unidad de área de fluido normal a \mathbf{W} por unidad de tiempo. \mathbf{W} tiene por tanto dos componentes, un W_n en dirección normal al flujo y un W_L en dirección longitudinal al flujo. Estas componentes son:

$$\mathbf{W}_N = -\alpha_N |\mathbf{v}| \frac{\partial C}{\partial n} \mathbf{N} \quad (2.39)$$

$$\mathbf{W}_L = -\alpha_L |\mathbf{v}| \frac{\partial C}{\partial l} \mathbf{L} \quad (2.40)$$

Donde \mathbf{L} es el vector en la dirección l del flujo y \mathbf{N} el vector en la dirección normal al flujo, n . Las constantes α_L y α_N son las dispersividades longitudinal y transversal, que son características del medio poroso referidas para el flujo dispersivo según la dirección longitudinal y transversal (figura 2.11)

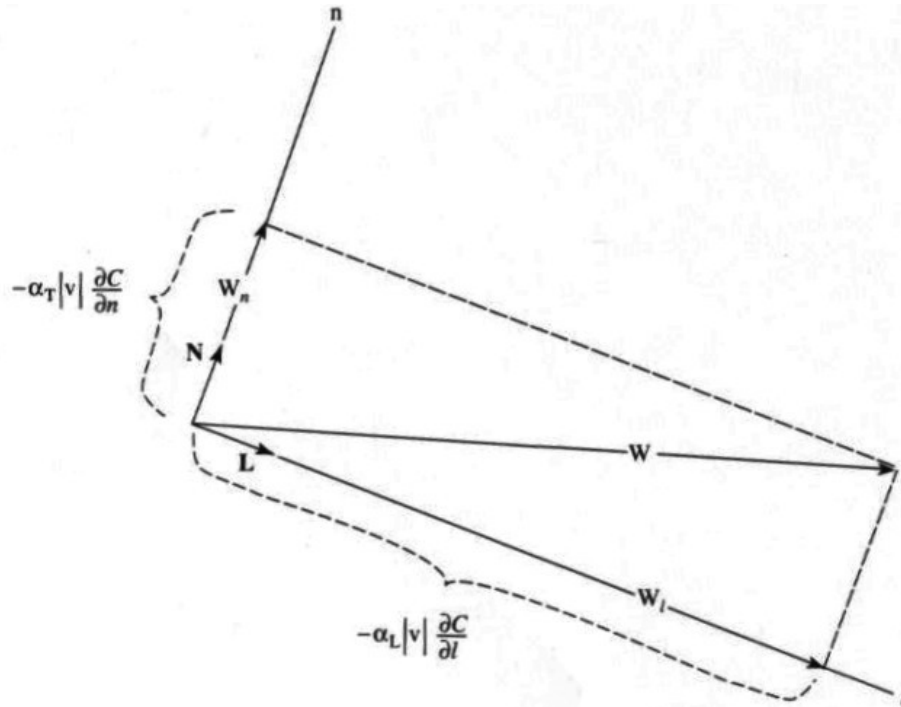


Figura 2.11 – Componentes del vector de transporte W (de “Applied Contaminant Transport Modelling”, Zheng y Bennet, 1995)

Podemos generalizar este vector W para un sistema de coordenadas cartesiano cualquiera, trasladando las componentes de los vectores v , L y N al espacio formado por i, j, k .

$$v = v_x i + v_y j \quad (2.41)$$

Por tanto:

$$|v| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2} \quad (2.42)$$

Desarrollando el cambio de base, obtenemos que:

$$W_L = -\alpha_L |v| \frac{\partial C}{\partial l} L = -\alpha_L \left(\frac{v_x v_x}{|v|} i + \frac{v_x v_y}{|v|} j \right) \frac{\partial C}{\partial x} - \alpha_L \left(\frac{v_y v_x}{|v|} i + \frac{v_y v_y}{|v|} j \right) \frac{\partial C}{\partial y} \quad (2.43)$$

$$W_N = -\alpha_N |v| \frac{\partial C}{\partial l} N = -\alpha_N \left(\frac{v_y v_y}{|v|} i + \frac{v_y v_x}{|v|} j \right) \frac{\partial C}{\partial x} - \alpha_N \left(\frac{v_x v_y}{|v|} i + \frac{v_x v_x}{|v|} j \right) \frac{\partial C}{\partial y} \quad (2.44)$$

El vector resultante de la suma de ambos será el vector W :

$$\begin{aligned} \mathbf{W} = \mathbf{W}_L + \mathbf{W}_N = & -\alpha_L \left(\frac{v_x v_x}{|\mathbf{v}|} \mathbf{i} + \frac{v_x v_y}{|\mathbf{v}|} \mathbf{j} \right) \frac{\partial C}{\partial x} - \alpha_L \left(\frac{v_y v_x}{|\mathbf{v}|} \mathbf{i} + \frac{v_y v_y}{|\mathbf{v}|} \mathbf{j} \right) \frac{\partial C}{\partial x} \\ & - \alpha_N \left(\frac{v_y v_y}{|\mathbf{v}|} \mathbf{i} + \frac{v_y v_x}{|\mathbf{v}|} \mathbf{j} \right) \frac{\partial C}{\partial y} - \alpha_N \left(\frac{v_x v_y}{|\mathbf{v}|} \mathbf{i} + \frac{v_x v_x}{|\mathbf{v}|} \mathbf{j} \right) \frac{\partial C}{\partial y} \end{aligned} \quad (2.45)$$

Podemos simplificar los términos entre paréntesis de tal modo que:

$$W_x = -D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} - D_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \quad (2.46)$$

$$W_y = -D_{yy} \frac{\partial C}{\partial x} - D_{yx} \frac{\partial C}{\partial y} \quad (2.47)$$

Que, en forma matricial resulta:

$$\begin{pmatrix} W_x \\ W_y \end{pmatrix} (\mathbf{i}, \mathbf{j}) = - \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial C}{\partial x} \\ \frac{\partial C}{\partial y} \end{pmatrix} (\mathbf{i}, \mathbf{j}) \quad (2.48)$$

Si generalizamos para flujo en tres dimensiones, la expresión será similar:

$$\begin{pmatrix} W_x \\ W_y \\ W_z \end{pmatrix} (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) = - \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial C}{\partial x} \\ \frac{\partial C}{\partial y} \\ \frac{\partial C}{\partial z} \end{pmatrix} (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \quad (2.49)$$

Y los distintos coeficientes serán:

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{|\mathbf{v}|} + \alpha_N \frac{v_y^2}{|\mathbf{v}|} + \alpha_N \frac{v_z^2}{|\mathbf{v}|} + D^* \quad (2.50)$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{v_y^2}{|\mathbf{v}|} + \alpha_N \frac{v_x^2}{|\mathbf{v}|} + \alpha_N \frac{v_z^2}{|\mathbf{v}|} + D^* \quad (2.51)$$

$$D_{zz} = \alpha_L \frac{v_z^2}{|\mathbf{v}|} + \alpha_N \frac{v_x^2}{|\mathbf{v}|} + \alpha_N \frac{v_y^2}{|\mathbf{v}|} + D^* \quad (2.52)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_N) \frac{v_x v_y}{|\mathbf{v}|} \quad (2.53)$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_N) \frac{v_x v_z}{|\mathbf{v}|} \quad (2.54)$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_N) \frac{v_y v_z}{|\mathbf{v}|} \quad (2.55)$$

El término D^* es el coeficiente de difusión molecular efectiva, y representa la contribución de la difusión molecular al transporte de soluto. Por lo general esta contribución es muy pequeña, pero a bajos valores de v puede ser un factor importante.

2.4 Desarrollo de la ecuación de convección-dispersión

Puesto que en el transporte de masa en el seno de un medio poroso intervienen tanto la convección como la dispersión, es evidente que es necesario desarrollar una ecuación general que incluya ambos aspectos. Para simplificar este desarrollo, suponemos un elemento de volumen de tamaño $\Delta m \cdot \Delta n \cdot \Delta l$, siendo l la dirección del flujo y m, n las direcciones normales. Puesto que l es la dirección de flujo, sólo hemos de considerar el transporte convectivo en la coordenada l . El área transversal que atraviesa el flujo será $\Delta m \cdot \Delta n$, por lo que el transporte convectivo a través de ese área será $qC \cdot \Delta m \cdot \Delta n$. La diferencia neta de flujo convectivo entre las dos caras del elemento será:

$$-\frac{\partial}{\partial l}(qC) \cdot \Delta l \cdot \Delta m \cdot \Delta n \quad (2.56)$$

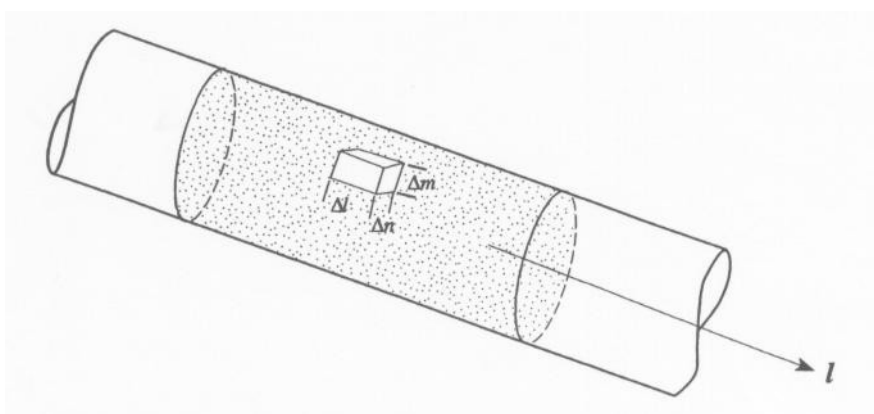


Figura 2.12 – Elemento de volumen alineado con el flujo (de “Applied Contaminant Transport Modelling”, Zheng y Bennet, 1995)

Y, puesto que la dirección del flujo sucede únicamente en la componente l , la dispersión longitudinal sucede sólo a través del área $\Delta m \cdot \Delta n$, la componente dispersiva longitudinal del transporte será:

$$\frac{\partial}{\partial l} \left(\theta \cdot D_L \frac{\partial C}{\partial l} \right) \Delta l \cdot \Delta m \cdot \Delta n \quad (2.57)$$

La dispersión transversal ocurrirá únicamente en las direcciones m y n , si suponemos que la dispersividad transversal es igual en ambas direcciones, la tasa de transporte de masa por este concepto en la dirección n será:

$$-D_n \frac{\partial C}{\partial n} \theta \cdot \Delta m \cdot \Delta l \quad (2.58)$$

Y la diferencia entre la entrada y salida de masa en la dirección n, será:

$$\frac{\partial}{\partial n} \left(\theta \cdot D_n \frac{\partial C}{\partial n} \right) \Delta n \cdot \Delta l \cdot \Delta m \quad (2.59)$$

Y, análogamente en la dirección m:

$$\frac{\partial}{\partial m} \left(\theta \cdot D_m \frac{\partial C}{\partial m} \right) \Delta m \cdot \Delta l \cdot \Delta n \quad (2.60)$$

La tasa de acumulación de masa de soluto en el interior del elemento es igual a:

$$\frac{\partial(\theta \cdot C)}{\partial t} \Delta l \cdot \Delta m \cdot \Delta n \quad (2.61)$$

Añadiendo el valor de la masa de soluto entrante o saliente por fuentes o sumideros en el interior del diferencial, $Q_s C_s$, el balance de masa general será:

$$\frac{\partial(\theta \cdot C)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial l}(qC) + \frac{\partial}{\partial l} \left(D_l \frac{\partial C}{\partial l} \right) + \frac{\partial}{\partial l} \left(D_n \frac{\partial C}{\partial n} \right) + \frac{\partial}{\partial l} \left(D_m \frac{\partial C}{\partial m} \right) + q_s C_s \quad (2.62)$$

Si deseamos generalizar para las direcciones x,y,z, el cambio de ejes nos proporciona la ecuación general de flujo convectivo-dispersivo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\theta \cdot C)}{\partial t} = & \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta \cdot D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + \theta \cdot D_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} + \theta \cdot D_{xz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (q_x C) \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left(\theta \cdot D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} + \theta \cdot D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} + \theta \cdot D_{yz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial y} (q_y C) \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta \cdot D_{zx} \frac{\partial C}{\partial x} + \theta \cdot D_{zy} \frac{\partial C}{\partial y} + \theta \cdot D_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} (q_z C) + q_s C_s \end{aligned} \quad (2.63)$$

Donde q_x , q_y , q_z son los componentes de la velocidad de Darcy y q_s la tasa volumétrica de flujo de fuentes o sumideros por unidad de volumen de acuífero.

Expresada en forma más sintética mediante el operador nabla:

$$\frac{\partial(\theta \cdot C)}{\partial t} = \nabla \cdot (\theta \cdot \mathbf{D} \cdot \nabla C) - \nabla \cdot (\mathbf{q} \cdot C) + q_s C_s \quad (2.64)$$

O, mediante el uso de subíndices, en un sistema de referencia cartesiano ortonormal queda como:

$$\frac{\partial(\theta \cdot C)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta \cdot D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i C) + q_s C_s \quad (2.65)$$

Donde cada una de las componentes D_{ij} del tensor de dispersión, \mathbf{D} , han quedado definidas en las ecuaciones (3.50) a (3.55)

2.5 *Dispersión macroscópica*

La dispersión, tal como la hemos definido, es consecuencia de desviaciones de la dirección y velocidad real de las partículas de flujo y soluto frente a los valores promedio definido por la ecuación general de flujo. Las causas descritas para esas desviaciones son la tortuosidad de las diferentes trayectorias o diferencias de velocidad a nivel microscópico. Estos factores, estudiados en laboratorio, tienen unos resultados que varían en el rango de 0,01 – 1 cm, aproximadamente. Sin embargo, en experimentos realizados en campo, estas dispersividades alcanzan órdenes de magnitudes cuatro o cinco veces superiores. Esta diferencia es debido a que en situaciones reales, la dispersión está causada no por heterogeneidades microscópicas, sino por heterogeneidades en la conductividad hidráulica a nivel macroscópico.

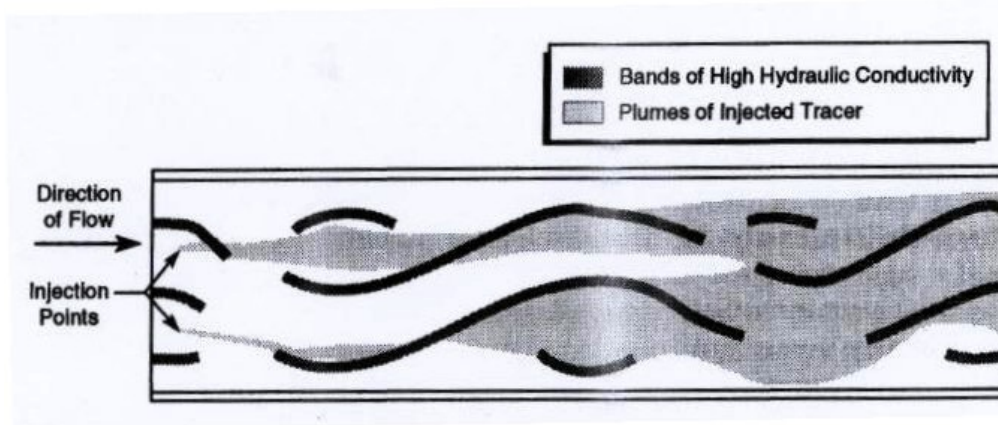


Figura 2.13 - Efecto de las heterogeneidades sobre la dispersión (de Skibitze y Robinson, 1963)

Al modelar el transporte en un acuífero real (generalmente en modelos de diferencias finitas o de elementos finitos), se utiliza un campo de velocidades perteneciente a la solución de una ecuación analítica. La velocidad de flujo, por tanto, se toma como constante en cada uno de los elementos de la malla, o se calcula mediante interpolación entre los valores de los nodos vecinos. Esto hace que las velocidades sean, si no constantes, al menos una función con variaciones suaves entre los diferentes elementos.

Por supuesto, cada uno de los elementos discretizados de la malla en la realidad dista mucho de poder considerarse una unidad homogénea, puesto que contiene heterogeneidades a muy diferentes escalas. Y las partículas de fluido que entran en el elemento por puntos diferentes experimentan velocidades y trayectorias muy distintas, aunque la velocidad y dirección promedio sea la misma que la del modelo. Dependiendo de la distribución espacial de las heterogeneidades macroscópicas, el flujo puede concentrarse a través de trayectorias de alta conductividad y divergir a lo largo de

trayectorias de baja conductividad. Si estas heterogeneidades no quedan representadas a escala del modelo, sus efectos sobre el flujo y transporte quedan ignorados.

En todo caso, conforme más fielmente estén representadas estas heterogeneidades, mayor importancia tendrá el término convectivo y menor será el término dispersivo. Sin embargo, existe un límite práctico (técnico o económico) para la representación de estas heterogeneidades a partir del cual los efectos de aquellas cuya escala sea inferior, quedan ignorados. Además, existen procesos con influencia en el campo de velocidades más allá de las propiedades intrínsecas del acuífero, cuyas heterogeneidades no siempre están bien representadas (recarga por precipitación, evapotranspiración, etc.).

En general lo que se hace es calibrar las dispersividades para conseguir el mejor ajuste entre las concentraciones observadas y calculadas. Sin embargo, esto supone que todo el efecto de las heterogeneidades macroscópicas no tenidas en cuenta recaiga sobre un valor de dispersividad creciente. La consecuencia es que el valor de la dispersividad a nivel macroscópico sea creciente conforme aumenta la distancia recorrida. La dispersividad es un parámetro que depende de la escala, lo que dificulta enormemente la modelación del transporte de masa.

Todas estas causas hacen que las estimaciones de valores de la dispersividad utilizadas u obtenidas en modelos de campo sean varios órdenes de magnitud superiores a las obtenidas en laboratorio.

2.6 Aproximaciones alternativas al proceso de flujo y transporte

Tradicionalmente se ha utilizado una ecuación determinística como es la ecuación de convección-dispersión (ADE) para describir el transporte de trazadores conservativos, en la que el término debido a la dispersión se ha supuesto basado en una ley de tipo Fickiano (Bear, 1972). Por ello se denominan de “transporte no fickiano” aquellos casos en que el transporte de un trazador conservativo no queda descrito adecuadamente por esta ecuación. Este transporte no fickiano se manifiesta tanto en la forma de las curvas de llegada del trazador a un punto (muy distinta a la forma gaussiana predicha por la ADE) como en el incremento de los parámetros de dispersividad conforme aumenta la distancia recorrida por el penacho. Este comportamiento se conoce como “transporte anómalo” (Metzler, R.; Klafter, J.; 2000). En los puntos siguientes se intentará hacer un repaso de las principales teorías que intentan modelar este transporte no fickiano en medios porosos heterogéneos.

2.6.1 Comportamiento no fickiano

Durante finales de los años 70, se observó en varios estudios (Lallemand-Barres y Peaudecerf, 1978; Anderson, 1979, Pickens y Grisak, 1981) que los valores de dispersividad obtenidos en los ensayos en campo y en laboratorio estaban relacionados con la escala a que se había llevado a cabo ese ensayo. Esta desviación se ha achacado tradicionalmente a la alta heterogeneidad del medio poroso, desconocida y por tanto no modelada. Esta causa parece estar detrás de las desviaciones que muestran los resultados obtenidos en campo con los resultados predichos por la ecuación fickiana de convección-dispersión

Las características de este medio poroso han sido tradicionalmente tratadas como determinísticas. Esto supone que todos los parámetros introducidos en la ADE están definidos en un volumen representativo elemental (REV) en el que los valores de los parámetros son contantes (Bear, 1972). Sin embargo, en lo que respecta a medios heterogéneos, es habitual considerar volúmenes más pequeños (descritos aquí como ω) en los que las características del medio varían de una manera tan rápida que se justifica el tratarlas como funciones aleatorias asociadas al volumen centrado en el punto x (Neuman y col., 2003 y 2005). Si se tiene esto en cuenta, la ecuación de convección-dispersión se transforma en estocástica.

La forma más común de resolver una ADE estocástica es el método Monte Carlo. Este método consiste en generar un gran número de realizaciones aleatorias del campo de velocidades subyacente y resolver la ADE para cada uno de éstos. Posteriormente, se resume el conjunto de resultados en estadísticos tales como

histogramas de frecuencia y momentos como medias, varianza y autocovarianza. Conforme aumenta el número de realizaciones generadas, los estadísticos del conjunto de resultados tienden a converger a unos valores finales. Se ha demostrado tanto teóricamente como en la práctica, que aunque el resultado en cada realización esté basado en la ADE, los estadísticos del conjunto son generalmente no fickianos (Dagan, 1984; Neuman y Zhang, 1990).

En un campo de velocidades estacionario, el transporte no fickiano se manifiesta como un incremento sostenido del valor de las dispersividades longitudinal y transversal conforme aumenta la distancia recorrida por el penacho (o, de manera equivalente, el tiempo) antes de alcanzar un valor asintótico. El estudio de Peaudecerf y Sauty (1978) proporcionan la primera evidencia documental de que las dispersividades en campo pueden incrementarse en varios órdenes de magnitud durante la evolución del penacho. Lo mismo ocurre en experimentos realizados en la base aérea de Borden, Ontario, en que en un experimento de trazadores realizado en un acuífero de características conocidas exhaustivamente, la dispersividad creció hasta cuatro órdenes de magnitud en un espacio de 600 días sin que mostrase alcanzar un valor asintótico (Sudicky y Cherry, 1983). Pero mientras la dispersividad longitudinal (paralela a la dirección de flujo) tiende a un valor asintótico “fickiano”, las dispersividades transversales primero alcanzan un pico y después decrecen a un valor inferior.

Este comportamiento se explica mediante el hecho de que, mientras un penacho evoluciona, encuentra en su camino un mayor número de heterogeneidades a escalas cada vez mayores. En un medio estadísticamente homogéneo, se llega a alcanzar un valor asintótico debido al valor limitado de estas heterogeneidades. Además, cuando uno enfrenta el valor de las dispersividades aparentes determinadas tanto en laboratorio como en campo para una serie de materiales porosos, se observa que estos valores crecen más rápido que si lo hiciesen de manera lineal. Esta dependencia de la dispersividad con la escala, de exponente superior a 1, implica que el medio poroso es la realización conjunta de varios campos de log-conductividad de escalas diferentes ordenados de manera jerárquica, que actúan de manera conjunta como un fractal aleatorio (Neuman, 1990).

A pesar de ello, el transporte no fickiano en medios porosos homogéneos se modela recurriendo al comportamiento no local a través de ecuaciones diferenciales o a veces en ecuaciones en derivadas fraccionarias. El flujo subterráneo y el transporte de solutos tienen lugar en medios con distintas escalas de heterogeneidad, pero sin embargo no es posible observar o describir estas heterogeneidades con el nivel de detalle o la precisión que serían necesarias para que la ADE nos proporcionase resultados ajustados. Por ello, surgen conceptualizaciones y modelos alternativos que buscan representar de manera adecuada la dependencia de la dispersividad con la escala y, de ese modo, modelar de una forma más ajustada el comportamiento del transporte.

Los modelos alternativos se basan en el concepto de “flujo másico no local”. Este concepto asume que el flujo másico en un volumen representativo centrado en un punto \mathbf{x} y un instante t determinados depende no sólo del valor de los parámetros en ese punto e instante en que se calcula, sino de la historia pasada de flujos y gradientes por los que ha pasado el penacho a lo largo de su evolución desde su inicio. Incluso, en ocasiones, de los flujos y gradientes futuros. Bajo este concepto, el flujo másico dispersivo se puede expresar como una integral de convolución extendida a todo el dominio estudiado y la historia pasada:

$$\mathbf{J}_d(\mathbf{x}, t) = - \int_0^t \int_{R^3} \phi \mathbf{M}(\mathbf{s}, \tau; \mathbf{x}) \cdot \nabla C(\mathbf{x} - \mathbf{s}, t - \tau) d\mathbf{s} d\tau \quad (2.66)$$

En la que $\mathbf{M}(\mathbf{s}, \tau; \mathbf{x})$ es la función de memoria que depende del espacio y el tiempo, siendo \mathbf{x} el centroide del volumen de referencia, \mathbf{s} la distancia entre el centroide y el punto del recorrido del penacho considerado, t el instante para el que se calcula el flujo dispersivo y τ la distancia temporal el instante considerado y el actual. Esta función de memoria puede verse como una función que establece una proporción inversa de la importancia de los gradientes de concentración con la distancia, tanto espacial como temporal. El flujo dispersivo, por tanto, depende de los gradientes de concentración existentes en el dominio espacio-temporal y, por ello, tiene una componente no local. En general, la función M es específica para cada bloque centrado en \mathbf{x} y depende no sólo de la heterogeneidad del medio, sino también del tamaño de la discretización y del tamaño del penacho.

Generalizando para la Ecuación de Convección-Dispersión fickiana, la ecuación no-local quedaría como:

Teniendo en cuenta que para penachos desarrollados, en los que se pueda considerar que ϕ , los gradientes de concentración de dentro de la integral se pueden considerar constantes, por lo que se pueden extraer de la integral. Y, por tanto, el coeficiente de dispersión de la ADE no local, sería:

Este coeficiente recoge la contribución de la dispersión fickiana local como de la no local, por lo que a menudo se separan ambas componentes según:

Siendo

En el que el subíndice m se refiere a la función de memoria de la componente macrodispersiva. El primer término se refiere a la contribución local (asumida como fickiana) a la componente dispersiva, mientras que el segundo término se refiere a la contribución adicional a la dispersión debida a la heterogeneidad existente en el volumen centrado en el punto \mathbf{x} .

Para un dominio infinito, con un penacho totalmente desarrollado y flujo estacionario, esta función de memoria podría expresarse como:

$$\phi M_m^{\square}(\mathbf{s}, t) = G_0(\mathbf{s}, t) C_{qq}(\mathbf{s})$$

En la que $G_0(\mathbf{s}, t)$ es la solución con forma gaussiana de la ecuación de convección-dispersión y C_{qq} la función de covarianza del campo de velocidades.

Los modelos numéricos comerciales de flujo y transporte basados en la ecuación de convección-dispersión a menudo deben sobreestimar los valores de los coeficientes de dispersividad de los elementos a fin de tener en cuenta el efecto de las heterogeneidades no modeladas, aunque esto sea una forma de enmascarar la homogeneización del medio. Las condiciones generales de flujo y transporte raramente se pueden considerar fickianas, de forma que los modelos numéricos basados en la ecuación de convección-dispersión tienden a subestimar las colas de las curvas de llegada incluso para dominios con heterogeneidades moderadas y campos de transmisividad aleatoria multigaussiana (Fernández-García et al., 2007)

En los siguientes puntos se ofrece un resumen de varias aproximaciones alternativas que intentan modelar de forma más realista el proceso de transporte en medios heterogéneos, así como las diferentes expresiones que adoptan esta función de memoria en cada una de ellas. También se explican sus puntos en común y diferencias, así como una valoración de sus ventajas como herramientas de predicción.

2.6.2 ADE estocástica

Este enfoque se basa en asumir que existe una escala ω centrada en \mathbf{x} , más pequeña que aquella definida por el volumen representativo elemental (REV), en la que sí que se da un comportamiento fickiano que puede ser descrito de forma precisa por la ADE (Morales-Casique y Neuman, 2006). El valor de \mathbf{D}_d es, por tanto, constante y determinado en esa escala. La velocidad convectiva \mathbf{v} se modela como un campo aleatorio no estacionario variable en el espacio y el tiempo según:

$$\nabla \mathbf{v} = f(\mathbf{x}, t) \quad (2.67)$$

donde $f(\mathbf{x}, t)$ es una función aleatoria que representa una fuente/sumidero de flujo a escala ω .

Si asumimos la presencia de estas fuentes/sumideros aleatorios, la concentración de un soluto no reactivo en un dominio Ω rodeado por un contorno Γ queda definido por la ecuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla(\mathbf{v} \cdot C) + \nabla \cdot (D_d \nabla C) + f, \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.68)$$

Sujeta a las siguientes condiciones iniciales y de contorno:

$$\begin{aligned} C(\mathbf{x}, 0) &= C_0(\mathbf{x}) & \mathbf{x} \in \Omega \\ C(\mathbf{x}, t) &= C_D(\mathbf{x}, t) & \mathbf{x} \in \Gamma_1 \\ -\mathbf{D}_d \nabla C(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) &= W(\mathbf{x}, t) & \mathbf{x} \in \Gamma_2 \\ [\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot C(\mathbf{x}, t) - \mathbf{D}_d \nabla C(\mathbf{x}, t)] \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) &= P(\mathbf{x}, t) & \mathbf{x} \in \Gamma_3 \end{aligned} \quad (2.69)$$

Donde C_D es una concentración aleatoria establecida en el segmento Γ_1 , W es un flujo dispersivo normal al segmento Γ_2 y P un flujo convectivo-dispersivo aleatorio definido como normal al segmento Γ_3 . El vector \mathbf{n} es el vector normal a cualquier segmento perteneciente a $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3$. Todos estos valores quedan definidos a escala ω . Por simplicidad, se asume que la función $f(\mathbf{x}, t)$, así como C_D , W y P son independientes del campo de velocidades \mathbf{v} .

Las funciones aleatorias de punto se representan como:

$$a(\mathbf{x}, t) = \langle a(\mathbf{x}, t) \rangle_C + a'(\mathbf{x}, t) \quad (2.70)$$

Donde $\langle a(\mathbf{x}, t) \rangle_C$ representa el valor esperado en el punto \mathbf{x} e instante t , y $a'(\mathbf{x}, t)$ representa una fluctuación aleatoria de media cero alrededor del valor esperado. Esto se puede conceptualizar como la suma de una estimación determinista más una fluctuación que representa el error de una predicción, ambas definidas a escala ω . En condiciones ideales el valor de $a'(\mathbf{x}, t)$ es cero y el valor de la predicción $\langle a(\mathbf{x}, t) \rangle_C$ se iguala al valor real $a(\mathbf{x}, t)$. Aplicando este concepto a todas las funciones que aparecen en (2.69) y tomando una media conjunta:

$$\frac{\partial \langle C \rangle_C}{\partial t} = -\nabla \cdot (\langle \mathbf{v} \rangle_C \cdot \langle C \rangle_C) + \nabla \cdot (\mathbf{D}_d \nabla \langle C \rangle_C + \mathbf{Q}_C) + \langle f \rangle \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.71)$$

Donde $\mathbf{Q}_C(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{v}'(\mathbf{x}, t) \cdot C'(\mathbf{x}, t) \rangle_C$ es el flujo dispersivo condicional. De forma similar se obtienen las expresiones para las condiciones de contorno:

$$\begin{aligned} \langle C(\mathbf{x}, 0) \rangle_C &= \langle C_0(\mathbf{x}) \rangle & \mathbf{x} \in \Omega \\ \langle C(\mathbf{x}, 0) \rangle_C &= \langle C_D(\mathbf{x}, t) \rangle & \mathbf{x} \in \Gamma_1 \\ -\mathbf{D}_d \nabla \langle C(\mathbf{x}, t) \rangle_C \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) &= \langle W(\mathbf{x}, t) \rangle & \mathbf{x} \in \Gamma_2 \\ \left[\langle \mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \rangle_C \langle C(\mathbf{x}, t) \rangle_C - \mathbf{D}_d \nabla \langle C(\mathbf{x}, t) \rangle_C + \mathbf{Q}_C(\mathbf{x}, t) \right] \cdot \mathbf{n}(\mathbf{x}) &= \langle P(\mathbf{x}, t) \rangle & \mathbf{x} \in \Gamma_3 \end{aligned} \quad (2.72)$$

El flujo dispersivo Q_C viene dado por la expresión implícita:

$$\begin{aligned} Q_C(\mathbf{x}, t) &= \int_0^t \int_{\Omega} \alpha_C(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) \nabla_y \cdot \mathbf{Q}_C(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) \cdot d\mathbf{s} d\tau \\ &\quad - \int_0^t \int_{\Omega} \beta_C(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) \nabla_y \cdot \langle C(\mathbf{s}, \tau) \rangle_C \cdot d\mathbf{s} d\tau \\ &\quad - \int_0^t \int_{\Omega} \gamma_C(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) \cdot \langle C(\mathbf{s}, \tau) \rangle_C \cdot d\mathbf{s} d\tau \\ &\quad - \int_0^t \int_{\Gamma_3} \alpha_C(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) \mathbf{Q}_C^T(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) \cdot \mathbf{n}(\mathbf{s}) \cdot d\mathbf{s} d\tau \\ &\quad + \int_0^t \int_{\Gamma_3} \beta_C(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) \cdot \langle C(\mathbf{s}, \tau) \rangle_C \cdot \mathbf{n}(\mathbf{s}) \cdot d\mathbf{s} d\tau \end{aligned} \quad (2.73)$$

Donde:

$$\begin{aligned} \alpha_C(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) &= \langle G(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) \cdot \mathbf{v}'(\mathbf{x}, t) \rangle_C \\ \beta_C(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) &= \langle G(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) \cdot \mathbf{v}'(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{v}'^T(\mathbf{s}, \tau) \rangle_C \\ \gamma_C(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) &= \langle G(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau) \cdot \mathbf{v}'(\mathbf{x}, t) \cdot f'(\mathbf{s}, \tau) \rangle_C \end{aligned}$$

Esta función aleatoria de Green, $G(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau)$, satisface la ecuación estocástica de convección-dispersión sujeta un cero inicial y unas condiciones de contorno dadas (Morales-Casique y Neuman, 2006).

Para poder reducir este sistema acoplado a una única ecuación de transporte, hay que imponer una serie de restricciones físicas. Si el campo de velocidades \mathbf{v} es estacionario, los momentos de la función de Green dependen sólo de los incrementos en el espacio y el tiempo (Dentz y Tartakovsky, 2008). Es decir, de $\langle G(\mathbf{x} - \mathbf{s}, t - \tau) \rangle$.

Igualmente, las integrales que contienen $\alpha_C(\mathbf{x}, t; \mathbf{s}, \tau)$ son de un orden inferior y pueden despreciarse en (2.73). Del mismo modo, para que el campo de velocidades sea estacionario, el dominio debe ser infinito, por lo que $\Omega = \Omega_\infty$ y así las integrales

definidas para Ω también desaparecen de (2.73). Finalmente, como $f(\mathbf{x}, t)$ es lineal respecto a la velocidad, β_C y γ_C dependen sólo de los incrementos en el espacio y el tiempo. Aplicando todas estas restricciones, la ecuación estocástica del transporte queda como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} = & \nabla \cdot \left[-\langle \mathbf{v} \rangle \langle C \rangle + \int_0^t \int_{\Omega_s} \gamma(\mathbf{x} - \mathbf{s}, t - \tau) \langle C(\mathbf{s}, \tau) \rangle d\mathbf{s} d\tau + \mathbf{D}_d \nabla \langle C \rangle \right] \\ & + \left[\int_0^t \int_{\Omega_s} \beta(\mathbf{x} - \mathbf{s}, t - \tau) \cdot \nabla_y \langle C(\mathbf{s}, \tau) \rangle d\mathbf{s} d\tau \right] + \langle f \rangle \end{aligned} \quad (2.74)$$

La función de memoria utilizada en este caso depende de las funciones-núcleo utilizadas en la modelación estocástica, y tiene la expresión:

$$M(\mathbf{s}, \tau; \mathbf{x}) = \int_0^t \int_{\Omega_s} \gamma(\mathbf{x} - \mathbf{s}, t - \tau) \langle C(\mathbf{s}, \tau) \rangle + \beta(\mathbf{x} - \mathbf{s}, t - \tau) \nabla_s \langle C(\mathbf{s}, \tau) \rangle d\mathbf{s} d\tau \quad (2.75)$$

2.6.3 Modelo de Transferencia Multitasa (Multi-rate Transfer Model o MRTM)

Se trata de una ecuación utilizada para modelar el transporte de solutos a escalas mayores que la distancia de correlación. En realidad se trata de una ecuación ADE clásica a la que se añade un término adicional fuente/sumidero que simula el intercambio de solutos entre las zonas de alta y baja conductividad existentes en el interior del elemento discretizado. En otras palabras, el elemento se descompone en varias zonas: una de alta conductividad en la que se dan los procesos típicos de convección, dispersión y difusión, y otras donde la conductividad es sensiblemente más baja, en la que el transporte del soluto se da únicamente por dispersión y difusión. Entre las zonas de alta y baja conductividad existe un intercambio de masa controlada por un coeficiente de transferencia α_i . Se pueden definir C_m y C_{im} como las concentraciones en la zona móvil y zona inmóvil respectivamente. La ecuación que rige el modelo MRMT se define como:

$$\begin{aligned} \theta_m \frac{\partial C_m(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \theta_{im} \int_0^\infty f(\alpha) \frac{\partial C_m(\mathbf{x}, t; \alpha)}{\partial t} d\alpha \\ = -\nabla(\mathbf{q}(\mathbf{x}, t) \cdot C_m(\mathbf{x}, t)) + \nabla(\theta_m \mathbf{D}(\mathbf{x}) \nabla C_m(\mathbf{x}, t)) + r^v(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (2.76)$$

El flujo másico entre la zona móvil y la zona inmóvil depende de la diferencia de concentración entre ambas, tal como:

$$\theta_{im} \frac{\partial C_{im}(\mathbf{x}, t; \alpha)}{\partial t} = \alpha (C_m(\mathbf{x}, t) - C_{im}(\mathbf{x}, t; \alpha)) \quad \forall \alpha \quad (2.77)$$

Donde α es un coeficiente de transporte de masa. El término $f(\alpha)$ es la función de densidad de las transferencias de masa, mientras que θ_m y θ_{im} son la fracción volumétrica que ocupan la zona móvil e inmóvil respectivamente. Integrando la ecuación (2.77) y sustituyéndola en la ecuación (2.76), se obtiene la ecuación de transporte en función únicamente de la concentración en la zona móvil.

$$\theta_m \frac{\partial C_m(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \theta_m \cdot \beta_{tot} \int_0^t g(\tau) \cdot \frac{\partial C_m(\mathbf{x}, t - \tau)}{\partial t} d\tau = -\nabla(\mathbf{q}(\mathbf{x}, t) \cdot C_m(\mathbf{x}, t)) + \nabla(\theta_m \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla C_m(\mathbf{x}, t)) + r(\mathbf{x}, t) \quad (2.78)$$

Donde β_{tot} es la capacidad total de retención de la zona inmóvil y $g(\tau)$ es la función de memoria temporal que representa la función de distribución del tiempo total que pasa una partícula retenida en la zona inmóvil. La formulación de $g(\tau)$ depende de la geometría de las zonas inmóviles y de la variabilidad de las transferencias de masa. Teóricamente, este término de transferencia de masa no representa ninguna reacción química, sino el simple movimiento de soluto entre zonas de alta y baja velocidad de flujo que existen en el seno de cada elemento discretizado. Esta función de memoria temporal tiene la expresión:

Donde $f(\alpha)$ es la función de densidad de transferencias de masa.

A pesar de que no se han obtenido por el momento expresiones matemáticas que relacionen las propiedades físicas del acuífero y las funciones de memoria, se observa que ésta depende en gran medida de la heterogeneidad. La formulación de la función de memoria depende de la geometría de las zonas de baja permeabilidad y la variabilidad de las tasas de transferencia de masa. (Haggerty et al., 2000)

Modelo	$f(\alpha)$	$g(t)$
De primer orden	$\beta_{tot} \cdot \delta(\alpha - \alpha_f)$	$\alpha_f \cdot \beta_{tot} \cdot \exp(-\alpha_f \cdot t)$
Serie de multitransferencia	$f(\alpha)$	$\int_0^\infty \alpha \cdot f(\alpha) \cdot \exp(-\alpha t) \cdot d\alpha$
Distribución exponencial ¹	$\frac{\beta_{tot}(k-2)}{\alpha_{max}^{k-2} - \alpha_{min}^{k-2}} \cdot \alpha^{k-3}$	$\int_{\alpha_{min}}^{\alpha_{max}} \alpha \cdot f(\alpha) \cdot \exp(-\alpha t) \cdot d\alpha$

¹ En la que $k > 0$, $k \neq 2$ y $\alpha_{min} \leq \alpha \leq \alpha_{max}$, siendo α_{min} el mínimo coeficiente, α_{max} el máximo y k el exponente

2.6.4 Modelo lagrangiano de transporte no fickiano

Puede deducirse una ecuación similar a (2.75) en la que los términos de dispersión local y de fuente/sumidero de soluto se deducen a partir del enfoque lagrangiano del movimiento de “partículas” de soluto (Cushman y Ginn, 1993). El análisis lagrangiano parte de considerar una concentración como un conjunto de partículas (cada una de ellas con una masa asociada) que se encuentran en un volumen determinado. Estas partículas se consideran entidades indivisibles, cada una de las cuales se mueve independientemente de las demás. Si $\mathbf{X}(t)$ determina la coordenada de una partícula con origen $\mathbf{X}(0)$ a $t = 0$, y suponemos que esta partícula se mueve con una velocidad y aceleración aleatorias:

$$\mathbf{v}(t) = \frac{d\mathbf{X}}{dt} \quad (2.79)$$

$$\mathbf{a}(t) = \frac{d^2\mathbf{X}}{dt^2} \quad (2.80)$$

En ese caso, la probabilidad $p(\mathbf{x},t)$ de encontrar una partícula de soluto en la coordenada \mathbf{x} en el instante t , si ésta tiene su origen en $\mathbf{X}(0) = \mathbf{0}$, es:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot \left[-\langle \mathbf{v} \rangle p + \int_0^t \int_{\Omega_x} \mathbf{D}_1(\mathbf{y}, t, \tau) \cdot p(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau) d\mathbf{y} d\tau \right. \\ \left. + \int_0^t \int_{\Omega_x} \mathbf{D}_2(\mathbf{y}, t, \tau) \cdot \nabla_{\mathbf{x}-\mathbf{y}} p(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau) d\mathbf{y} d\tau \right] \end{aligned} \quad (2.81)$$

Las funciones \mathbf{D}_1 y \mathbf{D}_2 son la inversa de las transformadas de Laplace-Fourier de las funciones $\mathbf{d}_1(\mathbf{k}, \lambda)\Delta(\mathbf{k}, t, \tau)$ y $\mathbf{d}_2(\mathbf{k}, \lambda)\Delta(\mathbf{k}, t, \tau)$, respectivamente. El término λ es el parámetro de la transformada de Laplace, \mathbf{k} es el número de onda de la transformada de Fourier y

$$\Delta(k, t, \tau) = \exp\left(i \cdot \mathbf{k} [\langle \mathbf{X}(t) \rangle - \langle \mathbf{X}(t - \tau) \rangle]\right) \quad (2.82)$$

Que, para valores pequeños de τ , se simplifica a:

$$\Delta(k, t, \tau) = \exp(i \cdot \tau \cdot \mathbf{k} \cdot \langle \mathbf{v}(t) \rangle) \quad (2.83)$$

Y las funciones $\mathbf{d}_1(\mathbf{k}, \lambda)\Delta(\mathbf{k}, t, \tau)$ y $\mathbf{d}_2(\mathbf{k}, \lambda)\Delta(\mathbf{k}, t, \tau)$ vienen dadas por:

$$\hat{\mathbf{d}}_1(k, \lambda) = \hat{\mathbf{w}}_1(\mathbf{k}, \lambda) \left[1 - \lambda^{-1} \hat{\Phi}(\mathbf{k}, \lambda) \right] \quad (2.84)$$

$$\hat{\mathbf{d}}_2(k, \lambda) = \hat{\mathbf{w}}_2(\mathbf{k}, \lambda) \left[1 - \lambda^{-1} \hat{\Phi}(\mathbf{k}, \lambda) \right] \quad (2.85)$$

En las que:

$$\widehat{\Phi}(\mathbf{k}, \lambda) = i \cdot \mathbf{k}^T \widehat{\mathbf{w}}_1(\mathbf{k}, \lambda) - \mathbf{k}^T \widehat{\mathbf{w}}_2(\mathbf{k}, \lambda) \quad (2.86)$$

Siendo $\widehat{\mathbf{w}}_1(\mathbf{k}, \lambda)$ y $\widehat{\mathbf{w}}_2(\mathbf{k}, \lambda)$ las transformadas de Laplace de:

$$\widehat{\mathbf{w}}_1(\mathbf{k}, \lambda) = -\langle \mathbf{a}'(t) \cdot \exp(i \cdot \mathbf{k}[\mathbf{X}'(t) - \mathbf{X}'(0)]) \rangle \quad (2.87)$$

$$\widehat{\mathbf{w}}_2(\mathbf{k}, \lambda) = -\langle \mathbf{v}'(t) \cdot \exp(i \cdot \mathbf{k}[\mathbf{X}'(t) - \mathbf{X}'(0)]) \cdot \mathbf{v}'^T \rangle \quad (2.88)$$

Para un valor de $\langle \mathbf{v} \rangle$ constante, el valor de \mathbf{D}_1 desaparece para números de onda \mathbf{k} de segundo orden o superiores, y \mathbf{d}_2 puede expresarse en términos de estadísticos de la velocidad.

Si recordamos que la probabilidad p y la concentración $\langle C \rangle$ tienen en realidad el mismo significado físico, puede demostrarse que la ecuación (2.81) es idéntica a la ecuación ADE en su forma estocástica que hemos expuesto en el apartado 2.6.2, si suponemos que la dispersión local \mathbf{D}_d es cero y no existen términos de fuente sumidero.

2.6.5 Modelo de trayectorias aleatorias continuo en el tiempo (CTRW)

El concepto central de los modelos de trayectorias aleatorias, o también llamados “modelos random walk” consiste en interpretar que el transporte está formado por el movimiento de un número discreto de partículas de soluto hacia un número de puntos discretos en el espacio (Berkowitz y Cortis, 2003). En estos puntos se da un proceso instantáneo de mezcla que hace que una partícula que llega a un punto \mathbf{x} con una concentración dada, puede abandonar este punto \mathbf{x} llevando otra concentración menor debido a la mezcla que ha ocurrido. Si prescindimos de fuentes o sumideros de masa, la tasa concentración de soluto $C(\mathbf{x}, t)$ está gobernada por la ecuación de balance de masa (Oppenheim y Shuler, 1977, Shlesinger, 1996):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\sum_{\mathbf{y}} w(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \cdot C(\mathbf{x}, t) + \sum_{\mathbf{y}} w(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \cdot C(\mathbf{y}, t) \quad (2.89)$$

Donde $w(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ es la frecuencia (independiente del tiempo) con que una partícula se mueve desde el punto \mathbf{y} al punto \mathbf{x} . El segundo sumatorio representa la frecuencia normalizada de entrada de soluto desde todos los puntos \mathbf{y} al punto \mathbf{x} , mientras que el primer sumatorio representa la tasa de frecuencia de soluto desde el punto \mathbf{x} a cualquier

punto \mathbf{y} . Si estas frecuencias de salto forman un campo aleatorio estadísticamente no dependiente, la concentración promedio $\langle C(\mathbf{x}, t) \rangle$ se convierte en la llamada “ecuación generalizada del modelo de random walk continuo en el tiempo”:

$$\frac{\partial \langle C(\mathbf{x}, t) \rangle}{\partial t} = - \sum_{\mathbf{y}} \int_0^t \phi(\mathbf{y} - \mathbf{x}, t - \tau) \langle C(\mathbf{x}, \tau) \rangle d\tau + \sum_{\mathbf{y}} \phi(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau) \langle C(\mathbf{y}, \tau) \rangle d\tau \quad (2.90)$$

Donde la función $\phi(\mathbf{z}, s)$ queda definida a través de su transformada de Laplace:

$$\widehat{\phi}(\mathbf{z}, \lambda) = \frac{\lambda \cdot \psi(\mathbf{z}, \lambda)}{1 - \psi_s(\lambda)} \quad (2.91)$$

Donde

$$\psi_s = \sum_{\mathbf{z}} \psi(\mathbf{z}, \lambda) \quad (2.92)$$

Siendo $\psi(\mathbf{x}, s)$ la probabilidad de un salto de longitud \mathbf{z} en un intervalo de tiempo s y $\psi_s(s)$ la probabilidad de ese salto.

Si esta función $\phi(\mathbf{z}, s)$ está centrada alrededor de la media (a partir de cierto valor de \mathbf{z} la probabilidad se reduce a cero), puede centrarse el análisis a un espectro de pequeños desplazamientos. Esto permite reemplazar el número finito de puntos a un espectro continuo al expandir $\langle C(\mathbf{y}, \tau) \rangle$ alrededor de \mathbf{x} mediante una serie de Taylor.

$$\langle C(\mathbf{y}, t) \rangle = \langle C(\mathbf{x}, t) \rangle + (\mathbf{y} - \mathbf{x})^T \nabla_{\mathbf{x}} \langle C(\mathbf{x}, t) \rangle + \frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{x})^T \left[\nabla_{\mathbf{x}} \nabla_{\mathbf{x}}^T \langle C(\mathbf{x}, t) \rangle \right] (\mathbf{y} - \mathbf{x}) + \dots \quad (2.93)$$

Despreciando los términos de orden superior a 2 y sustituyendo en (2.93), reemplazando los sumatorios por integrales y asumiendo que se trata de un campo estadísticamente homogéneo, se obtiene la expresión del modelo de random walk continuo en el tiempo como una ecuación de transporte no local:

$$\frac{\partial \langle C(\mathbf{x}, t) \rangle}{\partial t} = - \nabla \int_0^t [\mathbf{V}_l(t - \tau) - \mathbf{D}_l(t - \tau)] \cdot \nabla \langle C(\mathbf{x}, \tau) \rangle d\tau \quad (2.94)$$

Donde el vector \mathbf{V}_l y el tensor \mathbf{D}_l son, respectivamente:

$$\mathbf{V}_l(t) = \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau) d\mathbf{y} \quad (2.95)$$

$$\mathbf{D}_l = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau) (\mathbf{x} - \mathbf{y})(\mathbf{x} - \mathbf{y})^T d\mathbf{y} \quad (2.96)$$

Existe una relación entre el modelo CTRW y la ADE estocástica basada en asumir un comportamiento convectivo-dispersivo a una escala ω que sea estadísticamente homogéneo (es decir, que las conclusiones obtenidas para una parte del proceso sean aplicables a otra), o bien a partir del enfoque lagrangiano basado en movimientos de partículas estadísticamente homogéneos. Se basa en reconocer que unas frecuencias de desplazamiento de partículas estadísticamente no coherentes implica que el campo de velocidades subyacente tampoco es coherente. En estocástica “coherente” hace referencia a la “fuerza” con que dos series de valores están asociados, aunque no se aprecie en los valores simultáneos, sino en relaciones más difusas. Lo que significa que $\langle v'_i(\mathbf{x})v'_j(\mathbf{y}) \rangle \propto \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ donde δ es una función delta de Dirac. De esa forma, las funciones-núcleo de la ADE estocástica pueden definirse como:

$$\gamma(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau) = [\langle \mathbf{v} \rangle \cdot \delta(t - \tau) + \mathbf{V}_l(t - \tau)] \cdot \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (2.97)$$

$$\beta(\mathbf{x} - \mathbf{y}, t - \tau) = [-\mathbf{D}_d \cdot \delta(t - \tau) + \mathbf{D}_l(t - \tau)] \cdot \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (2.98)$$

De forma que la ADE estocástica simplificada se reduce al modelo CTRW suponiendo que el término fuente/sumidero sea nulo.

Según Dentz y Berkowitz (2003), si se asume un salto finito característico, pero un tiempo de espera no definido, la ecuación de transporte puede definirse como:

$$\phi \frac{\partial C(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \left\{ \int_0^t M_x(t) \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}) \cdot C(\mathbf{x}, t) - M_t(\mathbf{x}) \mathbf{D}(\mathbf{x}) \cdot \nabla C(\mathbf{x}, t) dt \right\} + r(\mathbf{x})$$

En la que se consideran el tiempo de espera y la longitud de salto como mutuamente independientes, por lo que aparecen dos funciones de memoria diferentes, una dependiente del espacio M_x , y otra dependiente del tiempo M_t .

2.6.6 Modelos de convección-dispersión en derivadas fraccionales

Se han propuesto varias representaciones de la ecuación de convección-dispersión basadas en derivadas fraccionarias (“fractional advection-dispersion equation” o fADE). La más habitual es una ecuación unidimensional con derivadas fraccionarias en el tiempo y coeficientes constantes (Zhang; Benson y Meerschaert, 2007):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -V \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} \quad (2.99)$$

En la que V es una velocidad constante, D un coeficiente de dispersión constante y α el orden de la derivada fraccionaria ($1 < \alpha \leq 2$). En el caso en que $\alpha = 2$, la ecuación (2.99) se convierte en la ADE estándar de segundo orden. Puesto que esta ecuación es determinística y análoga a (2.99), el término C representa $\langle C(x,t) \rangle$ o la probabilidad de encontrar una partícula de soluto en determinado punto en determinado instante (Meerschaert y Benson, 2001).

Entre las diferentes generalizaciones y simplificaciones de la ecuación (2.99), pueden encontrarse tres formulaciones alternativas que consideran campos $V(x)$ y $D(x)$ variables en el espacio, o “de flujo fraccionario”:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[VC - D \frac{\partial^{\alpha-1} C}{\partial x^{\alpha-1}} \right] \quad (2.100)$$

Otra formulación es la de “divergencia fraccionaria”

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial VC}{\partial x} + \frac{\partial^{\alpha-1}}{\partial x^{\alpha-1}} \left[D \frac{\partial C}{\partial x} \right] \quad (2.101)$$

Y una última llamada de “divergencia completamente fraccionaria”

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial^{\alpha-1} VC}{\partial x^{\alpha-1}} + \frac{\partial^{\alpha-1}}{\partial x^{\alpha-1}} \left[D \frac{\partial C}{\partial x} \right] \quad (2.102)$$

Todas son equivalentes a una ADE standard cuando $\alpha = 2$. Todas estas formulaciones alternativas son equivalentes a la ecuación integro-diferencial (Zhang, Benson y Meerschaert, 2007):

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} = & -\frac{\partial VC}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} \beta(x,t; y, \tau) \frac{\partial C(x-y, t-\tau)}{\partial(x-y)} dy d\tau \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} \gamma(x,t; y, \tau) \cdot C(x-y, t-\tau) dy d\tau \end{aligned} \quad (2.103)$$

Con las siguientes funciones-núcleo:

- Para la formulación de “flujo fraccionario”:

$$\beta = \frac{D(x) \cdot \delta(\tau) \cdot H(y)}{\Gamma(2-\alpha) \cdot y^{\alpha-1}}, \quad \gamma = 0 \quad (2.104)$$

- Para la formulación de “divergencia fraccionaria”:

$$\beta = \frac{D(x-y) \cdot \delta(\tau) \cdot H(y)}{\Gamma(2-\alpha) \cdot y^{\alpha-1}}, \quad \gamma = 0 \quad (2.105)$$

- Para la formulación de “divergencia completamente fraccionaria”:

$$\beta = \frac{D(x-y) \cdot \delta(\tau) \cdot H(y)}{\Gamma(2-\alpha) \cdot y^{\alpha-1}}, \quad \gamma = \frac{V(x-y) \cdot \delta(\tau) \cdot H(y)}{\Gamma(2-\alpha) \cdot y^{\alpha-1}} \quad (2.106)$$

Donde $H(y)$ es la función de Heaviside, que es igual a 0 para valores negativos de y , e igual a 1 para valores positivos de y .

La función de memoria será, evidentemente, las funciones-núcleo β y γ del modelo utilizado. Cushman y Ginn (2000) demuestran que los modelos en derivadas fraccionales se relacionan con los modelos de trayectorias aleatorias continuos en el tiempo, cuando la función-núcleo adopta la forma específica:

$$M(s, \tau) = \frac{D_{\alpha-1}^v \cdot \delta(\tau) H(s)}{\Gamma(2-\alpha) \cdot s^{\alpha-1}}$$

Donde $D_{\alpha-1}^v$ es una constante, $\delta(\tau)$ la función delta de Dirac y $H(s)$ la función de salto Heaviside definida en $(0, \infty)$. Es de destacar que la función delta de Dirac sirve para localizar el flujo en el tiempo, de manera que la ecuación de convección-dispersión es no local en el espacio, pero no en el tiempo. Del mismo modo, la función de salto Heaviside restringe la no localidad a valores de s positivos, por lo que $M(s, \tau)$ es una función de memoria aguas arriba de x .

2.7 Conclusiones

Puesto que el flujo y transporte tienen lugar en medios en los que existen heterogeneidades a distintas escalas, ni el flujo y transporte ni los propios medios pueden ser observados o descritos con exactitud en todos los puntos o instantes relevantes. Esta incertidumbre es un factor determinante que hace necesario utilizar diferentes formulaciones más allá de la clásica ADE.

Hemos expuesto y comparado cuatro conceptualizaciones y representaciones alternativas del transporte convectivo-dispersivo no fickiano de trazadores conservativos a través de medios porosos heterogéneos:

- Una representación no local en el espacio y el tiempo basada en suponer que el transporte es fickiano a una escala ω inferior a la de discretización (ADE en su forma estocástica)
- Una representación no local en el espacio y el tiempo basada en una representación lagrangiana del movimiento de partículas de soluto en el seno de un campo aleatorio de velocidades que es estacionario (modelo lagrangiano de transporte no fickiano)
- Una representación no local en el tiempo de los desplazamientos medios de partículas en un conjunto discreto de puntos con tamaños de celda arbitrariamente pequeños y basada en un modelo de Random-Walk continuo en el tiempo (CTRW)
- Una representación fraccional en el espacio de la convección y dispersión de manera no local en el espacio pero local en el tiempo (modelos de convección-dispersión en derivadas fraccionarias)

Una vez definidas matemáticamente las diferentes aproximaciones alternativas del fenómeno de transporte centradas en la descripción del transporte no-fickiano, estamos ya en situación de repasar de manera no exhaustiva sus principales ventajas e inconvenientes, en base a las simplificaciones que es necesario adoptar para utilizar el modelo y su aplicabilidad en campo.

De las cuatro aproximaciones alternativas reseñadas, la ADE estocástica asume que el transporte a una escala ω inferior a la escala de trabajo responde a una ADE estándar de segundo orden. Sin embargo, varios estudios tanto numéricos como de laboratorio, afirman que no importa lo pequeña que resulte la escala ω respecto a la escala de trabajo, puesto que aún a esa escala, el transporte sigue siendo no-fickiano. Esto implica que el transporte no-fickiano ocurre igualmente en medios homogéneos, lo que puede ser explicado debido a la presencia de poros sin salida o zonas de recirculación que llevan a la llamada “dispersión diferida”. Otros estudios apuntan a la

longitud de la columna como fuente de error en la determinación de la componente dispersiva (Maiera y Kroll, 2000; Koch y Brady, 1988)

En ausencia de poros sin salida, la dispersión a escala de poro tiende a ser fickiana (Koch y Brady, 1985). Esto se debe a que se asume que la Ley de Fick es válida en el interior de los poros y la analogía de Taylor-Aris se conserva si consideramos un conjunto de poros interconectados (Aris, 1956). Por ello es de esperar que la ADE sea válida en escalas ω pequeñas aunque no se conserve a las escalas de trabajo necesarias en los análisis determinísticos.

La ADE estocástica asume que la ley de Fick se conserva a una escala pequeña ω y trata la velocidad convectiva como una variable aleatoria definida en un continuo del espacio y el tiempo. El campo de velocidades se suele considerar no estacionario y estadísticamente interdependiente en el tiempo y el espacio con un número arbitrario de escalas. La ADE estocástica por sí misma no define el tamaño de ω o de los procesos físicos, químicos o biológicos que dan lugar al campo de velocidades aleatorio o el proceso dispersivo. En ese aspecto, la ADE estocástica es tan válida científicamente como otras aproximaciones basadas en el movimiento de partículas como el CTRW.

Los modelos basados en la ADE estocástica han considerado, hasta la fecha, que la velocidad convectiva obedece la Ley de Darcy en la escala ω . Para condicionar la ADE estocástica a las observaciones reales, se busca una escala ω capaz de proporcionar valores de parámetros o variables del correspondiente campo de velocidades a partir de observaciones o estimaciones procedentes de la realidad sin que por ello deba asumirse que la escala ω sea una especie de REV de menor tamaño. Esto no es una condición indispensable en la ADE estocástica, sino una opción habitual que sacrifica algo de generalidad para ganar en aplicabilidad.

Como los modelos CTRW se limitan a campos estacionarios de movimiento de partículas (es decir, que la distribución de probabilidades no cambia al situarlo en otro punto o instante), no resultan tan dispuestos a ser condicionados a las observaciones reales de las variables que controlan estos movimientos. El hecho de que los medios naturales tiendan a estar estructurados en un número más o menos grande de escalas organizadas jerárquicamente hace que los movimientos de partículas en su seno tengan una cierta coherencia que los modelos CTRW no capturan al ser estacionarios. Estos modelos deberían ser modificados en su formulación para poder capturar este detalle (Neuman y Tartakovsky, 2009).

A pesar que los modelos basados en ADE de exponentes fraccionarios incluyen variables con velocidades y coeficientes de dispersión fraccionarios, no resulta sencillo desarrollar un entorno teórico que permita desarrollar formalmente estas ecuaciones. Asimismo, queda poco claro el sentido físico de estos parámetros fraccionarios. En concreto, no parece sencillo estimar estos parámetros a partir de datos geológicos o

hidráulicos, más allá de calibrarlos a partir de las observaciones reales de concentración o flujo a posteriori.

La aplicabilidad de la ADE estocástica es, en principio, mucho más general que considerar la validez de las leyes de Darcy y Fick en una escala ω . Funcionaría igual de bien con cualquier aproximación lineal o no lineal del flujo y el transporte en la escala ω , mientras esta escala permita la observación y cuantificación de estos fenómenos. Bastaría utilizar el método MonteCarlo para obtener los resultados de un conjunto de realizaciones basados en estas aproximaciones (Morales-Casique y Neuman, 2006).

En resumen, podemos concluir que:

- a) Tanto el flujo como el transporte en medios porosos tienden a estar insuficientemente caracterizados por la dificultad que supone observar y describir el medio en que tienen lugar con el suficiente nivel de detalle.
- b) La ecuación general del CTRW se basa en suponer que las tasas de movimiento de las partículas forman un campo aleatorio homogéneo y no coherente. El concepto de “incoherencia” supone que las tasas de movimiento de partículas en distintas posiciones del medio no están relacionadas estadísticamente. De ahí la naturaleza univariada de la función de probabilidad de salto, $\psi(\mathbf{z}, s)$. Para poder simular un campo estadísticamente coherente debería utilizarse una distribución de probabilidad multivariada.
- c) Existe una correspondencia unívoca entre el modelo CTRW, la ADE estocástica no local y el modelo Lagrangiano no local. Los modelos en derivadas parciales fraccionarias (fADE) quedan limitados, como el CTRW, a campos de velocidad no correlacionados espacialmente y, en el caso de derivadas parciales fraccionarias con coeficientes constantes, a campos de velocidades que además sean estacionarios. Si el campo de velocidades es estacionario, no resulta posible manejar términos de fuente/sumidero, lo que supone una desventaja para el uso de los modelos CTRW y las fADE de coeficientes constantes.
- d) Se ha señalado (Neuman y Tartakovsky, 2009), que la ecuación fADE con coeficientes variables son casos especiales de la ecuación de convección-dispersión no-local estocástica (stnADE) en el caso de un campo de velocidades no homogéneo. Esto ocurre únicamente en el caso de que la concentración inicial de soluto sea nula en todo el dominio, velocidad de flujo independiente del tiempo y la posición, fluctuaciones alrededor de la velocidad media estacionarias y coeficientes de dispersión constantes.
- e) Todas las aproximaciones alternativas a la ADE requieren una serie de simplificaciones que limitan su aplicación práctica. Sin embargo, tanto la ADE estocástica no local como los modelos CTRW requieren muchas menos simplificaciones, aunque a costa de un esfuerzo computacional mucho mayor que el resto de modelos.

- f) La ecuación stnADE es la única entre las ecuaciones de transporte que es capaz de ofrecer, además de predicciones de concentraciones de soluto y flujos de masa, una medida del error asociado a las predicciones
- g) En ausencia de poros sin salida, la dispersión a escala local tiende a ser fickiana, ya que se sabe que la Ley de Fick es válida en el interior de los poros y la analogía de Taylor-Aris se conserva en promedio en un conjunto grande de poros interconectados

En los puntos anteriores se ha ofrecido un repaso de las diferentes formulaciones utilizadas para modelar el flujo y transporte a escala tanto de laboratorio como de campo. Estos modelos proporcionan diferentes formas de predecir el transporte de un contaminante inmerso en el seno de un acuífero saturado. Sin embargo, la predicción del transporte siempre necesita de una descripción del medio con mayor detalle que los modelos de flujo, por lo que hemos de encontrar maneras de tener en cuenta la pérdida de información al homogeneizar los materiales que forman el elemento discretizado a un único bloque de propiedades “efectivas”, promedio de las de todos los materiales en las proporciones en que se encuentran.

2.8 Experimentación en medios físicos de laboratorio

En esta sección se analizará el estado del arte actual de tres temas fundamentales en esta tesis: la evolución de las características constructivas de los tanques de experimentación, el tratamiento digital de imagen como sistema de medida de concentraciones y la determinación experimental de la dispersividad utilizando tanques de experimentación de escala intermedia.

2.8.1 Experimentación a escala intermedia

Los experimentos en medio poroso heterogéneo llevados a cabo en tanque de laboratorio (o Experimentos a Escala Intermedia, o ISEs) han sido utilizados en numerosas ocasiones para el desarrollo y validación de numerosas teorías en el campo del flujo y transporte. Sin embargo, históricamente, la necesidad de realizar medidas muy precisas ha hecho que este tipo de dispositivos tengan un coste que en muchas ocasiones se consideraba prohibitivo. Aun así, los avances en la tecnología de transductores de presión y los métodos de visualización han permitido que los ISE sean considerados cada vez más como una opción interesante para el estudio del flujo y transporte en sistemas saturados y no saturados. Entre las muchas aplicaciones posibles con este tipo de dispositivos se encuentran:

- El estudio del movimiento de solutos conservativos en medios en un campo de permeabilidades con cierta estructura de correlación
- Transporte de trazadores conservativos en fluidos de densidad constante o variable
- Reacciones químicas y microbianas en el seno de un fluido
- Transporte multifase y movimiento de NAPLS
- Efecto de macroporos en el flujo y transporte

El principal desarrollo de este tipo de dispositivos se llevó a cabo en las décadas de los 50 y los 60, en un esfuerzo por obtener una mejor comprensión del transporte y la dispersión de solutos conservativos. Y proporcionó un punto de apoyo para comprender las relaciones entre el coeficiente de dispersión longitudinal y las propiedades del medio poroso (tales como permeabilidad, rugosidad y la uniformidad del tamaño de partícula). Silliman (1997) proporciona un repaso de los logros más importantes de estas investigaciones.

En parte debido a los buenos resultados obtenidos por este tipo de investigaciones y, por otro lado, a los avances en teoría de flujo, transporte y reacciones en el seno de un fluido, el uso de experimentos de laboratorio o ISEs se han incrementado en gran medida en los últimos 20 años. Las áreas cubiertas, como se ha indicado, son muy diversas. Pero en el campo del estudio del flujo y transporte de solutos conservativos, las áreas de investigación son relativamente concretas.

2.8.1.1 Características constructivas

Los tanques de arena realizados son de muy diverso tamaño. Desde los 12 m del tanque en proyecto de la Universidad de Kentucky (Workman, E. y Serrano S. E., 2004) o los 10 m de longitud del tanque de Barth (Barth e Illangasekare, 2001), llamados de escala intermedia, hasta los tanques de pequeña escala de longitud comprendida entre los 1 y 2 metros (Ursino y col, 2001; Slater y col., 2002). En general, aquellos tanques dedicados al estudio cuantitativo de la dispersión en medios heterogéneos tienden a ser de escala intermedia, mientras que aquellos tanques de experiencias dedicadas al estudio cualitativo del comportamiento de contaminantes en el subsuelo son de menor tamaño (Thullner y col., 2002).

Según los trabajos de Welty y Elsner (Welty y Elsner, 1997), el tamaño de los tanques bidimensionales o tridimensionales están limitados por la escala de correlación de permeabilidades del medio a construir. La longitud, por tanto, queda entre los límites:

$$(10-100)\lambda_{\ln K} < L < L_{\max}$$

Siendo L_{\max} la longitud de espacio disponible y $\lambda_{\ln K}$ la correlación espacial deseada de la distribución del logaritmo de la permeabilidad en el dominio L . También existe un límite máximo para la escala de correlación espacial. Mientras que la escala de correlación debe ser pequeña comparada con las dimensiones del tanque experimental, debe ser asimismo lo bastante grande como para que la técnica escogida para medir la permeabilidad pueda ser utilizada dentro de la medida de la longitud de correlación sin alterar significativamente el campo de permeabilidades. Según los trabajos de Ababou y col. (1989), esta escala de correlación espacial debe quedar entre los límites:

$$4 \Delta x < \lambda_{\ln K} < (0,01-0,1) L$$

La gran mayoría de tanques construidos en los últimos años son tanques bidimensionales, aunque se hayan realizado grandes esfuerzos por construir tanques tridimensionales de un tamaño suficiente para caracterizar adecuadamente el flujo en medio heterogéneo.

A excepción de aquellos casos en los que no es conveniente el uso de materiales metálicos, se trata de tanques con paredes de cristal o plexiglás montados sobre un armazón de acero que les confiere la resistencia suficiente para soportar el peso del medio. En tanques bidimensionales una de las paredes contiene todos los puertos de medición y muestreo, mientras que la pared contraria queda despejada para poder ver a simple vista o grabar con cámara el paso del trazador. No es necesario que la pared que contiene el instrumental sea transparente, aunque así sucede en la casi práctica totalidad de los trabajos revisados.

2.8.1.2 Aplicaciones de los tanques de laboratorio

Uno de los estudios clásicos dentro de las aplicaciones recientes se debe a Silliman y Simpson (1987), en el cual construyeron una celda de flujo que, con ligeras modificaciones, ha servido de modelo para casi todas las celdas construidas a partir de esa fecha. En este estudio, Silliman y Simpson construyeron un medio heterogéneo que reproducía unos experimentos numéricos realizados por Smith y Schwartz (1980). Con este estudio, Silliman y Simpson validaron la teoría de que el efecto de escala en la dispersión podía ser reproducida tomando en cuenta las heterogeneidades hidráulicas. También constataron que la dispersividad tendía asintóticamente a un valor constante al aumentar la distancia desde el origen.

Otro experimento clásico fue el realizado por Elsner (1994), el cual desarrolló la técnica de construcción de medios heterogéneos con una estructura de correlación determinada. Aunque en ese estudio se construyó un único medio unidimensional, esta técnica puede adaptarse a la construcción de medios bidimensionales o tridimensionales. Gracias al avance desarrollado en este experimento, se han producido numerosos trabajos utilizando celdas de flujo similares. Continuando su trabajo, Silliman y Zheng (1999) diseñaron uno de estos tanques a fin de validar los resultados numéricos proporcionados por teorías estocásticas de Dagan sobre la dispersión de un penacho de trazador, obteniendo resultados consistentes con los modelos teóricos. Sin embargo, en algunos casos se produjeron desviaciones achacadas a la sensibilidad de la solución frente al umbral de corte empleado para determinar la existencia o no existencia del penacho

También se ha estudiado el transporte en medio no saturado por vías preferentes utilizando el concepto de “dos regiones” (Van Genuchten y Wierenga, 1976). Este estudio, realizado por Ursino (Ursino, 2000) utiliza una celda de flujo para simular la infiltración de un trazador fluorescente (sulfaflavina) a través de un medio cuyas vías preferentes de infiltración formaban cierto ángulo con el gradiente. Este estudio realiza un análisis detallado sobre la técnica de obtención de datos de concentración a partir de imagen digital.

Las teorías estocásticas han encontrado una potente herramienta en este tipo de dispositivos, puesto que permiten la construcción “in situ” de una realización de un campo de permeabilidades aleatorias con una estructura de correlación determinada. Berkowitz y Scher (2000) discuten la validez de la teoría estocástica al considerar la dispersión no como un proceso fickiano clásico, sino como un proceso estocástico según la teoría del “random walk”. En su estudio demuestran que los resultados de algunos experimentos de flujo antiguos que no casaban con teorías clásicas, muestran un mejor ajuste utilizando las teorías estocásticas de flujo y transporte.

Otro buen número de autores han trabajado en validar aspectos de las teorías estocásticas utilizando los experimentos de escala intermedia (Silliman, 2001; Berkowitz, 2000; Meerschaert, 1999).

Chao y Rajaram (2000) observaron que la dispersividad, tanto longitudinal como transversal, al ser estimada en un ensayo de bombeo, da valores del orden de diez veces menores que la que existe bajo un gradiente no forzado. Esta subestimación hace que las dispersividades estimadas para muchos acuíferos y que fueron obtenidas a través de ensayos de bombeo tuvieran que ser corregidas para su uso en modelación. Para llegar a este resultado, Chao y Rajaram utilizaron una celda de flujo tridimensional, a la que se podía someter tanto a un gradiente natural como a un gradiente forzado por bombeo.

2.8.1.3 Características de los medios porosos utilizados

Atendiendo a su heterogeneidad, podemos agruparlos en medios homogéneos (utilizados en pequeñas columnas de laboratorio para determinar las características de conductividad y dispersividad de un material concreto), medios heterogéneos simples y medios heterogéneos con propiedades estocásticas.

Los medios heterogéneos simples contienen pequeñas discontinuidades insertas en una matriz homogénea. Se utilizan, por lo general, para estudios de infiltración y flujo de contaminantes cuyas características no están lo bastante bien definidas como para permitir una modelización numérica compleja.

Los medios heterogéneos con propiedades estocásticas se conciben como la realización espacial de una función aleatoria cuyos principales parámetros estadísticos se conocen o se establecen a priori. La forma de generar este campo aleatorio de permeabilidades es a partir de un algoritmo diseñado por Tompson (1992) que, utilizando una transformada de Fourier, genera 2^n puntos de una realización con una media, varianza y escala de correlación de $\ln K$ especificadas por el usuario, según:

$$\gamma_{ff}(\xi) = \sigma_{\ln K}^2 \left[1 - \exp(-\xi / \lambda_{\ln K}) \right]$$

Donde $\gamma_{ff}(\xi)$ es el semivariograma de la función aleatoria, ξ la separación o distancia de lag (L), $\lambda_{\ln K}$ la escala de correlación de (L) y $\sigma_{\ln K}^2$ la varianza de $\ln K$ (o valor de la meseta del semivariograma). Este algoritmo genera un dominio mayor del necesario, por lo que debe extraerse el dominio deseado a partir de la tabla completa de datos generados. De esta manera, pueden generarse medios similares a acuíferos naturales, de forma que puedan compararse los resultados obtenidos en laboratorio con pruebas realizadas en campo (Garabedian y col., 1991)

2.8.2 Tratamiento de imagen digital como sistema de medida de concentraciones

2.8.2.1 Trazadores coloreados

El uso de la imagen fotográfica como sistema de medida de concentración de trazadores coloreados aparece debido al uso de algunos de estos trazadores en el estudio de la existencia de vías preferentes de infiltración en suelos naturales. Una cantidad de trazador conocidas se dejaba infiltrar en un suelo y, posteriormente se analizaba aquellas zonas cuya intensidad de tinte era mayor a base de obtener muestras y analizarlas en laboratorio por colorimetría. Por lo general, el tratamiento de imagen trataba de distinguir las zonas con trazador y sin él. Schincariol (1993) realiza un primer intento de cuantificar la concentración de soluto a partir de las fotografías de la evolución de un penacho en un tanque de laboratorio. Sin embargo, en su estudio, Schicariol utiliza fotografías analógicas, cuyos negativos escanea. Los errores geométricos y de concentración son grandes, pero la idea de que las técnicas utilizadas en los estudios de infiltración en suelos pueden ser utilizadas en el análisis de flujo y transporte continuó adelante.

En todo caso, durante la década de los 90, se comenzó a pensar en el tratamiento de imagen digital como una forma de poder estimar no sólo la existencia, sino también la concentración de trazador in situ (Aeby y col, 1997; Ewing y Horton, 1999). Sin embargo, se observó que muchos factores aparte de la concentración modifican la señal que llega a la cámara fotográfica y que afectan al resultado. Los más importantes son la temperatura de color y la intensidad de iluminación.

Aun así, pese a no tener un sistema de estimación de concentraciones muy desarrollado, Forrer y Kasteel (1999) estudian la dispersión longitudinal y lateral durante la infiltración de un trazador coloreado en un suelo natural a diferentes velocidades. Para ello, utilizan un método sistemático que más tarde publicarían Forrer y Papritz (2000) capaz de corregir errores geométricos y de iluminación, a fin de

cuantificar la cantidad de tinte utilizando el tratamiento de imagen digital. Este método se diseña para ser utilizado en perfiles de suelos naturales, a fin de reducir costes y ganar en precisión. Este método se basa en el cálculo de un polinomio de regresión con el valor de los canales rojo, azul, verde y la profundidad en el suelo como variables explicativas.

Posteriormente, se propusieron otros métodos de tratamiento de imagen. Stadler (2000), en un estudio de infiltración en tres muestras de suelo diferentes, utilizó tres tipos de calibración distintos, uno para cada suelo. Morris y Mooney (2004) utilizaron valores umbral para definir cuatro grupos de concentraciones para los que utilizaron un método de calibración distinto. Sin embargo, ninguno de los métodos anteriores parte de un análisis sistemático de la imagen digital y sus características. El primer trabajo metódico que analiza en profundidad todos estos detalles corresponde a Persson (2005). En su estudio, Persson utilizó 260 muestras de suelo con concentraciones variables entre 0 y 1,5 gr/l. Mediante un cuidadoso control de las variables, se analizó los efectos de la temperatura de color, parámetros de cámara e iluminación. Aplicando un modelo de computación neuronal, obtuvo una precisión del 99,4% con una cámara de 6 megapíxeles. Aún con ello, las técnicas de análisis de imagen para caracterizar la distribución de soluto quedaron estancadas al nivel de la observación de medios homogéneos.

Las técnicas de análisis de imagen evolucionaron posteriormente, para medios homogéneos, en el trabajo de Schincariol y col. (1993) al conseguir mayor precisión en la estimación de concentraciones. La técnica desarrollada por Schincariol y col (2003) fue más tarde adaptada y utilizada por Swartz y Schwartz (1998). Mientras que la técnica desarrollada por Schincariol y col. (1993) corrige los errores debidos a las distintas granulometrías y tamaño de poro, las concentraciones en los experimentos en medios heterogéneos quedaron menos definidas a falta de un sistema que tuviese en cuenta las diferencias de color de los distintos materiales. Además, esta técnica, al ser completamente manual, sólo ofrece buenos resultados con medios heterogéneos muy simples (p. ej. medios estratificados) con pocas variaciones en el color de los materiales o iluminación. Estas condiciones de iluminación no uniformes pudieron ser corregidas a partir de los trabajos de Ursino y col. (2001), aunque el efecto del diferente tamaño de grano y de poro en cada material quedó sin poder tenerse en cuenta.

Persson (2005) realiza un importante trabajo a la hora de definir las fuentes de error y la metodología necesaria para utilizar de manera fiable la imagen digital en el estudio del transporte (generalmente infiltración en zona no saturada) en suelos naturales. Esta metodología se ha adaptado con éxito al estudio del transporte en tanques de laboratorio

Los problemas más importantes a la hora de estimar adecuadamente las concentraciones de un trazador coloreado es la de separar diferentes curvas de calibración para cada uno de los distintos materiales de que está formado el medio

contenido en el tanque y un control preciso sobre la uniformidad de iluminación. McNeil y Oldenborger (2006) desarrollan un algoritmo de análisis de imagen capaz de identificar automáticamente las zonas de la fotografía del medio que deben ser objeto de una calibración independiente debido a sus propiedades o a la falta de uniformidad de iluminación. Frente a otros estudios previos que utilizan dos (Ostrom et al., 2003), tres (Ursino et al., 2001), o hasta cinco (Barth et al., 2001) curvas de calibración diferentes, McNeil y Oldenborger (2006) utilizan hasta 25 curvas diferentes. Recientemente, Goswami et al. (2009) realizan un detallado análisis de las fuentes de error y correcciones necesarias para obtener un resultado preciso eliminando las fuentes de ruido.

2.8.2.2 Trazadores fluorescentes

El uso de trazadores fluorescentes de manera cuantitativa para estudiar el transporte de solutos ha avanzado paralelamente al de los trazadores coloreados. Su ventaja principal frente a los trazadores coloreados es que permite una mejor precisión en la estimación de la concentración de soluto y evita la necesidad de utilizar varias curvas de calibración según el material. Además, permite realizar varios ensayos al mismo tiempo utilizando distintos trazadores, puesto que cada uno se excita y emite color a longitudes de onda diferentes. Al emitir una única longitud de onda, es posible aplicar la Ley de Beer para radiaciones monocromáticas a la hora de estimar la concentración de trazador. Sin embargo, es necesario de un sistema fotográfico mucho más costoso y sensible que en el caso de trazadores coloreados.

Uno de los problemas del uso de los trazadores fluorescentes se debe al llamado proceso de “fotodegradado” (o “photobleaching”). Este proceso consiste en la disminución de la intensidad máxima de emisión del trazador tras su excitación debido a la destrucción fotoquímica de moléculas de trazador (Imamura y col., 1955). Este proceso, aunque no bien comprendido, se modela como un proceso de decaimiento de primer orden (Song y col., 1995)

En un principio, debido a la dificultad de obtener un campo de iluminación homogéneo, estos trazadores se utilizaron en laboratorio en medios heterogéneos formados por perlas de cristal (Schincariol y Schwartz, 1993) iluminados lateralmente por lámparas de mercurio (Leutz y Ricka, 1996). La ventaja de este tipo de medios es que

Aeby (1998) presentó un primer sistema de fotografía de trazadores fluorescentes que permitía el uso de 5 trazadores diferentes. Para ello diseñó un sistema que, utilizando diversos filtros fotográficos para la iluminación y la cámara, lograba unos índices de correlación con la concentración de trazador superiores al 99,5%. Yu y Schwartz (1999), por su parte, desarrollan una metodología para la determinación detallada de las distribuciones temporales de concentración, en un ensayo de trazadores

realizado en un tanque de flujo, a partir del análisis de fotografías de los penachos de Rodamina obtenidas a través de la pared transparente del tanque. Sin embargo, esta metodología parte de la toma de imágenes analógica, y su posterior escaneado, por lo que dejó pronto de ser utilizada.

Al mismo tiempo, Ursino y Gimmi (1999) desarrollaron un sistema de corrección de iluminación no homogénea para corregir los errores debidos a esta causa. En su estudio, Ursino y Gimmi utilizan un medio heterogéneo para estimar el efecto de las vías preferentes en la dispersión local de un trazador fluorescente. Este sistema de corrección permitió el uso de tanques de mayor tamaño.

Posteriormente, Löhmansröben y Roch (2000) presentaron un sistema de medida de concentración de trazadores fluorescentes in situ, utilizando para ello la fluorescencia inducida por láser (Laser Induced Fluorescence, o LIF). Sin embargo, la dificultad de referenciar geométricamente las medidas, hizo que este sistema de estimación de concentraciones se redujera al análisis de muestras de suelo en laboratorio.

Actualmente, el método de fotografía de mayor uso es el establecido por Aeby y Schulze (2001). Aunque este método se utilice preferentemente para estudios de infiltración en suelos naturales, en numerosas ocasiones se ha adaptado para el estudio del transporte en tanques o columnas de laboratorio (Vanderborght y Gahwiller, 2002; Persson, 2005).

Oostrom (2007), realiza un exhaustivo repaso de las distintas técnicas alternativas de tratamiento de imagen utilizados en los tanques de escala intermedia, fundamentalmente en el campo de la remediación de contaminación por NAPLs. Entre estas técnicas cabe destacar la tomografía de resistividad eléctrica (ERT), métodos de espectro no visible como técnicas de rayos X y radiación gamma.

2.8.3 Estudio de la dispersión no-fickiana mediante tanques de experimentación

El uso de tanques de experimentación tiene una larga historia a la hora de caracterizar de manera cualitativa el fenómeno de macrodispersión que dio origen a la teoría de dispersión no fickiana (Skibitze y Robinson, 1963), al comprobar la existencia de fenómenos no caracterizados correctamente por la teoría fickiana (Hoffman et al., 1996, la dificultad de obtener una serie de datos con el nivel de detalle (tanto espacial como temporal), hace que hasta el desarrollo de un sistema de monitorización que lo permitiera, el estudio de la dispersión no fickiana quedase limitado al campo teórico. No es de extrañar, pues, que con el abaratamiento y la mayor precisión de los sistemas de

medida, muchas de las primeras aplicaciones de los tanques de experimentación consistieron en validar estas formulaciones alternativas o explicar los fenómenos observados en los tanques de laboratorio a la luz de estas nuevas formulaciones (Levy y Berkowitz 2003, Lipiec y Hatano, 1998., Berkowitz y col., 2000).

Levy y Berkowitz (2003), y Berkowitz y col (2000) modelan el transporte en un medio heterogéneo de laboratorio utilizando tanto la ecuación clásica de convección-dispersión como el modelo “Continuous Time Random Walk” (modelo CTRW). En el estudio, se concluye que el modelo CTRW reproduce mucho mejor los tiempos anormalmente rápidos de llegada, así como las largas colas de las curvas de llegada. Obtienen, además, que incluso en medios homogéneos se dan fenómenos no fickianos, por lo que ponen en duda la validez de la hipótesis de la dispersión fickiana. Lipiec y Hatano (1998) modelan las características hidráulicas de un medio heterogéneo según la dimensión fractal, que es parte del modelo de transporte de convección-dispersión fraccional (FADTM)

Históricamente, los estudios sobre dispersión de solutos se han llevado a cabo en columnas de laboratorio a escala pequeña (de un rango de decenas de centímetros a un par de metros), lo que ha centrado los estudios en la dispersión longitudinal. Bear (1972) realiza un repaso sobre los experimentos de laboratorio en columna realizados en la década de los 50 y 60. Sin embargo, al aplicar las conclusiones de esos estudios al medio real, se observó que los resultados no concordaban. Ciertamente, el número y clase de heterogeneidades que pueden incluirse en una columna de laboratorio son limitadas. Algunos trabajos (Silliman y Simpson, 1987; Silliman y col, 1987) introducen heterogeneidades sencillas en tanques tridimensionales para obtener curvas de llegada sencillas, pero no realizan mapas de concentraciones al no disponer de un sistema fotográfico adecuado.

Durante la década de los 90, uno de los principales esfuerzos fue el de obtener algoritmos que permitiesen generar en estos tanques de experimentación un medio heterogéneo con propiedades estadísticas similares a las encontradas en la naturaleza (Barth y col., 1996; Chao y col., 1996; Welty y Elsner, 1997). Por ello, los tanques de laboratorio de escala intermedia (es decir, de más de 1 m en la dirección de flujo) comenzaron a utilizarse al permitir la inclusión de un mayor número de heterogeneidades similares a las encontradas en la naturaleza. En estos tanques las condiciones experimentales son conocidas y controladas, y los datos de concentración y velocidades de flujo son mucho más accesibles que en los medios reales. Glass y col. (1998) fueron capaces de medir las velocidades de flujo locales en un tanque de experimentación. Schincariol y Schwartz (1990) midieron la distribución especial de la concentración de soluto en sistemas de flujo de densidad variable, mientras que Barth y col, (2001) midieron las variaciones de conductividad hidráulica en un tanque de experimentación de medio heterogéneo.

Diversas investigaciones (Huang et al. 2002; Theodoropoulou et al. 2003; Gaganis et al. 2004) demuestran que las técnicas basadas en el análisis de la imagen digital del movimiento de un trazador coloreado resultan una valiosa herramienta para estudiar experimentos de flujo y transporte llevados a cabo en laboratorio. Esta validez se debe a que son capaces de proporcionar una serie de mapas de concentraciones en el tiempo y en el espacio mucho más precisa que con los métodos convencionales y de manera no intrusiva.

Aun así, a pesar de que el número de estudios que utilizan tanques de experimentación de escala intermedia ha crecido en los últimos 15 años, pocos de ellos han investigado el comportamiento no fickiano del transporte de solutos. Silliman y Simpson (1987) y Schincariol y Schwartz (1990) son los pocos ejemplos de más de 15 años que se encuentran sobre el particular. Siguiendo la estela de estos trabajos, Forrer (1999) y Foerrer y col (2000) utilizan imágenes digitales para visualizar el movimiento de un trazador coloreado. En estos trabajos, parámetros del transporte como la dispersividad se estiman tras optimizar el ajuste entre los perfiles de concentración calculados y observados de convertir el color de los píxeles de la imagen en concentraciones de soluto.

Pang y Hunt (2001) llevaron a cabo estudios de la dispersividad a lo largo de una columna de 8 m de longitud, obteniendo que la dispersividad variaba con la distancia recorrida aún en un medio homogéneo. Levy y Berkowitz (2002) ampliaron este estudio realizando diversos ensayos de flujo y transporte en un tanque de laboratorio utilizando tres tipos de medios: un medio homogéneo, un medio heterogéneo aleatorio y un medio heterogéneo con correlación exponencial, utilizando tres tipos de arena. Los resultados demuestran que en todos los casos, incluido en el medio homogéneo, las curvas de llegada de soluto muestran características que no quedan bien explicadas por la teoría clásica.

Posteriormente, Inoue y Tanaka (2005) e Inoue y col (2006) utilizaron la imagen digital para estimar el coeficiente de dispersión y en un tanque bidimensional de escala intermedia para estimar el coeficiente de dispersión global y su evolución temporal, así como la velocidad convectiva del penacho de trazador. En este tanque se realizaron ensayos de flujo y transporte con distintos gradientes y en medios homogéneos formados por materiales de diferentes granulometrías. Los resultados muestran que el coeficiente de dispersión es proporcional al gradiente de alturas y aumenta conforme disminuye la granulometría del material. Lo que implica que la dispersividad es inversamente proporcional al tamaño de grano del material y es independiente de la velocidad. También establecen que el ratio entre la dispersividad longitudinal y lateral es aproximadamente de 0,1 y describen cómo la diferencia entre los resultados observados y los predichos por la ecuación de convección-dispersión aumentan conforme aumenta la velocidad. Los trabajos examinados se centran en la obtención detallada de la evolución de la dispersividad global en el tiempo y, hasta el momento no se tiene noticia de ningún trabajo centrado en analizar la dispersividad a

escala local y su evolución temporal en un medio heterogéneo, a falta de desarrollo de una metodología capaz de estimar este parámetro a partir de mapas de concentración globales.

Para esta investigación es necesario contar con un gran número de datos de piezometría y concentración a lo largo del tiempo. Obtener estos datos en un experimento en campo al nivel de detalle y precisión requerida resulta imposible. Por ello, se ha optado por estudiar el fenómeno de dispersión en un medio heterogéneo simplificado pero inspirado en una formación geológica real. Este tanque se ha equipado con un sistema de adquisición de datos de piezometría de alta precisión. También se ha puesto a punto un dispositivo fotográfico capaz de obtener gran cantidad de datos de concentración tanto en el espacio como en el tiempo de forma no invasiva y sin interferir en el proceso de flujo y transporte. En el siguiente capítulo se detalla el tanque construido, sus características y funcionamiento.

3. Modelo de experimentación a escala intermedia

3.1 Descripción del dispositivo físico, justificación de materiales y detalles constructivos

3.1.1 Construcción del tanque de experimentación

Se ha desarrollado y construido un dispositivo de laboratorio consistente en un tanque de experimentación en el que se construyó un medio poroso heterogéneo basado en las propiedades de una formación geológica real de características conocidas. En el seno de ese medio se creó un gradiente hidráulico y se introdujo una cantidad conocida de un trazador no conservativo coloreado. A través la fotografía de la evolución del penacho y obteniendo la correlación entre el matiz de color mostrado por el penacho en un punto y la concentración de trazador en ese punto, se obtiene una serie muy detallada de mapas de concentración a lo largo del tiempo. Mediante el análisis de imagen digital se puede, por tanto, obtener un mapa en el espacio y el tiempo del valor de la dispersividad asociado a un elemento discretizado concreto. Modificando el tamaño de estos elementos de discretización se puede observar la evolución de estos valores de dispersividad según el tamaño de escala.

A fin de obtener los datos necesarios para estimar las dispersividades locales instantáneas, se diseñaron y llevaron a cabo diversos experimentos de flujo y transporte en el interior de un tanque de experimentación de pared transparente. Este tanque, construido en metacrilato, se realizó con dimensiones generales de 1400 mm de longitud, por 400 mm de altura, por 200 de profundidad. En su interior alberga un hueco de 1400 x 400 x 50 mm en el que se construyó el medio poroso. Este medio fue realizado en arena de diferentes granulometrías, y está compuesto por elementos de 25 mm de longitud, 20 mm de altura y 50 mm de profundidad. Cada uno de estos elementos está formado por el mismo tipo de arena, por lo que se asume que su conductividad y demás características hidráulicas son constantes.

Previamente a la construcción del medio poroso, se crearon en cada extremo del tanque dos cámaras de 100 mm de longitud, 400 mm de altura y 50 mm de profundidad. El objetivo de realizar estas dos cámaras es crear zonas separadas del medio, a fin de conseguir una entrada y salida de agua uniforme en toda la altura del tanque. Para crear cada cámara, se colocó una malla metálica de forma transversal, con una abertura de paso de 56 μm , tamaño inferior a la granulometría de los elementos más finos del

medio. De ese modo se impide la entrada de finos en las cámaras de entrada y salida, a la vez que se permite el paso del agua. Esta entrada de agua, a fin de crear un flujo uniforme, paralelo y laminar en toda la sección del tanque, se realizó insertando un tubo de PVC de 335 mm de diámetro, ranurado en toda su longitud y colocado verticalmente en la zona central de cada cámara. Cada uno de estos tubos verticales se conectó, mediante una manguera flexible de PVC, a un tanque de nivel constante situado en el exterior. Colocando estos tanques a alturas diferentes, pudo crearse un gradiente de potencial en el interior del tanque, de valor conocido y constante a lo largo de la vertical. De este modo, pudo controlarse con precisión y de manera independiente la altura piezométrica en las zonas de entrada y salida de agua al tanque. Cada una de las cámaras se relleno, además, con perlas de vidrio de 2 mm de diámetro que aparte de contrarrestar el empuje lateral del medio además ayudaba a que el flujo fuese lo más uniforme en todo el espesor y profundidad del tanque.



Figura 3.1 – Vista general del tanque de experimentación

Las características constructivas y una descripción más detallada del tanque de experimentación se encuentra en el anexo correspondiente.

3.2 Descripción del medio utilizado

3.2.1 Origen de los datos de conductividad

En el interior del tanque de experimentación se escogió reproducir los patrones de variabilidad espacial de un medio natural de alta heterogeneidad, en el seno del cual se llevase a cabo un experimento de transporte de masa en condiciones saturadas. Para ello se tomaron los datos de conductividad hidráulica de una capa del llamado MADE site. De este acuífero, situado en la base aérea de Columbus (Mississippi, USA), se ha trazado un detallado mapa de conductividad hidráulica a partir de los datos obtenidos de 5232 medidas de flujo procedentes de 67 pozos completos de 5,2 cm de diámetro situados en un área de 6,5 hectáreas. Las medidas de conductividad se realizaron midiendo los flujos verticales durante un test de bombeo. Para ello se utilizó un aforador tomando medidas cada 15.24 cm de profundidad. Los detalles pueden verse en (Christiansen, Hill; 2004) y (Boggs JM, Beard LM; 1993).

El MADE site es un acuífero libre formado por depósitos no consolidados procedentes de los ríos Tombigbee y Buttahatchee, que lo limitan. Se trata de un acuífero que ha sido investigado exhaustivamente por medio de técnicas hidrogeológicas y geofísicas (Boggs y Young, 1992; Bowling y Rodríguez, 2005), que indican que la principal formación del acuífero consiste en arenas de granulometría heterogénea con pequeños lentejones de yeso y arcilla. La parte inferior queda limitada por una capa continua de arcilla procedente de la formación marina Eutaw, que restringe el movimiento en profundidad. Mediciones de caudal in situ han proporcionado literalmente miles de mediciones de conductividad horizontal en las proximidades del dominio del ensayo (figura 3.1). Estos datos tienen un rango de variación del orden de 4.5 órdenes de magnitud. (Rehfeldt y Boggs, 1992)

Desde finales de la década de los 80 y durante los 90, se llevaron a cabo varios ensayos de transporte de trazadores a escala de campo y con gradiente natural en el llamado Macro-Dispersion Experiment Site (MADE), localizado en Columbus, Mississippi. El primer ensayo de trazadores (MADE-1) realizado en la formación tuvo lugar durante un periodo de 20 meses entre 1986 y 1988, en el cual se inyectaron en el acuífero sales de bromo y ácido benzoico clorado. El movimiento de estos solutos fue monitorizado utilizando un sistema de toma de muestras a varios niveles de profundidad (Adams y Gelhar, 1992, Rehfeldt y Boggs, 1992). El segundo ensayo, (MADE-2), tuvo lugar entre Junio de 1990 y Septiembre de 1991, y fue realizado a fin de obtener una base de datos exhaustiva que pudiese servir para validar nuevos modelos de flujo y transporte. En este ensayo MADE-2 se inyectaron varios compuestos orgánicos y sales de tritio, siendo las sales de tritio utilizadas como trazador conservativo. (Boggs y col. 1993).

(a) Location of the MADE site



(b) Layout of test features

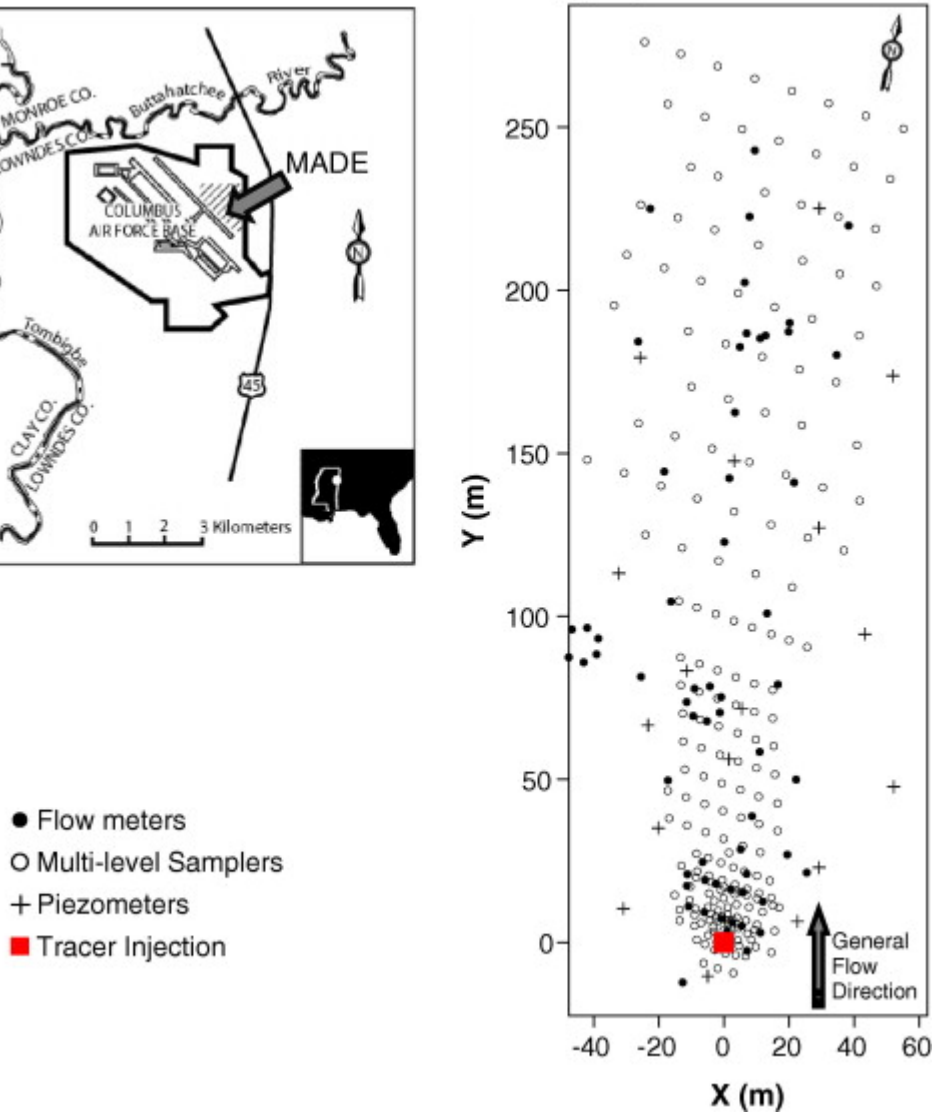


Figura 3.2 – Situación del MADE site y localización de los pozos de medida y muestreo (fuente: Liu y Chen, 2008)

En la figura siguiente se observa un mapa de las conductividades horizontales de la formación acuífera obtenidas a partir de los datos de conductividad medidos en los sondeos.

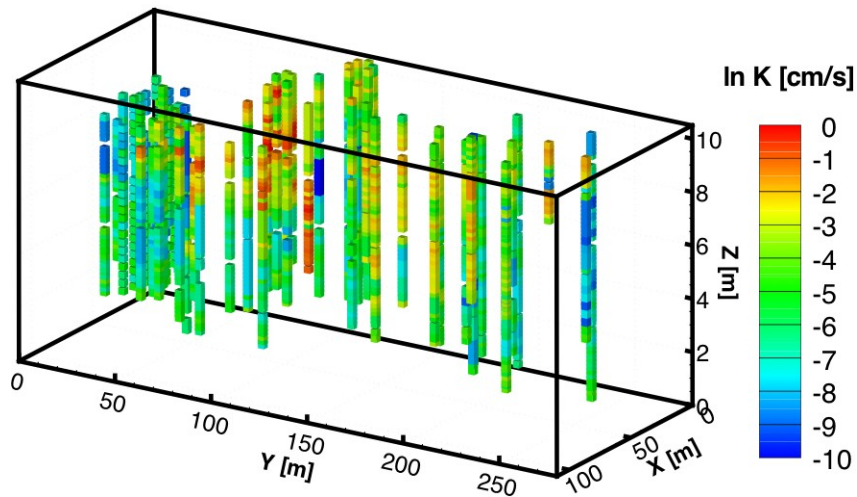


Figura 3.3 – Datos de conductividad hidráulica obtenidos a partir de los sondeos ejecutados en el MADE site (fuente: Llopis-Albert y Capilla, 2009)

A partir de estos datos, se generó un mapa muy detallado de las conductividades generando los datos restantes por interpolación gracias al software de krigado 3-D GSLIB.

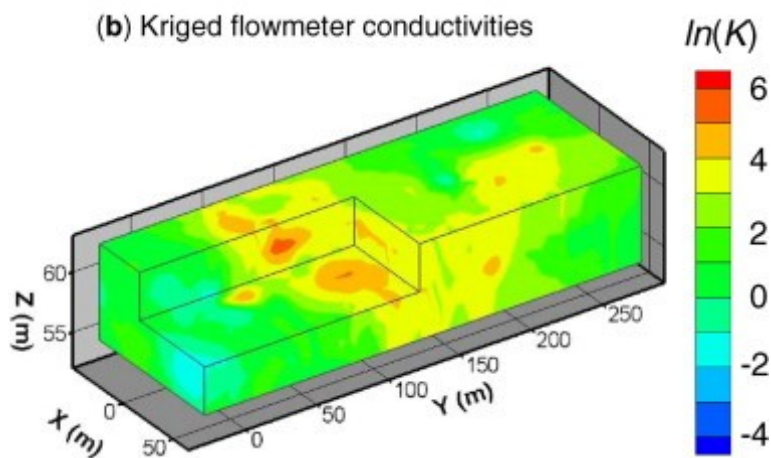


Figura 3.4 – Mapa de conductividades de la formación, en m/día, generado por krigado de los datos de conductividad horizontal a partir de los datos de los sondeos existentes (fuente: Liu y Chen, 2008)

Se han realizado varios estudios para explicar el comportamiento “anómalo” de los penachos de trazador inyectados en el MADE site (Baeumer y Benson 2001; Barlebo y col. 2004). Utilizando un modelo de trayectorias aleatorias continuas en el tiempo, Berkowitz and Scher (1998) demostraron que el transporte anómalo puede ser

debido a heterogeneidades de tamaño menor que la escala de discretización, tales como fracturas de alta conductividad. Debido a ello, se ha señalado que el MADE site puede contener vías de flujo preferente que pueden ser reproducidas como fracturas de alta conductividad. Benson y col. (1995) utilizaron un modelo de derivadas fraccionarias para modelar el movimiento de las partículas de soluto según la caracterización de Lévy del movimiento browniano. Feehley y col. (2000), y Harvey y Gorelick (2000) demostraron que era más adecuado un modelo de porosidad dual que un modelo clásico de convección-dispersión para reproducir las concentraciones promedio en los ensayos de trazadores realizados en el MADE site.

La ventaja del modelo de porosidad dual se debe a la mejora al reproducir las vías preferentes de flujo. Baeumer y col. (2001) modelaron el transporte utilizando una forma de la ecuación de convección-dispersión que trataba al tiempo como una variable aleatoria a fin de representar el efecto acumulado de la transición del soluto entre zonas de alta y baja conductividad. Este modelo representaba de manera precisa los perfiles de concentración del penacho de tritio del ensayo MADE-2 realizado en el acuífero. Berkowitz y col. (2006) demostraron que la mayoría de modelos alternativos aplicados en esta formación comparten una base física similar. Es decir, la modelación de las heterogeneidades de tamaño menor que la escala de discretización, que contribuyen de manera importante a la existencia de un transporte anómalo y que deben ser representadas de una forma adecuada para modelar este transporte de manera adecuada. Llopis-Albert y Capilla (2009) utilizaron un método de condicionamiento gradual (GC), que permite la utilización de datos de conductividad, medidas de nivel piezométrico en régimen transitorio y concentración de solutos en un medio no gaussiano, permitiendo también la utilización de datos “blandos” e indirectos. Esta metodología, acoplada a un modelo multi-rate transfer model (MRMT), consigue un buen ajuste con de los resultados a 350 días en medios no gaussianos como el MADE site en el ensayo MADE-2.

Por otra parte, Barlebo y Hill (2004) sostienen que las heterogeneidades de pequeño tamaño, tales como las que forman vías de flujo preferente descritas en los estudios anteriores, no tienen gran importancia en el transporte de solutos. Sostienen que el modelo clásico de convección-dispersión es capaz de explicar las anomalías observadas en el penacho de soluto si se utiliza un modelo 3D calibrado con 8 parámetros diferentes. Las discrepancias observadas entre los resultados de conductividad calibrada y las medidas de conductividad in situ se achacan a las limitaciones de los caudalímetros y errores de medida. La precisión de estas medidas in situ ha sido objeto de debate en Hill y Barlebo (2006) y Molz y Zheng (2006).

La formación hidrogeológica escogida reúne pues tres características de gran interés para ser usada como modelo de variabilidad espacial a imitar. Por una parte exhibe patrones de variabilidad espacial altamente heterogéneos con características que la diferencian de la variabilidad espacial de tipo gaussiano. En segundo lugar, se dispone de una cantidad muy importante de datos, por tratarse de un experimento de

campo con una alta inversión de recursos y por ello se tiene un volumen de datos imposible de encontrar en general. Por otra parte, diversos autores han trabajado con esta información y se ha visto la dificultad de reproducir los datos experimentales mediante modelos de transporte que no contemplen la heterogeneidad existente e incluso que no recurran a alternativas como los modelos de transporte multitasa.

3.2.2 Diseño del campo de conductividades hidráulicas

Para la formación del medio se utilizaron 5 tipos de arenas silíceas distintas, lavadas y con un porcentaje mínimo de impurezas. La conductividad de cada una fue estimada según el test ASTM 2434. Este test normalizado destinado a medir la conductividad hidráulica de muestras no consolidadas consiste en saturar con agua una muestra de material introducida en una celda con área transversal y longitud conocidas. Entre ambos extremos de la celda se establece una diferencia de potencial hidráulico utilizando para ello un tanque de nivel constante conectado a la entrada y otro a la salida, ambos de diferentes alturas. Mediante la diferencia de presiones entre ambos extremos de la celda se crea una diferencia de potencial hidráulico y un flujo de agua a través de la celda. Este caudal circulante, según la Ley de Darcy, será proporcional al área de la celda, a la diferencia de potencial entre los extremos de la celda, a la longitud de ésta y, finalmente, a la conductividad hidráulica del material. Siendo todas las restantes variables conocidas, midiendo el volumen de agua de salida en un tiempo determinado se llega a al valor de la conductividad hidráulica del material con el que se ha rellenado la celda.

De forma parecida, para estimar la porosidad de cada arena, se llenó con ella un recipiente de 1 litro (1000 cm^3) y se pesó el conjunto. Se asume que al tratarse de un material granular suelto, la porosidad efectiva es igual a la porosidad total. Al tratarse de arenas silíceas, se tomó la densidad del material como $2,5 \text{ gr/cm}^3$. La diferencia entre el peso obtenido y el calculado para ese volumen se asume que es debido a la fracción volumétrica de poros. Es decir:

$$\theta = \left(1 - \frac{gr}{\rho \cdot Vol} \right) \cdot 100\% \quad (3.1)$$

Los resultados obtenidos para cada una de las arenas se muestran en la tabla siguiente

Arena	Tamaño medio de grano (mm)	Conductividad hidráulica (cm/s)	Porosidad (%)
Tipo 1	0,078	0,0055	9
Tipo 2	0,2	0,0212	11
Tipo 3	0,7	0,1032	15
Tipo 4	0,8	0,3941	17
Tipo 5	0,85	0,6934	21

Tabla 3.1 – Características de las arenas utilizadas

Tal como se ha explicado en el punto anterior, se dispone de un enorme número de medidas de conductividad horizontal de la formación MADE site. En concreto se dispone de un total de más de 500,000 datos, recogidos en 24 capas de 140 por 55 datos cada una. [Escriba una cita del documento o del resumen de un punto interesante. Puede situar el cuadro de texto en cualquier lugar del documento. Utilice la ficha Herramientas de cuadro de texto para cambiar el formato del cuadro de texto de la cita.]

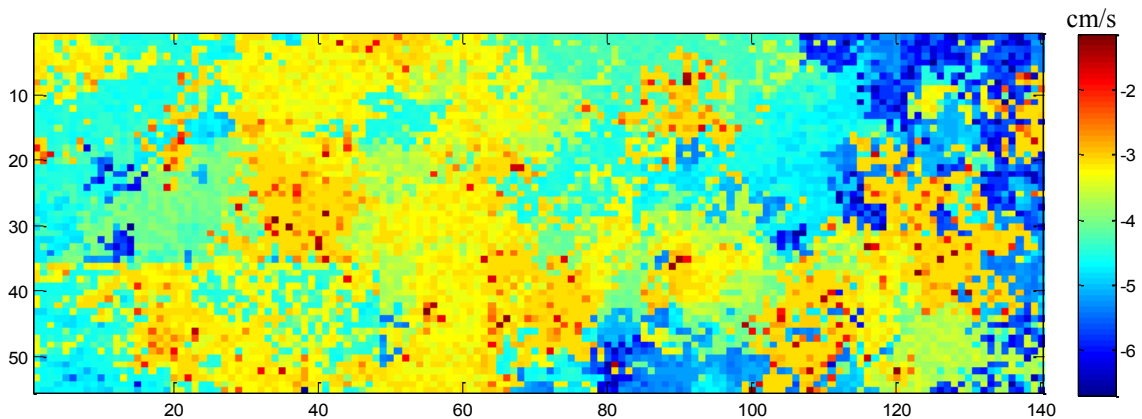


Figura 3.5 – Capa nº 21 del MADE site, origen de los datos utilizados en el tanque (escala logarítmica)

Puesto que es imposible reproducir tal número de datos en el tanque físico, se realiza la selección de un subconjunto de 800 de estos datos. En concreto se escogió una matriz de 20 x 48 datos de la zona inferior izquierda de la capa nº 21 del MADE site.

Los datos de conductividad de que se dispone tienen una precisión de $\pm 10^{-7}$ cm/seg, mientras que sólo se dispone de 5 tipos de arena diferentes. Esto hace necesario reunir el total de datos en cinco grupos, cada uno de ellos con un valor medio de conductividad similar a la conductividad de cada una de las arenas de que se disponen. Para conseguirlo, los valores contenidos en una de las capas de la base de datos se ordenaron de menor a mayor y dividieron en cinco grupos diferentes, según el dato

pertenciera a los percentiles del 0-15%, 16-30%, 31-70%, 71-85% y 86-100%. Se calculó el valor medio de los datos pertenecientes a cada percentil. Y éstos se consideraron lo bastante aproximados a los de las arenas disponibles, de modo que se utilizaron éstas para construir un medio que reproduzca los patrones de variabilidad espacial de la formación natural dentro del tanque de experimentación (ver tabla 3.2).

<i>Material n°</i>	<i>Intervalo de valores del MADE site (m/día)</i>	<i>Conductividad MADE (m/día)</i>	<i>Conductividad arenas (m/día)</i>
1	$1.63 \cdot 10^{-4} - 6.75 \cdot 10^{-3}$	0.0036	0.0055
2	$6.80 \cdot 10^{-3} - 2.51 \cdot 10^{-2}$	0.0181	0.0212
3	$2.51 \cdot 10^{-2} - 4.43 \cdot 10^{-1}$	0.1127	0.1032
4	$4.43 \cdot 10^{-1} - 7.42 \cdot 10^{-1}$	0.7194	0.3941
5	$7.42 \cdot 10^{-1} - 6.42$	0.8892	0.6934

Tabla 3.2 – Comparativa entre los valores de conductividad del medio a reproducir y los de las arenas utilizadas

La conductividad de cada elemento del conjunto seleccionado se reasignó al valor promedio del grupo al que pertenecía. De ese modo se dispuso de un conjunto de datos de conductividad inspirado en una formación conocida que pretende recoger las principales características del campo de conductividades heterogéneo. Este nuevo conjunto de datos se utilizó como plantilla a la hora de construir el medio poroso contenido en el tanque de experimentación según la técnica de relleno húmedo. (véase sección siguiente). En la figura 3.3 puede observarse la correspondencia entre los datos de conductividad de la formación que se pretende modelar, la reasignación de cada elemento dentro de cada uno de los 5 grupos que se establecieron y el medio físico finalmente construido.

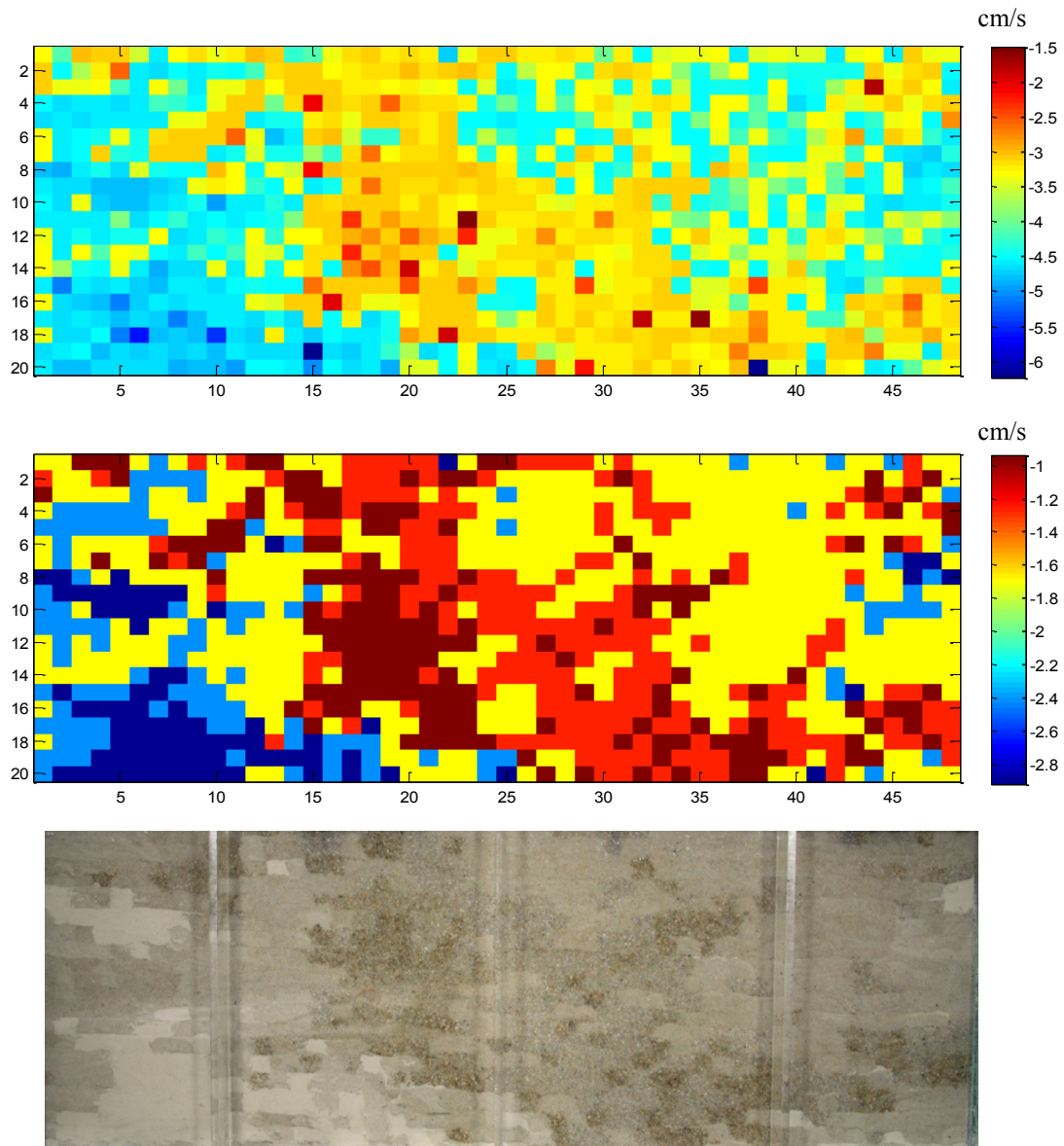


Figura 3.6 – Subconjunto de la capa 21 del MADE2 site a modelar, datos agrupados en 5 grupos, y fotografía del medio construido en el interior del tanque (escala logarítmica)

3.3 Construcción del medio poroso

Puesto que nuestro objetivo a la hora de construir el medio heterogéneo donde se llevarán a cabo los experimentos de flujo y transporte es crear elementos separados con conductividades de diferente magnitud, es necesario evitar la mezcla de estas arenas. En este caso se utilizó la técnica de “relleno húmedo”. Esta técnica presenta la ventaja frente a otras como la de “medio congelado” en que la arena de cada elemento queda depositada de una manera homogénea, sin estratificación de finos y minimizando la posibilidad de asentamientos posteriores del material que modifiquen la conductividad de los elementos. En la técnica de relleno húmedo el medio se va construyendo capa por capa, utilizando una plantilla de huecos en los que se depositan las distintas arenas por separado según el medio a modelar. Para evitar la estratificación de los finos, la mitad del grosor de la plantilla está cubierto por una lámina de agua libre, sobre la que se deposita el material. Una vez se completa una capa del medio, se extrae la plantilla y se eleva la lámina de agua por encima de la capa, utilizando para ello un tanque de nivel constante conectado al medio. Así, se procede ya con la capa siguiente.

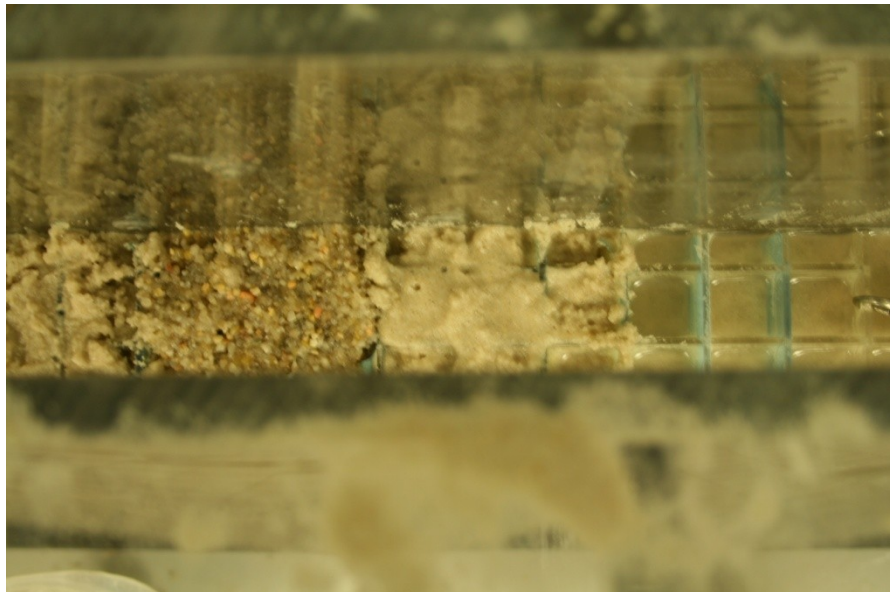
Para construir el medio se utilizó una plantilla cuadrículada realizada con metacrilato con una serie de huecos de 25 mm de longitud, 50 mm de anchura y 20 mm de espesor. Mediante un tubo de plástico conectado a un embudo, se rellenaron los distintos huecos según el grupo al que perteneciera el elemento. La longitud y anchura de la plantilla ajustan perfectamente con el espacio interior del tanque, permitiendo de esa forma una separación correcta y la construcción del medio deseado.

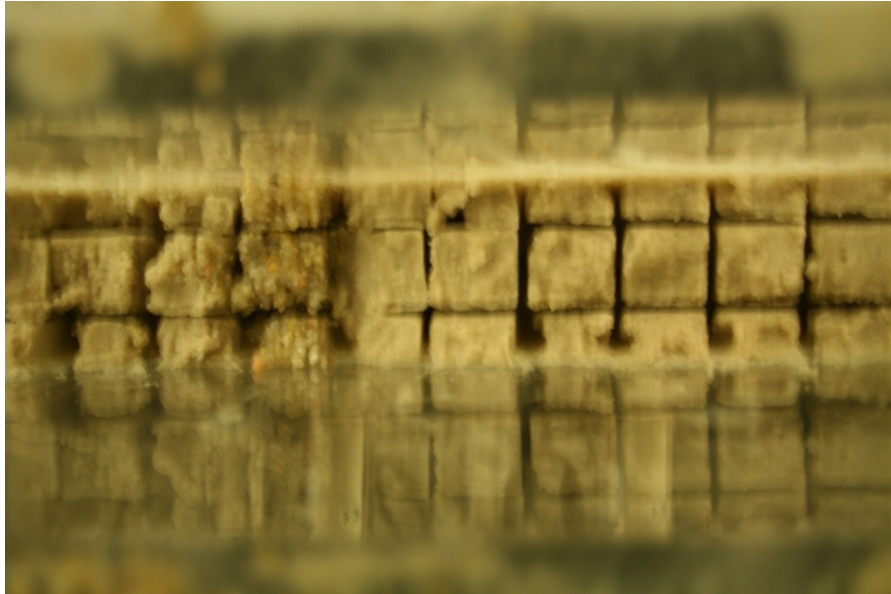


Figura 3.7 – Detalle de la operación de relleno húmedo con la plantilla

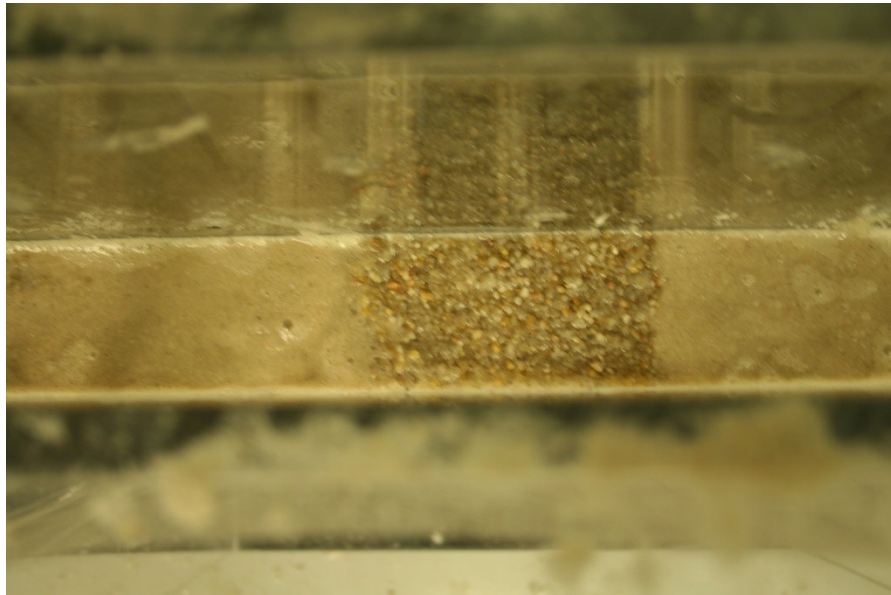
En detalle, el procedimiento del relleno húmedo del medio se compone de las siguientes operaciones (figura 3.8):

- 1.- Mediante los tanques de nivel constante se elevó el nivel piezométrico 10 mm. por encima del fondo del tanque
- 2.- Se vertió la arena deseada en cada hueco. De ese modo, cada hueco define un elemento separado del resto con características de conductividad y dispersividad homogéneas, puesto que la lámina de agua evita la segregación de los granos por tamaño.
- 3.- Se esperó a la sedimentación de la arena para proceder a extraer la plantilla y se comenzó con la fila superior de elementos.
- 4.- Cuando el nivel de la arena alcanzaba una de las hileras de sensores, se colocaron las agujas y sensores necesarios para taponar los agujeros de la pared del tanque.
- 5.- Una vez terminada la última hilera de elementos, se dejó sin extraer la plantilla para evitar que debido a la sedimentación de la arena se crease una zona vacía en la parte superior, por la que el flujo pudiese puentear el medio poroso.





b)



c)

Figura 3.8 – Diferentes operaciones de llenado del tanque: a) colocación de la arena en la plantilla; b) retirada de la plantilla; c) elevación de la lámina de agua

En el anexo correspondiente se explica con mayor detalle el procedimiento de relleno y los distintos métodos alternativos para crear medios porosos con la estructura deseada.

3.4 Sistema de adquisición de datos

3.4.1 Sistema de medida de alturas piezométricas

Una vez construido el medio, es necesario poder obtener datos de la distribución de niveles piezométricos en el interior del medio que nos permitan describir lo que ocurre en su interior. Las variables que nos ayudan a describir el proceso de flujo y transporte son, básicamente, aquellos relativos al flujo (conductividad, porosidad y gradiente piezométrico) y a la concentración de soluto en el espacio y el tiempo. Si bien se ha diseñado un sistema de toma de datos por imagen digital que permite una buena descripción de la concentración de soluto de manera no invasiva, para la medida de alturas piezométricas fue necesario acceder a él a través de la pared del tanque. Para ello, en la parte trasera (no visible) se realizaron una serie de pequeños agujeros a través del metacrilato para poder introducir sensores de presión. Para minimizar los efectos de pérdida de presión ocasionados por efecto de la pared del tanque, se selló este agujero pasante con silicona y se introdujo a través de él una aguja de 30 mm de longitud que comunicaba la presión hidráulica existente en la parte central del medio con el sensor de presión.

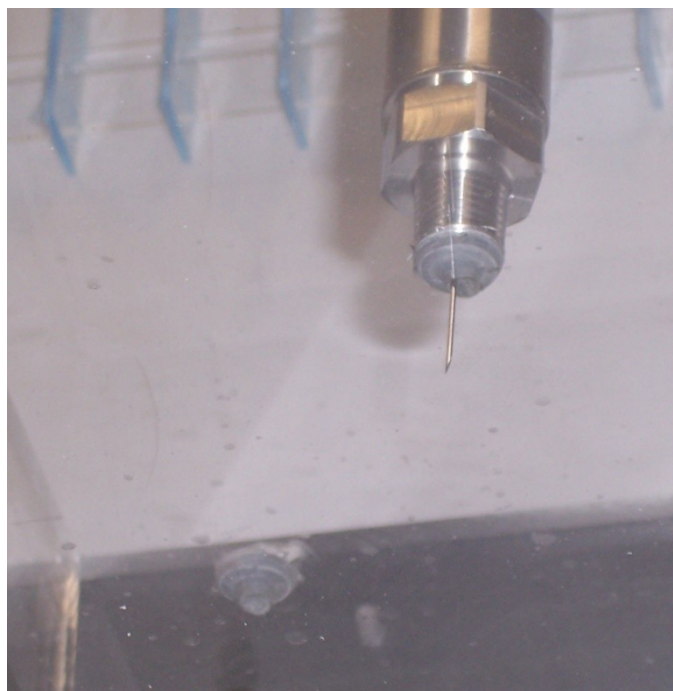


Figura 3.9 – Detalle de uno de los sensores de presión roscado a la pared del tanque (obsérvese el agujero roscado sin sensor en la parte inferior izquierda)

De esa forma se obtuvieron lecturas directas y continuas de las alturas piezométricas hasta en 36 puntos distribuidos homogéneamente a lo largo del medio. Los sensores se colocaron formando una malla regular de 3 filas y 12 columnas,

equidistantes entre sí y se conectaron a un ordenador a través de un dispositivo digital de almacenamiento de datos. Los datos ofrecidos por estos sensores no son medidas de presión, sino medidas de diferencia de potencial proporcionales a la presión ejercida sobre la boca del sensor. Es necesario, pues, calibrar la respuesta de los sensores a distintas presiones previamente a su uso.

Para calibrar estos sensores frente a diferentes alturas de agua, se enfrentaron sus medidas a las alturas creadas utilizando los tanques de nivel constante de entrada y salida de agua. El coeficiente de correlación fue superior al 99% en todos los casos y la precisión alcanzada inferior a 1 mm de columna de agua, precisión que se consideró suficiente para caracterizar de manera adecuada la distribución de alturas piezométricas en el interior del medio.

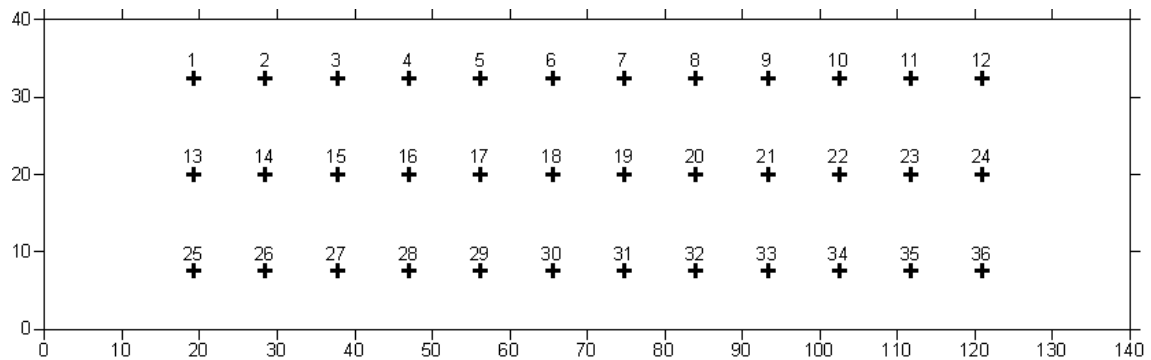
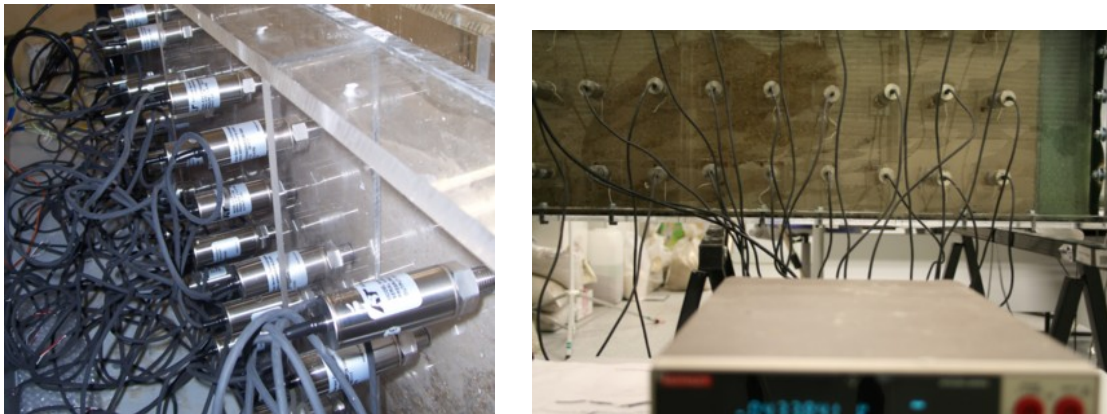


Figura 3.10 – Imágenes de la pared trasera del tanque, utilizada para la instrumentación, y situación geométrica de la posición de los 36 sensores insertados en la pared del tanque

Gracias a estos datos se pudo obtener un mapa detallado de las presiones en el interior del medio que, posteriormente, sirvió como base para obtener un mapa de las velocidades locales de flujo, tanto en dirección como en módulo.

3.4.2 Sistema de medida de concentraciones

Para estimar las concentraciones de soluto en un punto en un instante dado se utilizó una técnica basada en la toma de fotografías digitales de un trazador coloreado. El objetivo es estimar la concentración del trazador a partir de la intensidad de color emitida por él.

Cuando sobre un compuesto coloreado incide la luz, absorbe únicamente ciertas longitudes de onda contenidas en el espectro luminoso, reflejando las restantes en lo que denomina su “color propio”. Estas longitudes de onda absorbidas y emitidas dependen de la identidad del compuesto y permanecen iguales sin importar la cantidad de compuesto presente. Sin embargo, la cantidad de luz absorbida depende de la concentración de compuesto presente en el medio. A mayor concentración de ese compuesto, mayor será la proporción de radiación absorbida en las longitudes de onda propias.

Esta relación viene dada por la Ley de Beer, la cual establece que, para una radiación monocromática (que sólo contiene una longitud de onda), al incidir una radiación de intensidad I_0 , la intensidad de luz absorbida por el compuesto al incidir sobre una disolución, es proporcional al logaritmo de la concentración del compuesto presente según:

$$I_t = I_0 \cdot 10^{-\alpha C} \quad (3.2)$$

Donde I_t es la intensidad de luz transmitida, I_0 la intensidad de la luz incidente, C la concentración del compuesto y α una constante que es propiedad del compuesto y de la longitud de onda incidente, conocida como “coeficiente de extinción molar” o “absortividad molar”. Esta fórmula describe cómo, para una radiación monocromática, existe una relación exponencial entre la luz transmitida a través de una sustancia y la concentración de la sustancia en el medio.

Si lo que se mide no es la intensidad absorbida, sino la intensidad reflejada, la Ley de Beer se formula como:

$$I_r = I_0(1 - 10^{-\alpha C}) \quad (3.3)$$

De ese modo, podemos aprovechar la medida de la intensidad reflejada por la solución de trazador coloreado para estimar la concentración de éste. Sin embargo, la ley de Beer es aplicable únicamente la luz con la que se ilumina una disolución es monocromática. En el caso de que la luz incidente no lo sea, la relación entre la concentración del trazador y la radiación emitida no es inmediata. Esto es debido a que al ser iluminado por luz que contiene un gran número de longitudes de onda, la intensidad de

luz absorbida es el conjunto del efecto de las distintas absorptividades para las distintas longitudes de onda incidentes. Así, los objetos reflejan un conjunto diverso de longitudes de onda en distintas proporciones que, combinadas, forman el “color propio” observado. A este tipo de colores se los conoce como colores *no-espectrales*. La relación entre el color no espectral y la concentración del trazador del medio no es una relación sencilla. Sin embargo, esta relación sigue siendo proporcional y específica del compuesto. Y, por tanto, susceptible de ser modelada.

Esta relación ha intentado modelarse en varias ocasiones a través de herramientas estadísticas. Forrer (2000) utiliza 155 muestras de trazador para lograr una relación polinómica de segundo orden entre los valores medios de los canales R, G y B y el logaritmo de la concentración. Pese a que su experiencia se realizó en suelos naturales, el coeficiente de correlación logrado fue de $r^2 = 0,90$. Fluhler y Flurry utilizan otro polinomio de ajuste utilizando los datos de color para conseguir, en suelos naturales, un coeficiente de correlación de $r^2 = 0,94$. Persson (2005) utilizó una red neuronal para lograr una mayor precisión, logrando de ese modo errores medios cuadráticos de 0,0747 a 0,0944 gr/l. Stadler (2000) utilizó también un polinomio de ajuste de segundo grado para lograr coeficientes de correlación de hasta 0,997 utilizando Brilliant Blue como trazador. Este trazador se ha utilizado en numerosos estudios de infiltración en campo debido a su nula adsorción en medios libres de materia orgánica. El máximo de energía luminosa absorbida por este colorante corresponde a una longitud de onda de 630 nms. Este colorante ha sido utilizado como trazador en numerosos estudios de infiltración en suelos y flujo subterráneo, debido a su estabilidad y facilidad de detección. Flury y Flühler (1994) demuestran que debido a su carácter neutro, no tiende a ser adsorbido por los constituyentes del suelo, aunque su uso en suelos naturales puede plantear problemas al interaccionar con la materia orgánica (Germán-Heis y Fluir (2000)). El protocolo para relacionar la intensidad de color con la concentración de trazador está bien establecido en la bibliografía y se ha utilizado en numerosas ocasiones en suelos de campo (Forrer (2000), Kaastel y Vogel (2002)). Hoy en día, el procedimiento para estimar la concentración de trazador Brilliant Blue es un procedimiento habitual en los estudios de infiltración en suelos naturales, lográndose correlaciones superiores al 99% en la mayoría de casos.

La relación entre la intensidad de color reflejada y la concentración depende, además, del tipo de iluminación utilizado, de la distancia de observación, la temperatura y otro gran número de variables que hacen necesaria establecer una calibración específica para cada situación diferente.

Puesto que lo que se desea es obtener la señal de color debida exclusivamente al trazador para poder calibrar la relación intensidad de color – concentración, hay que restar de la imagen del medio con trazador, la componente debida al color del medio. Para ello se tomó una foto del tanque de experimentación en las mismas condiciones de iluminación y posición, que se utilizó como “blanco”. Posteriormente, una vez inyectado un trazador coloreado, se realizaron una serie de fotografías de la evolución del trazador

a lo largo de intervalos regulares de tiempo. El resultado de sustraer, de estas imágenes, el valor de color del “blanco” en ese punto nos proporciona la componente debida únicamente a la concentración de trazador. Esta componente proporciona una imagen fiel y detallada de la distribución de la intensidad de color del trazador en el medio.



Figura 3.-3.11 – Montaje del sistema de imagen digital destinado a la estimación de concentraciones en el medio

A fin de determinar la concentración de un trazador coloreado en un punto del medio, se calcula que la diferencia del color en un punto en el que existe una concentración de trazador frente al color en ese mismo punto libre de trazador, depende exclusivamente de la concentración de éste.

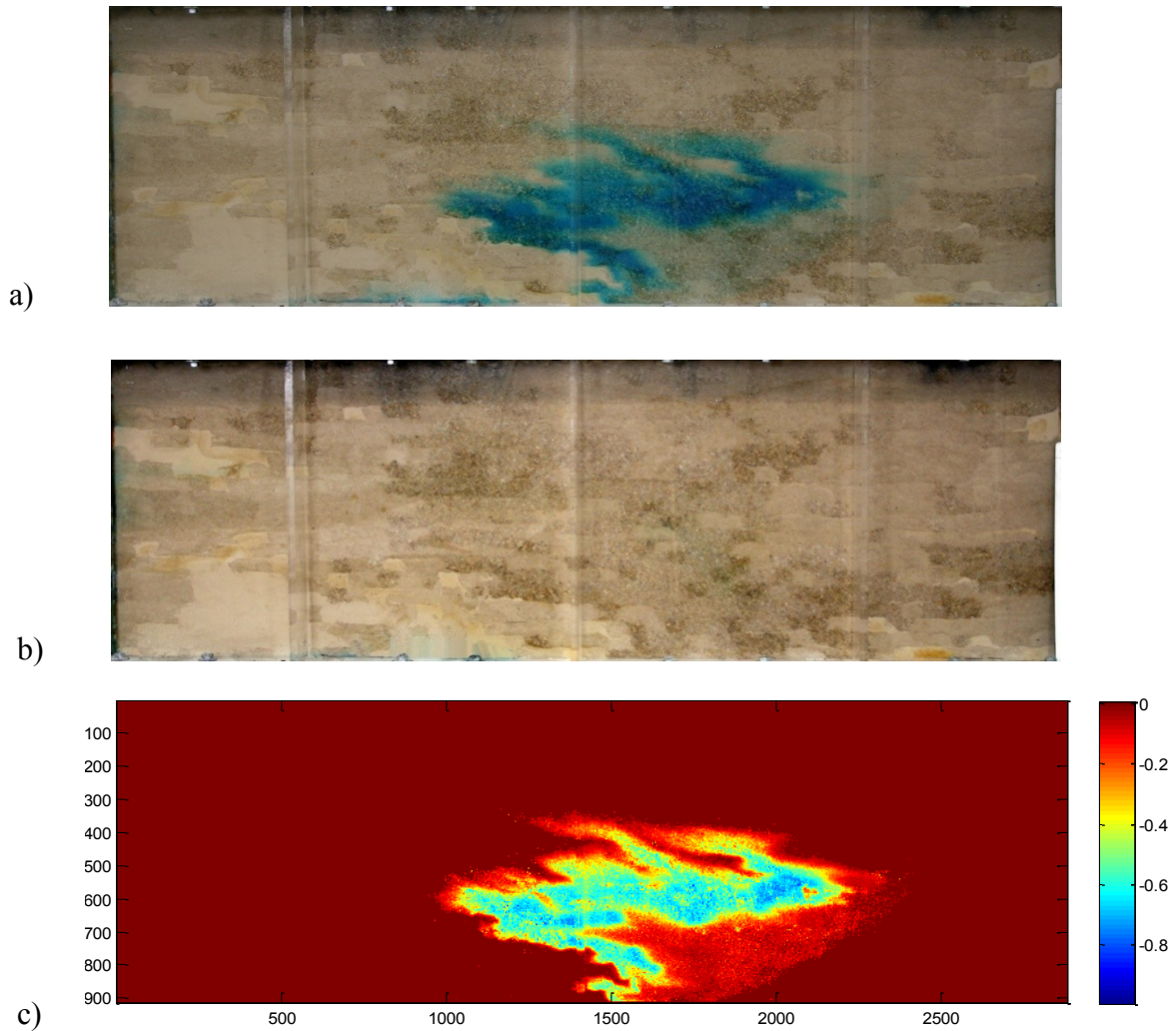


Figura 3.12 – Fotografía de un instante de la evolución del trazador en el tanque (a), del tanque sin trazador utilizado como “blanco” (b), y diferencia en el color entre ambas imágenes debida a la absorción de luz por el trazador.

Para obtener la relación entre la componente de color absorbido, se realizó un polinomio de ajuste utilizando 40 disoluciones del trazador conocido como “Brilliant Blue” variando su concentración desde 11,86 gr/l hasta 0,002679 gr/l.

De todas estas disoluciones se tomaron imágenes digitales y se aisló de la imagen la parte correspondiente a la solución coloreada restando la imagen obtenida de un tubo de ensayo con arena saturada con agua destilada. Este tubo se utilizó como blanco, cuyos valores promedio en los tres canales de color R_0 , G_0 y B_0 , fueron restados a los valores del promedio de los tres canales de color de los tubos con disoluciones de trazador. De ese modo, la diferencia en el color es achacable únicamente a la concentración del trazador.

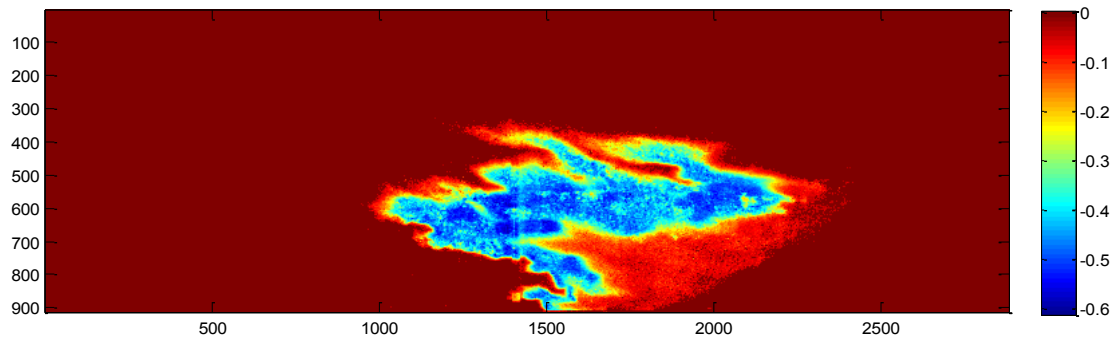
Los logaritmos de la concentración del trazador C de las muestras, en gramos/litro fueron ajustados paso a paso a través de un polinomio de segundo orden

frente a los valores promedio muestrales de R_s , G_s y B_s de las distintas muestras. El coeficiente de correlación obtenido para todos los casos fue superior a 0,99. El polinomio resultante fue:

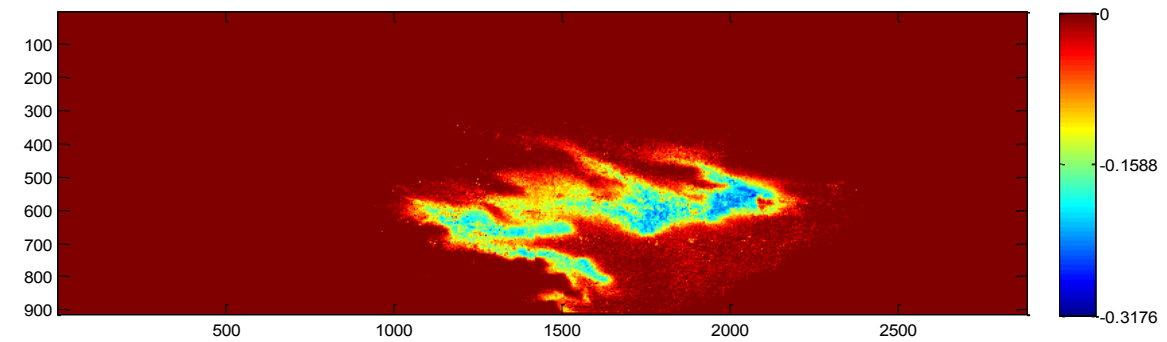
$$\log C(gr/l) = -3.2754 - 10.2516\bar{R} - 6.4104\bar{G} + 5.7154\bar{B} - 14.6265\bar{R}^2 - 12.6479\bar{G}^2 - 1.4025\bar{B}^2 + 8.1113\bar{R}\cdot\bar{G} - 1.4478\bar{R}\cdot\bar{B} + 21.2332\bar{G}\cdot\bar{B}$$

Donde \bar{R} , \bar{G} y \bar{B} son los valores de cada uno de las componentes de color rojo, verde y azul, respectivamente. Esta relación fue utilizada para obtener el valor de la concentración en cada punto del tanque en un instante dado (para una información más detallada, consúltese el Anexo B)

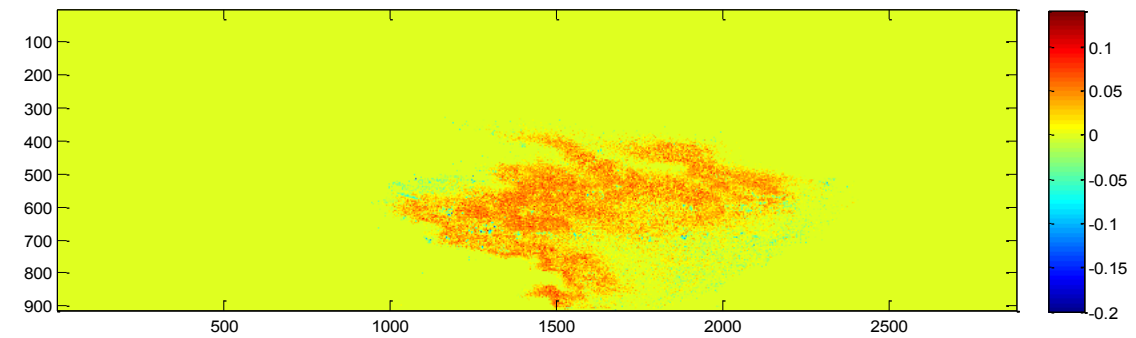
a)



b)



c)



d)

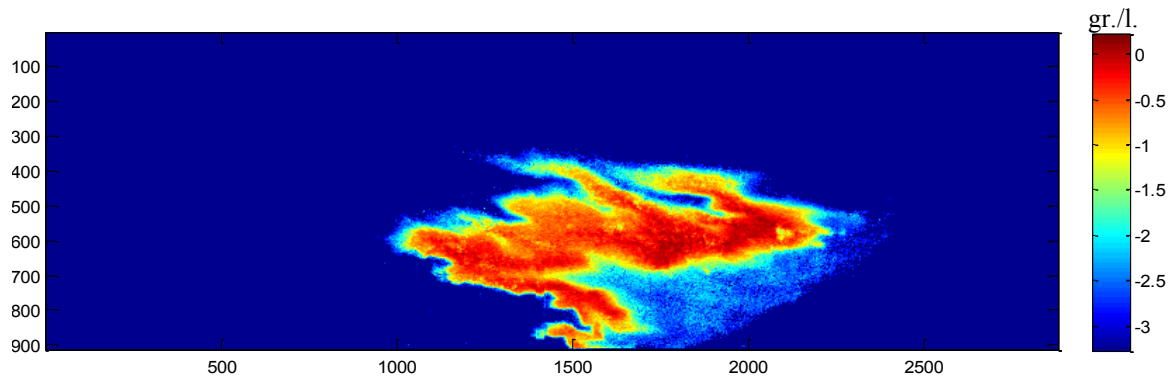


Figura 3.13 – Mapa del canal de color rojo (a), verde (b) y azul(c), y mapa del logaritmo de la concentración en el interior del tanque (en gr/litro, escala logarítmica)

La interpretación de las variables y coeficientes de estos polinomios no son sencillos, porque estamos utilizando un modelo de regresión con términos mixtos en lugar de una relación basada en un fenómeno físico como es el de la absorción de una luz monocromática según establece la Ley de Beer. Al haber tratado los datos de color mediante herramientas estadísticas, éstos pierden su significado físico. Aunque el ajuste final sea muy bueno, los coeficientes de ajuste dependen enormemente de las condiciones de iluminación, la distancia, la cámara o el ángulo de la imagen. Es importante mantener estas características constantes y controladas a la hora de asegurar la exactitud de los resultados. Por ello es muy importante dejar instalados todos los dispositivos de imagen (cámara y focos de iluminación) desde el principio de un ensayo con trazadores hasta su completa finalización.

3.5 Descripción de los ensayos realizados

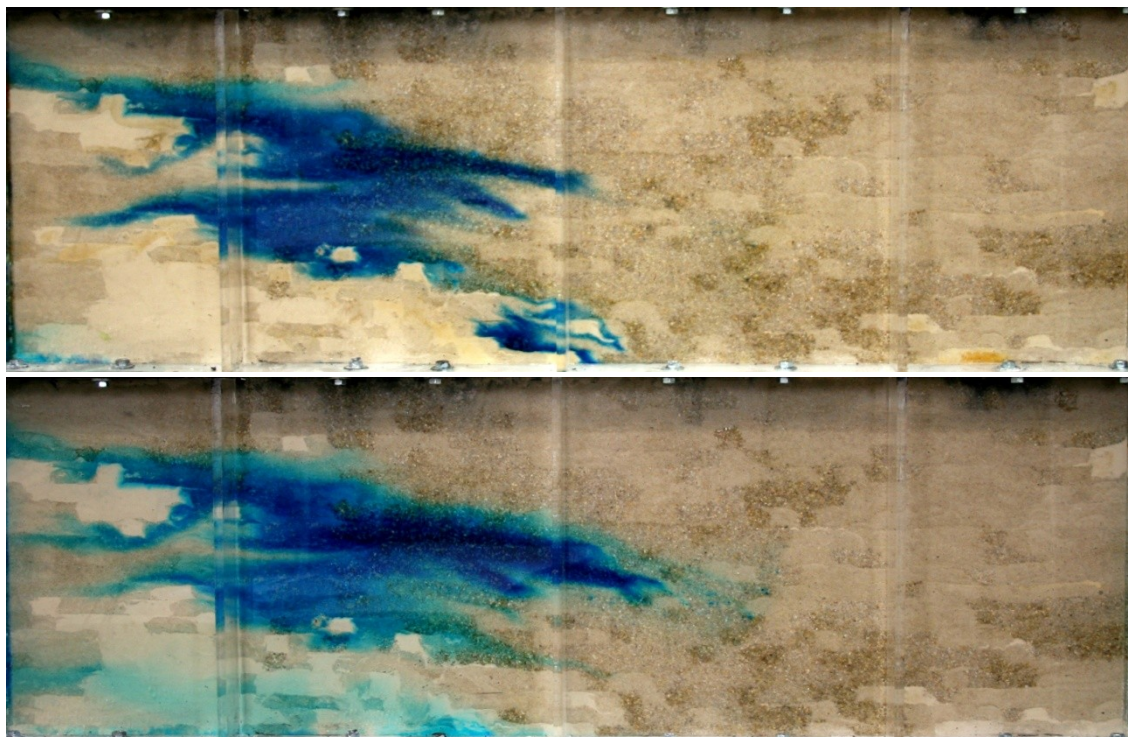
3.5.1 Experimentos realizados

Se realizaron tres experimentos de flujo y transporte creando para ello diferentes gradientes hidráulicos e inyectando diferentes cantidades de trazador. Sus características principales se resumen a continuación:

<i>Experimento n°</i>	<i>Altura entrada (cm)</i>	<i>Altura salida (cm)</i>	<i>Gradiente</i>	<i>Masa inyectada</i>	<i>Caudal observado</i>
1	118,5	117,2	1,08%	0,346 gr.	1,9 ml/s
2	118	177,2	0,91%	0,346 gr.	1,73 ml/s
3	117,6	117,3	0,25%	0,173 gr.	0,6 ml/s

Tabla 3.3 – Principales características de los experimentos realizados

Para estudiar en profundidad el fenómeno de la dispersión, es conveniente tener un gradiente pequeño, puesto que un gradiente alto favorece principalmente el fenómeno de convección. Por ello, de los tres experimentos realizados, se seleccionaron los datos generados por el último de ellos, ya que en él es más acusado el fenómeno de dispersión. En adelante, todos los datos y conclusiones del trabajo quedan referidos a éste.



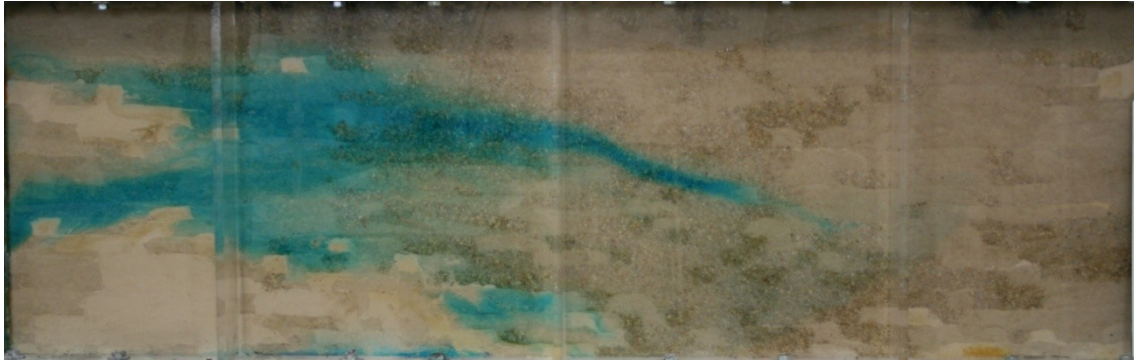


Figura 3.14 – De arriba a abajo: Imágenes del primer al tercer experimento, donde se aprecia cómo la importancia relativa de la dispersión hidrodinámica aumenta conforme disminuye el gradiente

3.5.2 Justificación y detalles del experimento

Entre los experimentos realizados se buscó aquel en el que se pudiera apreciar mejor el efecto de la dispersión hidrodinámica, teniéndose un recorrido y desarrollo adecuado del penacho. Por tanto, se seleccionó el último de los experimentos de flujo y transporte realizados, puesto que en los demás la dispersión quedaba enmascarada por una mayor importancia de la componente convectiva. Una vez construido y rellenado el tanque, y con los dispositivos de toma de datos montados y calibrados, se procedió a realizar un experimento de flujo y transporte del que obtener datos experimentales a fin de conocer las dispersividades locales instantáneas de los elementos del medio. Para ello se realizaron varias operaciones que se detallan a lo largo de este capítulo:

- Establecimiento de un gradiente de potencial hidráulico entre los extremos
- Obtención del mapa de alturas piezométricas en el interior del tanque
- Inyección del trazador en el tanque
- Toma de imágenes de la evolución del penacho y obtención de los mapas de concentraciones a lo largo del tiempo

3.5.3 Establecimiento de un gradiente hidráulico

Tal como se ha descrito en el capítulo anterior, la altura piezométrica tanto de entrada y salida del tanque queda controlada mediante un sistema de elevación de tanques de nivel constante. La altura del nivel constante de ambos tanques quedó referida al nivel fijo de referencia del suelo del laboratorio. De ese modo, se estableció una diferencia de alturas entre los niveles de ambos tanques de:

Nivel de entrada: 117,6 cm sobre el suelo

Nivel de salida: 117,3 cm sobre el suelo

Considerando que la longitud del medio poroso es de 1200 mm, el gradiente hidráulico creado es de:

$$i = \frac{1176 - 1173}{1200} \cdot 100 = 0,25\%$$

Este gradiente se mantuvo estable alimentando el tanque de entrada mediante una bomba peristáltica de caudal 0,76 cm³/s. Se recogió el sobrante del tanque de nivel constante a la salida, determinando su volumen por peso. Este valor, dividido por el tiempo arrojó el valor del caudal circulante. Una vez obtenido un valor constante en el tiempo, se determinó que se había alcanzado el régimen estacionario del flujo. Alcanzado el régimen estacionario el recipiente, que inicialmente pesaba 135 gr, pasó a pesar 172,5 gr. Por tanto, el caudal sobrante fue de

$$Q_{deriv} = \frac{678 - 135}{30 \cdot 60} = 0,60 \text{ cm}^3/\text{seg.}$$

Una vez obtenido el valor del caudal circulante a lo largo del tiempo, y comprobado que este caudal permanecía constante, se procedió a activar el sistema de toma de datos de piezometría. Gracias a estos datos se pudo obtener un mapa detallado de la distribución de alturas piezométricas en el medio y, posteriormente, de las velocidades locales en cada elemento de las discretizaciones tomadas.

3.5.4 Descripción del ensayo

Se inyectó 1 cm³ de solución de trazador Brilliant Blue FCF (véase sección 4.5.2), con una concentración de 173 gr/l. Para ello, se desenroscó uno de los sensores y se introdujo una jeringa con una aguja de 90 mm de longitud que se introdujo hasta alcanzar la pared opuesta y, con cuidado, se fue apretando el émbolo de manera continua conforme se retiraba la jeringa. De ese modo, el volumen de trazador inyectado fue lo más uniforme posible en toda la profundidad del tanque. Una vez introducido el trazador se tomaron imágenes de la evolución de la pluma de trazador cada 6 minutos a lo largo de 60 horas.

Todas ellas fueron pasadas por el proceso de corrección de iluminación no homogénea y color de fondo no homogéneo antes de aplicar el algoritmo para el cálculo de concentraciones de trazador. Los mapas de concentraciones obtenidos muestran cierto ruido de fondo debido al umbral de corte empleado para determinar la existencia o no existencia de trazador. Este umbral de corte corresponde a la concentración de trazador que se consideró indetectable, que en la calibración de la relación color-

concentración de trazador, se estableció en $2 \cdot 10^{-4}$ gr/l. Las imágenes fueron almacenadas y convertidas en mapas de concentración a través del proceso detallado en el anexo 2.

3.6 Modelación numérica del experimento

3.6.1 Tamaño de malla y condiciones de contorno

Se realizó un modelo numérico destinado a reproducir el tanque de experimentación principalmente por dos motivos: obtener datos sobre velocidades de flujo y de distribución de niveles piezométricos en los puntos del tanque en que no se disponía de ellos. También se realizó este modelo debido a que el asentamiento y la compactación in situ de los materiales, junto con el posible arrastre de finos de unos elementos a otros son susceptibles de modificar la conductividad hidráulica de los materiales, por lo que es necesario calibrar las conductividades del modelo numérico frente a las alturas medidas en el tanque real. Para ello se creó un modelo del mismo tamaño que el tanque: 1400 mm de longitud, 420 mm de altura y 70 mm de espesor. La capa superior e inferior se definieron como inactivas, así como la fila anterior y posterior, a fin de representar las paredes impermeables de metacrilato.

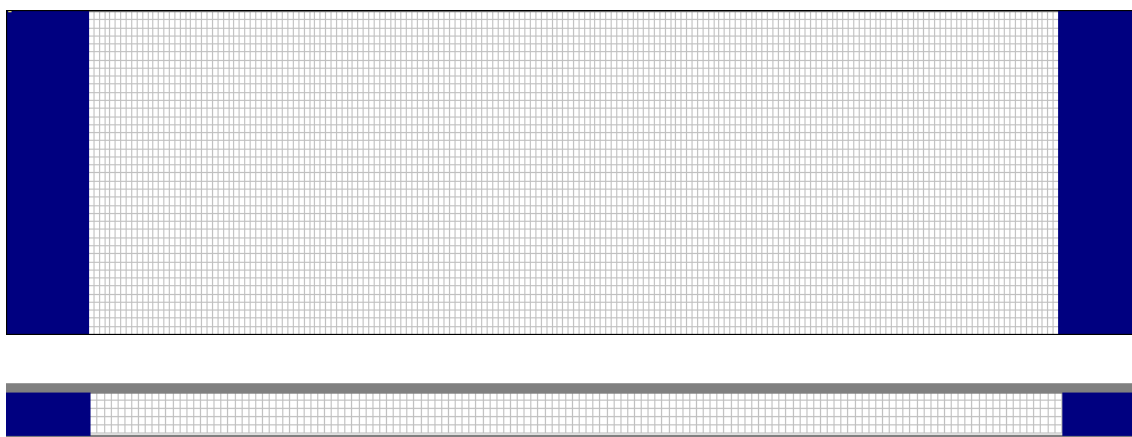


Figura 3.15 – Vista lateral y superior de la discretización del modelo numérico (en color gris las celdas inactivas, en color azul las celdas de nivel constante)

Cada elemento homogéneo del medio físico se representó por 30 celdas en el modelo numérico (3 celdas de longitud, 2 de altura y 5 de espesor). En total, el modelo numérico consta de 165 elementos de longitud por 42 de altura y 7 elementos de espesor (48510 celdas en total).

3.6.2 Conductividad hidráulica y observaciones de alturas

Se introdujo en el modelo los datos de conductividad hidráulica correspondientes a los elementos del tanque físico, según el mapa de la figura siguiente:

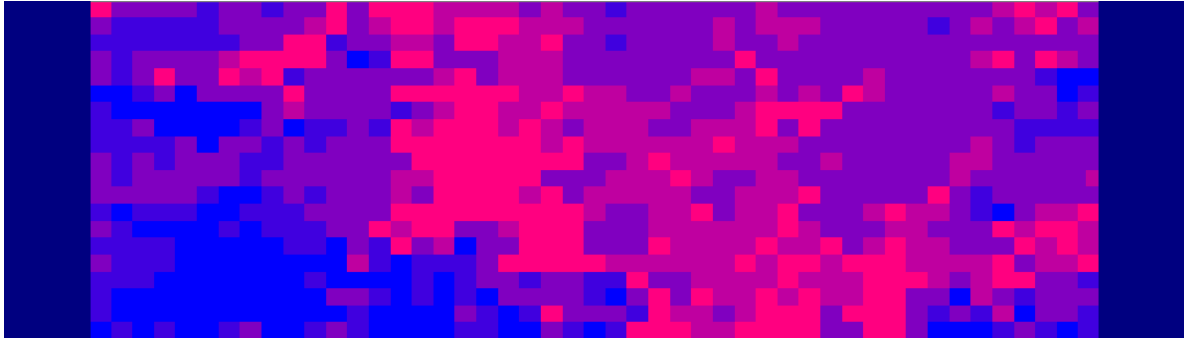


Figura 3.16 – Mapa de conductividades del modelo numérico (las zonas de mayor conductividad en rojo y las de menor conductividad en azul)

Como se ha explicado, cada uno de los elementos diferenciados en el modelo físico queda reproducido por varias celdas del modelo numérico. En concreto, por un conjunto de 3 celdas de longitud, 2 celdas de altura y 5 celdas de espesor.

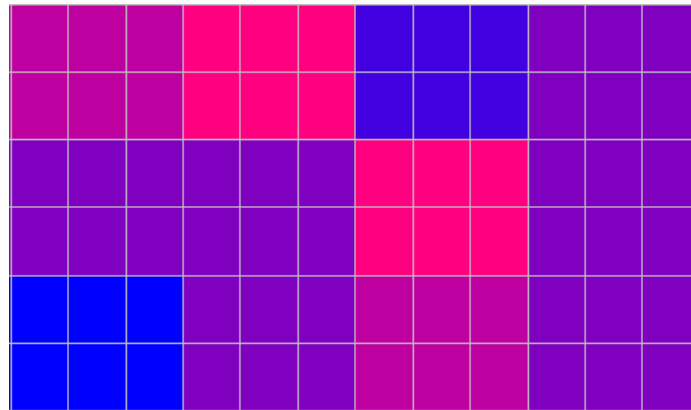


Figura 3.17 – Discretización de los elementos del modelo físico en conjuntos de 3 por 2 por 5 celdas (en profundidad)

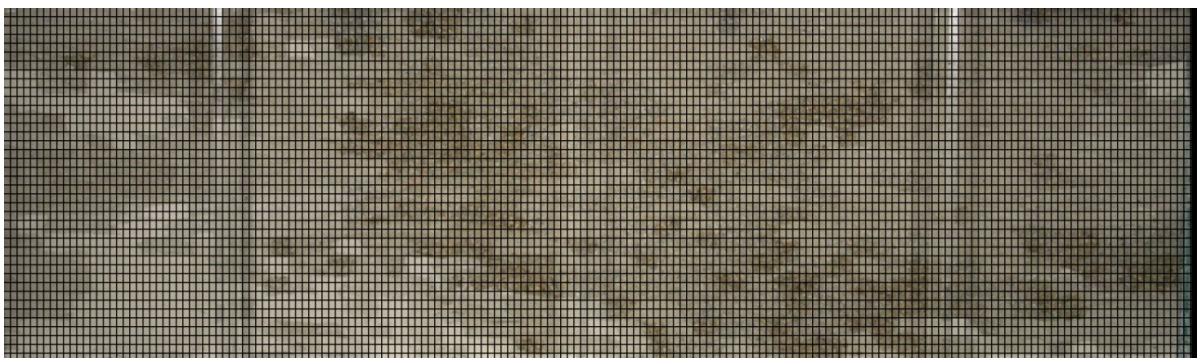


Figura 3.18 – Imagen en la que se aprecia la discretización del modelo numérico superpuesta a una fotografía del medio real.

3.6.3 Calibración del modelo numérico y estimación del campo de velocidades del flujo

Para calibrar las conductividades hidráulicas del modelo frente a las alturas piezométricas medidas se utilizó el software MODFLOW y el código asociado PEST en el entorno PMWIN. MODFLOW es modelador de flujo por diferencias finitas que resuelve, mediante interacciones, la ecuación de flujo de agua subterránea. Se trata de un software público de modelación numérica de flujo saturado desarrollado por el U.S. Geological Survey en Fortran. La primera versión de MODFLOW fue publicada en 1988 y es conocida como MODFLOW-88. Las aplicaciones de MODFLOW-88 se basan en describir y predecir el comportamiento de sistemas acuíferos, y su uso es muy habitual debido a la posibilidad de utilizar códigos añadidos o la facilidad de implementar códigos nuevos, tales como aplicaciones de estimación de parámetros o modelos de transporte de solutos. MODFLOW-88 y sus versiones posteriores, MODFLOW-96, MODFLOW-2000 y MODFLOW-2005 se diseñaron para simular el flujo subterráneo en condiciones saturadas y en tres dimensiones. Puesto que su única capacidad era la de resolver la ecuación de flujo subterráneo, se han desarrollado varios códigos específicos por distintos investigadores, así como aplicaciones gráficas que permiten una utilización más intuitiva y sencilla.

Entre estos códigos específicos, se utilizó el código PEST para calibrar el valor de la conductividad hidráulica de los elementos del tanque. Este código ha sido desarrollado por la empresa Watermark Computing (Doherty J. y Brebber, L. 1994; Doherty, 2000) a fin de ayudar en la interpretación de datos de campo y en la estimación de parámetros. Si se dispone de medidas de campo o laboratorio, PEST ajusta los parámetros del modelo de forma que las diferencias entre los resultados generados por el modelo y las medidas de que se dispone sean mínimas. Para conseguirlo, PEST toma el control del software MODFLOW y lo ejecuta tantas veces como sea necesario hasta encontrar el conjunto óptimo de valores para los parámetros.

Por tanto, en el modelo numérico generado con MODFLOW se introdujeron las observaciones de alturas reales medidas en el tanque de experimentación con los sensores de presión, así como el valor del caudal de agua observado. Se dispuso de 36 observaciones de alturas distribuidas por todo el modelo, a las que se atribuyó un nivel de confianza del 0.95. Se hizo funcionar el software y se enfrentaron los resultados de alturas piezométricas del modelo a los datos medidos en el tanque. La correlación queda mostrada en la siguiente figura:

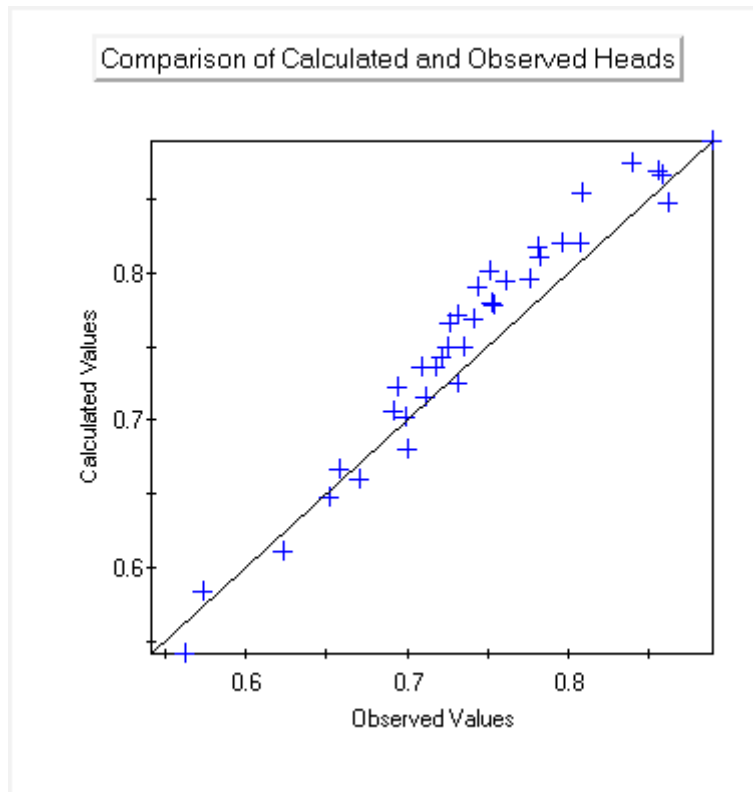


Figura 3.19 – Correlación entre los valores calculados (eje vertical) y los medidos (eje horizontal)

La desviación media cuadrática entre los valores medidos y los resultados del modelo numérico sin calibrar fueron de $R^2 = 0.7568$. Para mejorar la correlación entre estas series de valores, se parametrizó el valor de la conductividad hidráulica del modelo en grupos de 3 celdas de longitud por 4 celdas de altura por 5 celdas de espesor (es decir, un parámetro por cada dos elementos del modelo físico). De ese modo se dispuso de 470 parámetros diferentes para calibrar el valor de la conductividad horizontal. En la figura siguiente queda reflejada la situación geométrica de estos parámetros:

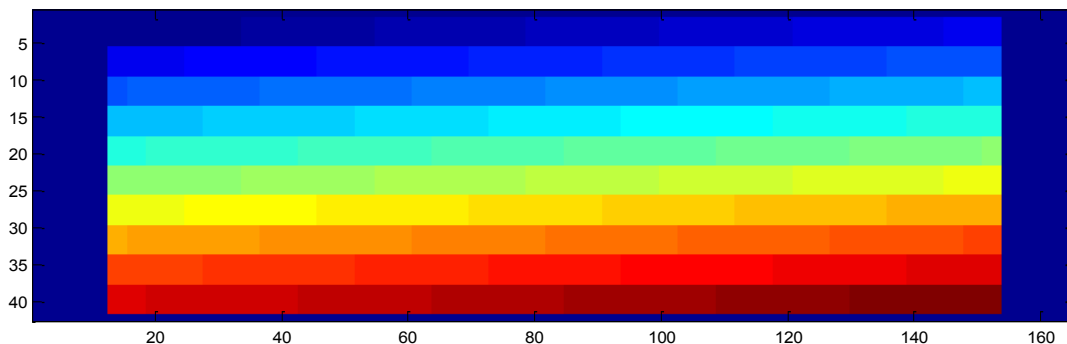


Figura 3.20 – Parametrización del modelo numérico

Se realizó la calibración del valor de la conductividad horizontal utilizando el código PEST. El resultado muestra ésta un valor de los parámetros muy similar a los valores originales de conductividad hidráulica. Realizada una simulación con estos nuevos valores calibrados, se observó un ajuste mucho mayor, con una correlación de $R^2 = 0,9873$.

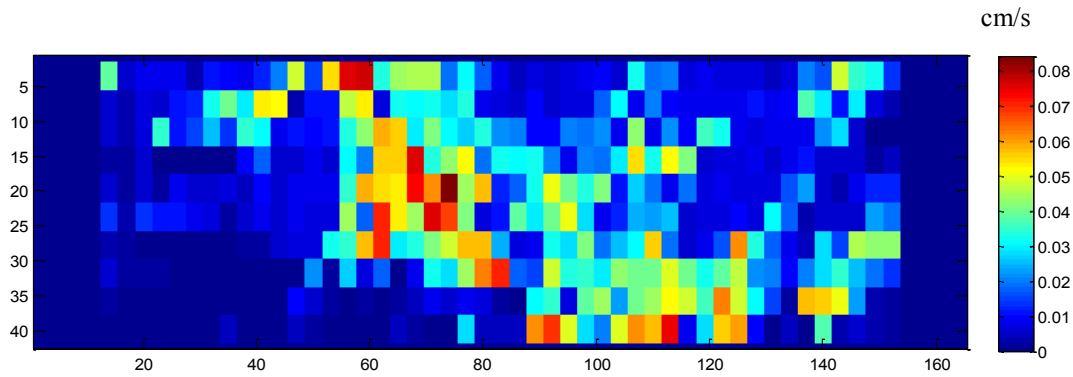


Figura 3.21 Valor calibrado de la conductividad hidráulica (en cm/s)

Mediante esta calibración, la correlación entre los valores calculados y los observados mejoró visiblemente.

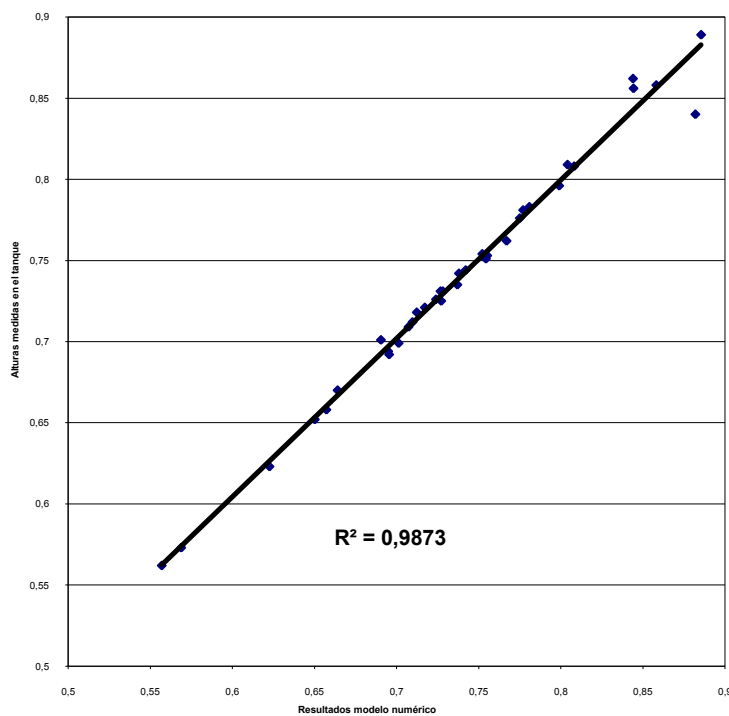


Figura 3.22 Correlación entre alturas observadas y medidas en medio calibrado

Los resultados del modelo numérico, además, nos proporcionaron el valor de las alturas piezométricas en cada una de las celdas del modelo.



Figura 3.23 Mapa de alturas piezométricas del modelo numérico (en cm)

Estas alturas piezométricas nos permiten el cálculo del campo de velocidades locales en el medio. Para ello calculamos el valor de los flujos horizontal y vertical en cada elemento y, puesto que conocemos el área de contacto entre celdas y la porosidad efectiva de éstas, podemos obtener el valor de la velocidad de flujo.

Para el cálculo de las alturas piezométricas, MODFLOW-88 utiliza la media geométrica de los valores de conductividad horizontal o vertical de las dos celdas entre las que se calcula la diferencia de alturas. Es decir, si se calcula el flujo horizontal entre la celda i,j y la celda $i,j+1$, MODFLOW lo calculará utilizando:

$$Q_{i,j}^h = \left(\sqrt{K_{i,j}^h \cdot K_{i,j+1}^h} \right) \cdot \frac{h_{i,j} - h_{i,j+1}}{\Delta x} \cdot A_{hor} \quad (3.4)$$

Donde $K_{i,j}^h$ y $K_{i,j+1}^h$ son la conductividad horizontal de las celdas i,j e $i,j+1$, respectivamente. Del mismo modo, para el cálculo del flujo en la dirección horizontal entre las celdas i,j e $i+1,j$:

$$Q_{i,j}^v = \left(\sqrt{K_{i,j}^v \cdot K_{i+1,j}^v} \right) \cdot \frac{h_{i,j} - h_{i+1,j}}{\Delta y} \cdot A_{ver} \quad (3.5)$$

Sin embargo, a partir de la versión MODFLOW-96, se permite al usuario escoger entre utilizar la media armónica (más realista en el caso de flujo en columna) o la media geométrica, más adecuada para flujo bidimensional y tridimensional.

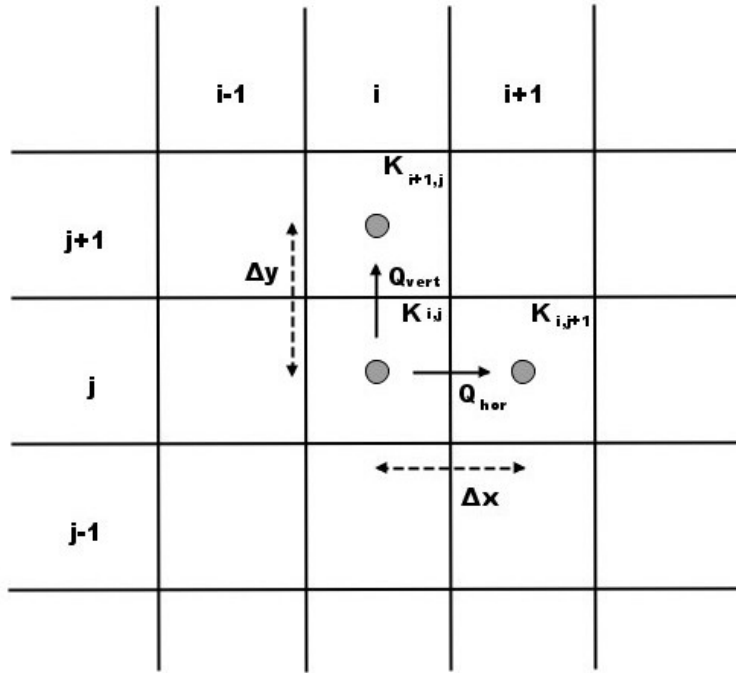


Figura 3.24 Esquema de diferencias finitas para el cálculo de las componentes vertical y horizontal del flujo entre celdas del modelo

Los valores del flujo horizontal y vertical calculados se observan en la siguiente figura:

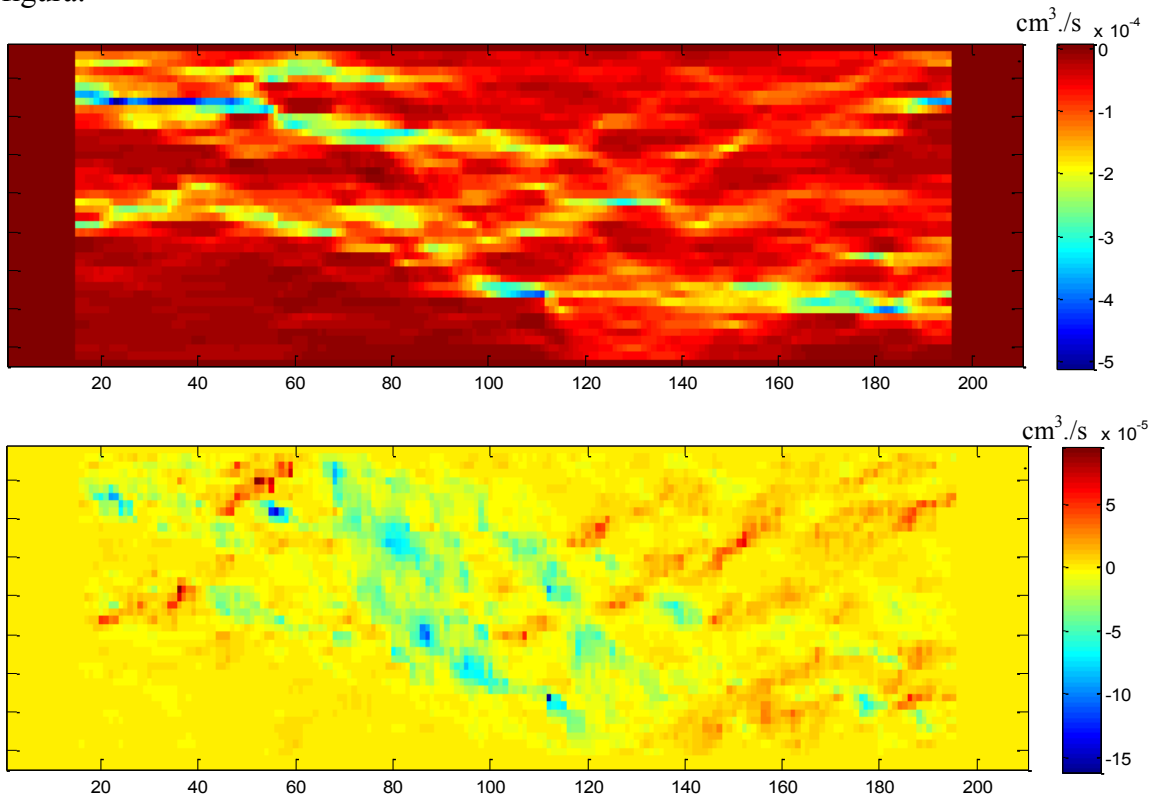


Figura 3.25 Mapa del flujo horizontal y vertical entre celdas

En los mapas puede observarse que, si bien el flujo horizontal discurre de derecha a izquierda (de ahí su valor negativo), el flujo vertical muestra tanto valores positivos (hacia la parte superior del tanque) como negativos (hacia la parte inferior del tanque). También puede comprobarse que el valor de los flujos verticales tiene a ser un orden de magnitud menor que los horizontales, debido a la menor diferencia de alturas en la dirección vertical y la menor conductividad hidráulica vertical.

Una vez obtenido el caudal de flujo horizontal y vertical podemos calcular el valor de las velocidades reales de flujo según:

$$v_{i,j}^{hor} = \frac{Q_{i,j}^h}{A_h \cdot \theta_{ef}} \quad (3.6)$$

$$v_{i,j}^{vert} = \frac{Q_{i,j}^v}{A_v \cdot \theta_{ef}} \quad (3.7)$$

Donde $Q_{i,j}^h$ y $Q_{i,j}^v$ son el flujo horizontal y vertical asociados al elemento i,j , A_h y A_v el valor del área de contacto entre las celdas contiguas en las que discurre el flujo y θ_{ef} la porosidad efectiva del elemento. De ese modo, el campo de velocidades de flujo será;

$$\vec{v}_{i,j} = v_{i,j}^{hor} \cdot \vec{i} + v_{i,j}^{vert} \cdot \vec{j} = \frac{Q_{i,j}^h}{A_h \cdot \theta_{ef}} \vec{i} + \frac{Q_{i,j}^v}{A_v \cdot \theta_{ef}} \vec{j} \quad (3.8)$$

Si calculamos el módulo de la velocidad de flujo se observa que éste tiene una velocidad media del orden de $7 \cdot 10^{-5}$ cm/s, lo que hace que el trazador inyectado tardaría de 170,000 segundos (20 días) en atravesar toda la longitud del tanque en el caso de que el material fuese homogéneo con una conductividad promedio. Sin embargo, se observa cómo existen vías preferentes de flujo en las que la velocidad es uno o dos órdenes de magnitud mayores. Estas vías canalizan el flujo, realizándose el transporte de solutos preferentemente a través de ellas. Son consecuencia de la heterogeneidad del medio, y la principal causa de la dependencia de dispersividad con la escala. Estas vías preferentes contribuyen a que la ecuación clásica de convección-dispersión no reproduzca con exactitud las características del transporte. Es por ello que identificar y describir la heterogeneidad del medio es fundamental a la hora de realizar modelos numéricos para predecir la evolución de un penacho de contaminante.

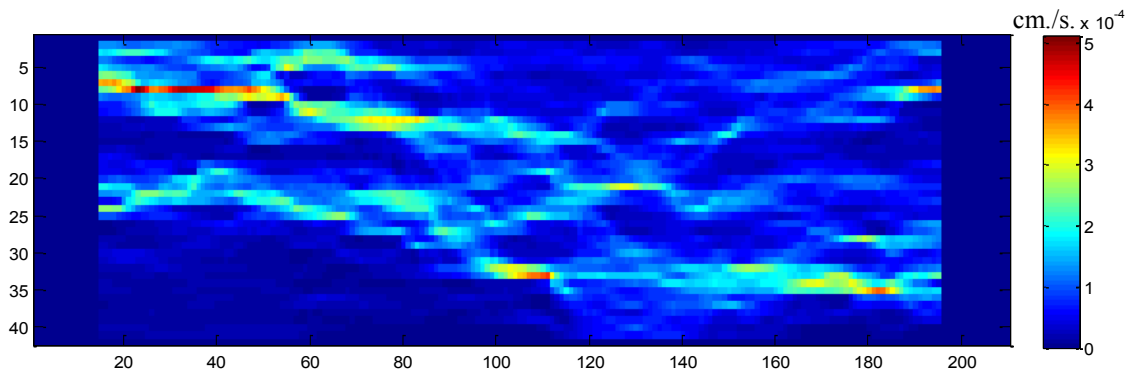


Figura 3.26 Mapa del módulo de la velocidad de flujo en el interior del tanque

Gracias a estos mapas podemos estimar las trayectorias de flujo que se dan en el interior del tanque obteniendo el camino más corto entre las distintas curvas equipotenciales.

Del mismo modo, pueden calcularse las trayectorias de partículas debidas únicamente al transporte convectivo. Para ello utilizamos el código asociado a MODFLOW conocido como PMPATH. Este código es un modelo de transporte convectivo que funciona de manera independiente de MODFLOW, y que utiliza los resultados de este último para, mediante un esquema de seguimiento de partículas semianalítico (Pollock 1988, 1989, 1994), calcular las trayectorias de las partículas introducidas por el usuario debidas a la componente convectiva del transporte. A través de un entorno gráfico, el usuario puede colocar un número casi infinito de partículas en la posición que desee y observar las trayectorias seguidas por éstas a lo largo del tiempo. Al introducir en el modelo una partícula por fila en la zona de entrada y realizar el seguimiento a lo largo del tiempo, se puede apreciar las trayectorias de flujo en el modelo numérico debidas a las velocidades de flujo calculadas anteriormente. Observando estas trayectorias, queda clara la existencia de vías preferentes de flujo, en los que el transporte convectivo se concentra.

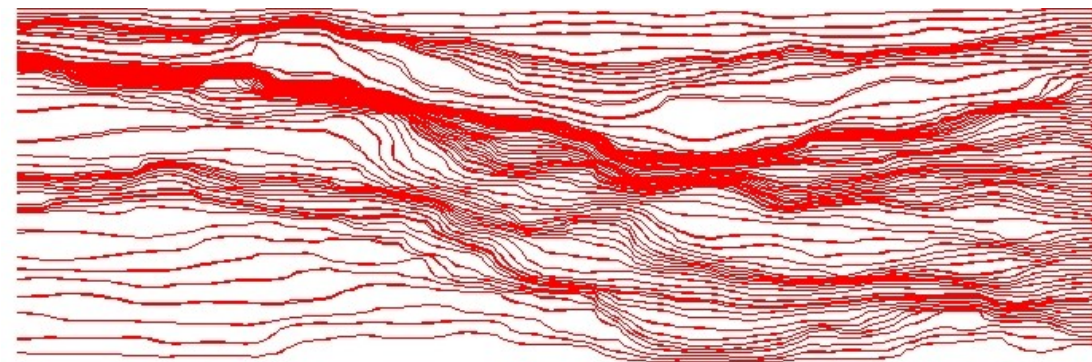


Figura 3.27 Trayectorias de flujo en el interior del tanque de experimentación

Hemos descrito, pues, la construcción del tanque de experimentación, así como los ensayos de flujo y transporte llevados a cabo en su interior. Del mismo modo, hemos descrito los sistemas que nos permiten conocer con un buen grado de detalle la distribución de alturas piezométricas y las concentraciones en el interior del medio. También se ha descrito el modelo numérico realizado para representar los experimentos realizados y cuyos resultados han generado los datos de velocidad local y trayectorias de flujo. Todo lo expuesto aquí permitirá obtener los valores de las dispersividades locales según el método expuesto en el próximo capítulo.

4. Determinación de la dispersividad local instantánea

4.1 El parámetro dispersividad en la ecuación del transporte

Desde el punto de vista cuantitativo, pocos parámetros hidrogeológicos son más complejos de obtener que la dispersividad. La dispersividad longitudinal puede estimarse en el laboratorio haciendo pasar un trazador no reactivo a través de muestras cilíndricas tomadas in situ en el campo, en experimentos unidimensionales. Estos ensayos producen una curva de llegada, sobre la que se determina el valor de la dispersividad que mejor se ajusta a ella. Los valores de dispersividad obtenidos en laboratorio de este modo varían en un rango de 0,01 a 2 cm, según un estudio realizado con 2500 muestras por Klotz y Moser (1974). Sin embargo, los valores de dispersividad calculados a partir de curvas de llegada obtenidas en ensayos en campo varían en el rango de 100 m. a 1000 m. (Pickens y Grisak, 1981). Es más, los valores obtenidos en los ensayos de campo muestran una dependencia de la escala. Es decir, el valor de la dispersividad obtenida en la misma formación depende de la distancia que separa el punto de inyección del punto de medida del ensayo, así como del volumen de solución utilizado como muestra para determinar la concentración. Esto ha sido el origen de un enorme número de estudios destinados a determinar el mejor método de obtención de la dispersividad y cómo reconciliar esta discrepancia entre los valores obtenidos en campo y en laboratorio.

En la teoría clásica que explica el movimiento de solutos en el agua subterránea se definen dos mecanismos fundamentales de este movimiento. El primero de ellos, denominado convección, se refiere al movimiento que el soluto experimentaría si lo hiciera exclusivamente de forma conjunta con el fluido, es decir, con la dirección y velocidad media de éste en cada punto. El otro mecanismo, denominado dispersión, se refiere a la mezcla y desviación de las moléculas de soluto debidas por un parte a la difusión molecular y, por otra, a las variaciones locales de la velocidad media (dispersión mecánica) que hacen que las moléculas de soluto se aparten de la trayectoria definida por la velocidad media o componente convectiva del transporte. Existe una amplia bibliografía que desde hace décadas presenta las formulaciones teóricas para describir matemáticamente esta componente de dispersión mecánica. En general, se asume que la dispersión mecánica es proporcional al gradiente de concentración, de forma similar a la ley de difusión molecular de Fick.

Se tienen así las siguientes componentes del flujo másico:

- Flujo másico convectivo, $\mathbf{J}_{conv} = \theta \mathbf{v}c$, donde θ es la porosidad del medio y \mathbf{v} la velocidad $\mathbf{v} = \mathbf{q}/\theta = -(1/\theta) \mathbf{K}\nabla h$
- Flujo másico debido a la difusión molecular, $\mathbf{J}_{dif} = -\theta \mathbf{D}^{dif} \nabla c$, donde \mathbf{D}^{dif} depende del coeficiente de difusión molecular y se formula como magnitud tensorial para tener en cuenta la posible anisotropía del medio, y
- Flujo másico debido a la dispersión mecánica, $\mathbf{J}_{disp} = -\theta \mathbf{D}^{disp} \nabla c$ donde \mathbf{D}^{disp} es el tensor de dispersión mecánica.

Las expresiones anteriores permiten formular el flujo másico total como,

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_{conv} + \mathbf{J}_{dif} + \mathbf{J}_{disp} = \theta \mathbf{v}c - \theta \mathbf{D}^{dif} \nabla c - \theta \mathbf{D}^{disp} \nabla c = \theta \mathbf{v}c - \theta \mathbf{D} \nabla c$$

siendo \mathbf{D} el llamado tensor de dispersión.

Aplicando el principio de conservación de masa en un volumen diferencial se obtiene la ecuación del transporte (Advection-Dispersion Equation o ADE) utilizada habitualmente para simular el movimiento de solutos en aguas subterráneas. En los casos en que no se considera generación o desaparición de soluto en el medio, esta ecuación se presenta como:

$$-\nabla(\mathbf{v} \cdot c) + \nabla(\mathbf{D} \cdot \nabla c) = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (4.1)$$

donde t representa la variable tiempo.

La definición de la dispersión mecánica se expresa para un flujo bidimensional como,

$$\mathbf{J}_D = -\nabla(\mathbf{D} \nabla c) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial c}{\partial x} \\ \frac{\partial c}{\partial y} \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

Donde \mathbf{J}_D es el flujo másico debido a la dispersión, \mathbf{D} es el tensor de dispersión y c la concentración de soluto. Este tensor de dispersión representa un tensor de cuasidifusión que describe la evolución del soluto debido a la dispersión mecánica y la difusión molecular. Tiene, como componentes principales en la dirección de la velocidad local:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_L & 0 \\ 0 & D_T \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Cada una de las componentes de este tensor se puede desarrollar como:

$$D_L = \alpha_L \cdot |\mathbf{v}| + D_m \quad (4.4)$$

$$D_T = \alpha_T \cdot |\mathbf{v}| + D_m \quad (4.5)$$

Los parámetros α_L y α_T se denominan “dispersividad longitudinal” y “dispersividad transversal”, respectivamente. De forma implícita, se asume por tanto que existen dos mecanismos de dispersión. Uno, representado por D_m , sería el correspondiente a la difusión molecular. El otro, representado por $\alpha_L|\mathbf{v}|$ y $\alpha_T|\mathbf{v}|$, sería la dispersión mecánica. En realidad, sólo la difusión molecular es un proceso fundamental. El concepto de dispersión mecánica se utiliza para describir el efecto de dilución causado por las variaciones del flujo local frente al flujo promedio representado por la velocidad de Darcy.

En un problema tridimensional las componentes del flujo másico debido a la dispersión mecánica se expresan como,

$$\text{donde,} \quad \begin{Bmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{Bmatrix} = -\theta \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial C}{\partial x} \\ \frac{\partial C}{\partial y} \\ \frac{\partial C}{\partial z} \end{Bmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_L \frac{v_x^2}{|\mathbf{v}|} + \alpha_{T1} \frac{v_y^2}{|\mathbf{v}|} + \alpha_{T2} \frac{v_z^2}{|\mathbf{v}|} & (\alpha_L - \alpha_{T1}) \frac{v_x v_y}{|\mathbf{v}|} & (\alpha_L - \alpha_{T2}) \frac{v_x v_z}{|\mathbf{v}|} \\ (\alpha_L - \alpha_{T1}) \frac{v_x v_y}{|\mathbf{v}|} & \alpha_L \frac{v_y^2}{|\mathbf{v}|} + \alpha_{T1} \frac{v_x^2}{|\mathbf{v}|} + \alpha_{T1} \frac{v_z^2}{|\mathbf{v}|} & (\alpha_L - \alpha_{T2}) \frac{v_y v_z}{|\mathbf{v}|} \\ (\alpha_L - \alpha_{T2}) \frac{v_x v_z}{|\mathbf{v}|} & (\alpha_L - \alpha_{T2}) \frac{v_y v_z}{|\mathbf{v}|} & \alpha_L \frac{v_z^2}{|\mathbf{v}|} + \alpha_{T2} \frac{v_x^2}{|\mathbf{v}|} + \alpha_{T2} \frac{v_y^2}{|\mathbf{v}|} \end{pmatrix}$$

siendo v_x , v_y , y v_z las componentes de \mathbf{v} en cada punto, α_L la dispersividad longitudinal y, α_{T1} y α_{T2} las dispersividades en dos direcciones perpendiculares a \mathbf{v} . Para completar las componentes del tensor de dispersión bastaría sumar en la diagonal de la expresión anterior los valores de los coeficientes de difusión molecular. Si el medio fuera anisotrópico se sumarían las correspondientes componentes del tensor de difusión referidas al sistema de referencia común.

El tensor de dispersión mecánica adopta la expresión siguiente en el caso de una única dispersividad transversal α_T ,

$$\begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_T |\mathbf{v}| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x^2}{|\mathbf{v}|} & (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{|\mathbf{v}|} & (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_z}{|\mathbf{v}|} \\ (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{|\mathbf{v}|} & \alpha_T |\mathbf{v}| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_y^2}{|\mathbf{v}|} & (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_y v_z}{|\mathbf{v}|} \\ (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_z}{|\mathbf{v}|} & (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_y v_z}{|\mathbf{v}|} & \alpha_T |\mathbf{v}| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_z^2}{|\mathbf{v}|} \end{pmatrix}$$

Que queda reducida a la siguiente en el caso bidimensional,

$$\begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_T |\mathbf{v}| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x^2}{|\mathbf{v}|} & (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{|\mathbf{v}|} \\ (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{|\mathbf{v}|} & \alpha_T |\mathbf{v}| + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_y^2}{|\mathbf{v}|} \end{pmatrix}$$

La ecuación del transporte puede resolverse analíticamente solo en casos muy simples con escasa aplicabilidad a problemas reales. En dicho caso las condiciones de contorno son generalmente de dominio infinito o semiinfinito, y se asumen campos de velocidad del fluido y de dispersividades totalmente homogéneos. Estas soluciones son útiles en la interpretación de algunos ensayos de laboratorio, en estimaciones para acotar problemas reales, o para la verificación de modelos matemáticos de transporte. Estos últimos suponen la implementación en un código de ordenador de un método numérico de resolución de la ecuación, junto a una determinada definición de las condiciones de contorno del problema, condiciones iniciales, campo de velocidades, acciones externas y distribución del campo de dispersividad. Los principales métodos usados son las diferencias finitas, elementos finitos, método de las características y los métodos de trayectorias aleatorias de partículas.

La dispersividad es un parámetro que diversos autores han tratado de relacionar con la geometría a escala microscópica del medio (Wheatcraft, S. y Tyler ,1988;) y puesto en función de un tensor de hasta quinto orden que representa la tortuosidad del medio. En la práctica es un parámetro de la ecuación del transporte cuyos valores se estiman durante el proceso de calibración del modelo a los datos de campo y al que generalmente se asignan valores muy poco variables espacialmente y constantes en el tiempo. Sin embargo, esto no es cierto en la realidad, sino que la dispersividad es un parámetro local cuya variabilidad es, al menos, tan marcada como la de la conductividad hidráulica. Este trabajo de investigación se fundamenta en la consideración de la variabilidad de este parámetro y tiene como objetivo caracterizar ésta.

4.2 Dispersividades dependientes de la escala soporte de estimación y del tiempo.

La dispersividad es un parámetro sobre cuya variación en función de la escala soporte de observación o medida ha sido abordada por diversos autores, tanto a la escala de laboratorio (véase por ejemplo Han et al., 1985 y Porro et al., 1993), y a escala de campo (entre otros por Gelhar et al., 1992). Para explicar esta dependencia de la escala sobre el dominio del transporte se ha recurrido a la teoría fractal (Wheatcraft and Tyler, 1988), a la ecuación del transporte expresada mediante derivadas fraccionales (Pachevsky et al., 2002), o al uso de métodos estocásticos (Gelhar and Axness, 1983; Dagan 1984; Schwarze et al., 2001).

Dada la naturaleza de la dispersividad se trata de un parámetro variable espacialmente, aunque hasta ahora los esfuerzos en su caracterización espacial son mucho menores que los hechos para reproducir la heterogeneidad de la conductividad hidráulica. No obstante, de igual forma que ocurre con este último parámetro al resolver la ecuación del flujo, en el caso del transporte hacemos uso de valores efectivos de la dispersividad. En la práctica, se han desarrollado diversas aproximaciones para aproximar la dependencia de la escala de la dispersividad en los modelos matemáticos. Así, por ejemplo, se tiene la aproximación de Pickens y Grisak (1981) haciendo que dependa del tiempo, o la de Yates (1990) o Logan (1996) haciéndola depender de la distancia recorrida por el soluto. Hoy en día hay evidencias claras de que dicha dependencia de la escala está ligada fundamentalmente a la variabilidad del campo de velocidades y de la propia dispersividad no captada por el procedimiento y escala de resolución aplicados en el modelo de transporte. Esto hace que la definición de este parámetro pueda estar ligada al método de resolución usado para resolver la ecuación del transporte y al tipo de información y procedimiento usados para estimar la dispersividad.

En este sentido Wang et al. (2006) presentan una revisión detallada de las posibles formas de especificar la dispersividad dependiente de la escala en un esquema numérico de resolución de la ecuación del transporte, y clarifican teóricamente estas definiciones y su relación, cuantificando como cada aproximación afecta a las curvas de llegada o distribuciones espaciales de soluto. Estos autores identifican cinco formas de expresar la dispersividad como dependiente de la escala que designan como: dispersividad instantánea (local time-dependent dispersivity), dispersividad media temporal (average time-dependent dispersivity), dispersividad aparente (apparent time-dependent dispersivity), dispersividad dependiente de la distancia (local distance-dependent dispersivity) y dispersividad aparente dependiente de la distancia (apparent distance-dependent dispersivity). Ninguna de las cinco aproximaciones definidas es local, en cuanto a definir dispersividades locales en el sentido espacial. Se diferencian básicamente en tener en cuenta la historia del desarrollo del penacho o su variación total

instantánea, y en el uso de curvas de llegada o en la sustitución de la variable tiempo por la distancia recorrida.

En lo que sigue, en esta sección del documento, se aborda el repaso de los dos primeros conceptos de dispersividad, y el cálculo de las dispersividades instantáneas. No obstante, de acuerdo con los objetivos de la investigación de esta tesis, se aborda el cálculo de las dispersividades locales instantáneas desarrollando un procedimiento numérico que permitirá tratar las sucesivas imágenes que muestran la evolución del penacho de trazador en diversos experimentos.

4.2.1 Dispersividad instantánea dependiente del tiempo $\alpha(t)$

Aunque asumir que el transporte de solutos en medios porosos es gaussiano o cuasi-fickiano ha sido criticado por algunos autores como Pachepsky et al (2002), la incorporación de dispersividades dependientes de la escala en la ecuación del transporte implica que la dispersión es fickiana o cuasi-gaussiana. El coeficiente de dispersión mecánica se considera, en tal caso, dependiente del tiempo y puede expresarse como:

$$D_m(t) = \frac{1}{2} \frac{d[\sigma_m(t)]^2}{dt} \quad (4.6)$$

Donde $[\sigma_m(t)]^2$ es la varianza de la distribución espacial de las moléculas de soluto en la totalidad del medio poroso considerado en el preciso instante t . Por tanto, se está integrando el comportamiento, o valores de la dispersividad, en todo el dominio espacial alcanzado por el penacho.

Cuando el transporte de soluto en el medio se da en condiciones estacionarias (es decir, que la velocidad media de flujo, v , es constante), de la ecuación $D_m = \alpha \cdot v$ se sigue, combinándola con la anterior, que,

$$\alpha(t) = \frac{1}{2v} \frac{d[\sigma_m(t)]^2}{dt} \quad (4.7)$$

Lo que significa que $\alpha(t)$ es un parámetro local en lo que respecta al tiempo. En otras palabras, la dispersividad tiene un valor diferente en cada instante temporal. En todo caso, obsérvese de nuevo que este parámetro sería el mismo en todas las posibles celdas de la discretización del dominio de flujo.

Supóngase que se tiene un dominio unidimensional y que ha sido discretizado en celdas, y que el tiempo lo ha sido en instantes temporales. Las concentraciones de soluto en cada celda se obtienen aplicando el algoritmo numérico para cada instante

temporal de forma sucesiva. Sin pérdida de generalidad, identifíquese cada celda con un índice i (ya sea en un esquema de diferencias finitas, elementos finitos o cualquier otro) y cada instante por n , de tal forma que c_i^n representa la concentración en la celda i e instante n . Así, debe especificarse la dispersividad en la celda (i,n) para cada paso temporal para poder calcular la concentración de soluto en un punto dado, perteneciente a la celda i -ésima. Según la forma en que se especifique esta dispersividad, ésta se integra de manera diferente en la resolución de la según el método numérico utilizado. La descripción numérica en este caso sería:

$$\frac{\partial C_i^n}{\partial t^n} = [\alpha(\bullet, n)v + D_0] \frac{\partial^2 C_i^n}{\partial x_i^2} - v \frac{\partial C_i^n}{\partial x_i} \quad (4.8)$$

Donde C_i^n representa la concentración de soluto en la celda i en el instante n . Es decir, la concentración en $x_i = i\Delta x_i$ y $t = n\Delta t$. Δx_i es la longitud de la celda discretizada en cada una de las direcciones consideradas y Δt la longitud de tiempo discretizado. $\alpha(\bullet, n)$ hace referencia a que la dispersividad utilizada es constante para todas las celdas del dominio en un instante determinado pero varía con el tiempo para cada instante n . Puede generarse una curva de llegada en cualquier punto comenzando por la concentración inicial en $t = 0$ y calculando el resto de valores de la curva de manera secuencial para la celda i utilizando en cada instante.

4.2.2 Dispersividad media temporal $\alpha'(t)$

Para un instante t dado, el valor de $[\sigma_m(t)]^2$ viene dado por (Bear, 1988)

$$[\sigma_m(t)]^2 = 2 \cdot \alpha'(t) \cdot v \cdot t \quad (4.9)$$

Donde $\alpha'(t)$ representa el parámetro de dispersividad efectiva utilizado para cuantificar la varianza espacial de la distribución de soluto en el medio poroso en el instante t . Esta ecuación proviene de la ecuación del transporte, que supone que la distribución de soluto en el medio en un determinado instante sigue una distribución normal con un desplazamiento medio de $v \cdot t$ y una desviación estándar de σ_m . Puesto que así considerada, la dispersividad no es constante en el tiempo, la relación entre la varianza espacial y la dispersividad será igualmente dependiente del tiempo. Resulta sencillo estimar el parámetro de dispersividad media dependiente del tiempo a partir de observaciones de la distribución espacial del soluto en un instante determinado (Lapidus y Amundson, 1952).

Integrando la ecuación (4.6) y combinándola con (4.9), se observa que:

$$\alpha'(t) = \frac{\int_0^t \alpha(\tau) d\tau}{t} \quad (4.10)$$

El resultado es que $\alpha'(t)$ representa un parámetro efectivo consistente en el valor promedio de todos los valores de dispersividad instantánea desde el instante cero al instante t, y que se aplica por igual a todas las celdas del dominio espacial. De ese modo, el esquema numérico correspondiente pasa a ser:

$$\frac{\partial C_i^n}{\partial t^n} = \left[\alpha'(\bullet, t = 0 \rightarrow n) \cdot v + D_0 \right] \frac{\partial^2 C_i^n}{\partial x_i^2} - v \frac{\partial C_i^n}{\partial x_i} \quad (4.11)$$

Puesto que $\alpha'(t)$ representa el efecto integrado medio de la dispersividad local dependiente del tiempo desde el instante cero al instante t, no se puede considerar ya un parámetro local en el tiempo, puesto que su valor no es igual al de $\alpha(t)$. Sin embargo, sí que es dependiente del tiempo puesto que su valor cambia entre los instantes n y n+1 al intervenir nuevos valores de $\alpha(t)$ en el cálculo del promedio.

De esa forma, para generar el valor de la concentración de soluto en un punto e instante $C(i,t)$, todos los valores de dispersividad en las celdas del dominio deberían ser el de $\alpha'(t)$ calculada desde $t = 0$. Esta forma de especificar la dispersividad en el modelo numérico se conoce como dispersividad efectiva dependiente del tiempo, simbolizada por $\alpha'(\bullet, t = 0 \rightarrow n)$. Si se desea calcular la concentración en otro instante t' , $C(i,t')$, todos los valores de dispersividad tendrían que ser reevaluados como $\alpha'(t')$ y el cálculo reiniciado desde $t=0$ hasta $t=t'$.

Por eso, la utilización de la dispersividad efectiva dependiente del tiempo hace que el esquema numérico sea poco eficiente desde el punto de vista computacional debido a que hay que calcular un nuevo valor de la dispersividad efectiva dependiente del tiempo para obtener la concentración en cada nuevo instante.

4.3 Estimación de las dispersividades en un dominio tridimensional

En lo que sigue se definen y desarrollan los procedimientos de cálculo que van a utilizarse en posteriores capítulos para el proceso de los resultados de experimentos de laboratorio.

4.3.1 Determinación del valor de la dispersividad efectiva media temporal $\alpha'(t)$

En las secciones anteriores se han identificado diversas formas de cómo tratar la dispersividad a fin de incluirla en la ecuación de convección-dispersión y calcular, de ese modo, las concentraciones a lo largo del tiempo en una celda i . Sin embargo, no se ha tratado cómo se determinan estos valores en la práctica.

Los momentos espaciales proporcionan información valiosa sobre los parámetros de la ecuación de convección-dispersión. La importancia de estos momentos espaciales se basa en proporcionar medidas globales del comportamiento del penacho, ofreciendo una estimación global del comportamiento de los parámetros a partir de las medidas obtenidas de las concentraciones de un penacho real. A fin de calcular la masa, la velocidad y la dispersividad del penacho de soluto se utilizan los momentos espaciales de orden cero, primer y segundo orden de la distribución de soluto. La relación entre estos parámetros y los momentos espaciales pueden obtenerse a partir de las teorías de Aris (1956) sobre la dispersión de solutos

El momento espacial de orden cero de un penacho situado en un dominio Ω en el instante t , se define como:

$$\mu^{(0)}(t) = \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}) \cdot C(\mathbf{x}, t) \cdot d\mathbf{x} \quad (4.12)$$

Donde $C(\mathbf{x}, t)$ es la concentración en el punto \mathbf{x} en el instante t , y ϕ la porosidad efectiva en el punto \mathbf{x} . En otras palabras, el momento espacial de orden cero es el sumatorio de toda la masa de soluto en el dominio Ω en el instante t . Si no existen ni fuentes ni sumideros en el dominio, este valor se mantiene constante por la ley de conservación de masa.

El momento espacial de orden 1, está definido por:

$$\mu_j^{(1)}(t) = \frac{1}{\mu^{(0)}(t)} \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}) \cdot x_j \cdot C(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad j = 1, \dots, m \quad (4.13)$$

Donde cada x_j , con $j = 1, \dots, m$ son la coordenada j -ésima del punto \mathbf{x} . El momento espacial de orden 1 determina, por tanto, el valor de las coordenadas en el instante t del centro de masas del penacho en el dominio Ω . Freyberg (1986) demuestra, mediante la integración por partes, que la velocidad es igual a la derivada temporal del primer momento espacial. Por tanto, determinar la evolución del momento de primer orden en

El momento espacial no central de segundo orden está definido por:

$$\mu_{ij}^{(2)}(t) = \frac{1}{\mu^{(0)}(t)} \int_{\Omega} \phi(\mathbf{x}) \cdot x_i \cdot x_j \cdot C(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad i, j = 1, \dots, m \quad (4.14)$$

El momento central de segundo orden queda definido por:

$$S_{ij}(t) = \mu_{ij}^{(2)}(t) - \mu_i^{(1)}(t) \cdot \mu_j^{(1)}(t) \quad i, j = 1, \dots, m \quad (4.15)$$

Fischer y al. (1979) demuestran que la mitad del aumento en el momento de segundo orden con respecto al tiempo es igual al coeficiente de dispersión.

De modo que este momento central de segundo orden define un tensor que mide la distribución de masa del soluto alrededor del centro de masas del penacho. Las componentes de este tensor definido por el momento central de segundo orden, \mathbf{S} , se relacionan con el tensor de dispersión \mathbf{D} de la siguiente manera:

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \frac{dS_{ij}}{dt} \quad (4.16)$$

De esa forma se obtiene el valor de α_L y α_T al diagonalizar esta matriz \mathbf{D} según los ejes de la velocidad media \mathbf{v} .

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_L |\mathbf{v}| + D_m & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_T |\mathbf{v}| + D_m & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_T |\mathbf{v}| + D_m \end{bmatrix} \quad (4.17)$$

4.3.2 Determinación de las dispersividades efectivas locales instantáneas $\alpha(\mathbf{x},t)$

Los valores de dispersividad hasta ahora tratados son en realidad valores efectivos referidos a todo el volumen del dominio que ocupa el penacho en un instante t , pero no proporcionan información sobre la variación local de α_L o α_T en cada punto \mathbf{x} . Es decir, nos proporciona el efecto conjunto de las dispersividades locales de todos los puntos en que se encuentra el penacho. En general el esfuerzo de diversos investigadores se ha centrado en este tipo de estimaciones dado que muy difícilmente puede llegar a tenerse información tan exhaustiva con la que se pueda plantear un cálculo local. Sin embargo, los experimentos y mediciones descritos en este documento permiten abordar un problema hasta ahora obviado.

Se ha desarrollado una aproximación numérica, a partir de la ecuación del transporte, basada en esquemas de diferencias finitas, para estimar valores locales espaciales de la dispersividad instantánea. Se trata de alguna forma de la resolución del problema inverso para la determinación de la dispersividad, y es un problema cuya solución no es única, además de los problemas de estabilidad que puede conllevar. No obstante, la sobreabundancia de datos de concentración, ha permitido una aproximación para la estimación del parámetro basada en datos próximos locales. Así, en cualquier punto del dominio que sea atravesado por el penacho de soluto, puede obtenerse el valor de la dispersividad en los sucesivos instantes temporales. Puede afirmarse, a priori, que al formularse el método sobre una las celdas discretización, los valores locales de la dispersividad representarán valores efectivos de las celdas de dicha discretización. Por otra parte, no se presupone que el valor de la dispersividad en cada una de las celdas haya de ser constante. En cualquier caso, el conjunto de valores locales instantáneos $\alpha(\mathbf{x}_i,t)$ explicaría las medias temporales $\alpha'(t)$ y debería ser capaz de reproducir de una manera más ajustada la evolución observada de los penachos en diversos experimentos.

Para el análisis numérico se parte de la ecuación de convección-dispersión expresada para un flujo bidimensional,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \quad \frac{\partial}{\partial y} \right) \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \frac{\partial C}{\partial x} \\ \frac{\partial C}{\partial y} \end{bmatrix} - \left(\frac{\partial}{\partial x} \quad \frac{\partial}{\partial y} \right) \cdot \begin{pmatrix} v_x \cdot C \\ v_y \cdot C \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

Cada uno de los términos de la ecuación puede analizarse por separado, como haremos en las siguientes secciones.

4.3.2.1 Variación de masa en la celda i,j por unidad de tiempo

Dado que se dispone de datos de concentración del penacho en distintos instantes, a partir de estos es posible efectuar estimaciones de la variación de la concentración respecto del tiempo en cualquier instante. Así, el primer miembro de la ecuación anterior, para un instante t_k se puede aproximar como,

$$\left. \frac{dC}{dt} \right|_{t_k} \approx \frac{C^k - C^{k-1}}{\Delta t_{k-1}} \approx \frac{C^{k+1} - C^k}{\Delta t_k} \quad (4.19)$$

lo cual se obtendría restando “imágenes” del penacho en instantes de tiempo suficientemente próximos.

Si estimamos un factor ε de ponderación entre las diferencias hacia atrás y hacia adelante, podemos expresar la anterior igualdad como:

$$\left. \frac{dC}{dt} \right|_{t_k} \approx \varepsilon \frac{C^k - C^{k-1}}{\Delta t_{k-1}} + (1 - \varepsilon) \frac{C^{k+1} - C^k}{\Delta t_k} \quad (0 \leq \varepsilon \leq 1) \quad (4.20)$$

Esta variación de la concentración por unidad de tiempo es debida a la influencia conjunta de los mecanismos convectivo y dispersivo que se analizan a continuación. Mediante esta expresión, aplicada a las celdas de una malla que discretice el dominio de flujo, puede obtenerse en cada celda (i,j) la variación de la concentración por unidad de volumen respecto del tiempo en un instante dado.

4.3.2.2 Componente convectiva del transporte

Al desarrollar el término convectivo, su influencia en el balance de masa en una celda (i, j) puede estimarse a partir de,

$$-\left(\frac{\partial}{\partial x} \quad \frac{\partial}{\partial y} \right) \cdot \begin{pmatrix} v_x \cdot C \\ v_y \cdot C \end{pmatrix} = -\frac{\partial}{\partial x_l} (v_l \cdot C) \quad (4.21)$$

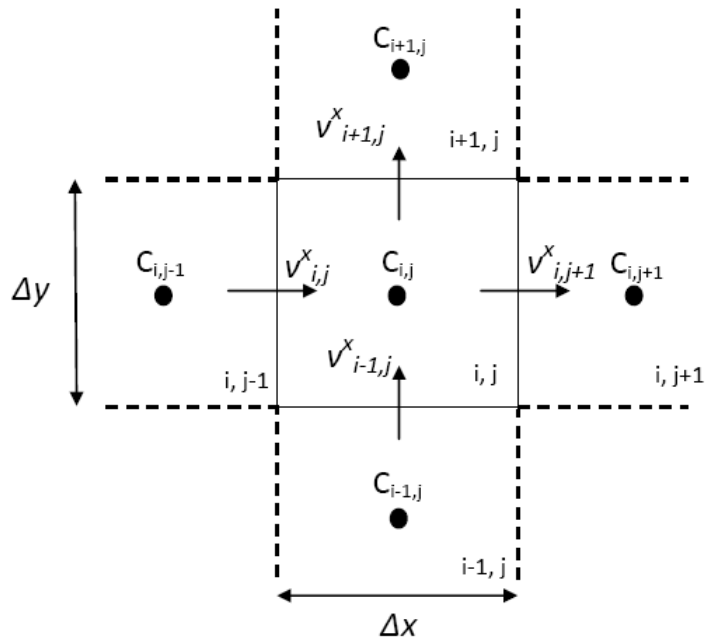


Figura 4.1 Esquema de diferencias finitas

Desarrollando este término por diferencias finitas para la celda (i,j), se tiene,

$$\begin{aligned}
 \text{Entradas} - \text{Salidas} = & \frac{\Delta y}{2}(C_{i,j-1} + C_{i,j}) \cdot v_{i,j}^x - \frac{\Delta y}{2}(C_{i,j} + C_{i,j+1}) \cdot v_{i,j+1}^x + \\
 & + \frac{\Delta x}{2}(C_{i+1,j} + C_{i,j}) \cdot v_{i+1,j}^y - \frac{\Delta x}{2}(C_{i,j} + C_{i-1,j}) \cdot v_{i-1,j}^y
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

expresión que resulta en la variación de masa en la celda (i,j) debida a las entradas y salidas de soluto desde otras celdas contiguas.

Disponiendo del valor de la velocidad en cada celda, es posible estimar la contribución de la componente convectiva en el transporte del soluto, para una celda i, j y para cada instante t.

4.3.2.3 Componente dispersiva del transporte

El balance de masa en cada instante de tiempo t_k en una celda (i, j) puede ser reducido, tal como hemos determinado, en tres componentes:

Componente 1:

Incremento de concentración obtenido a partir de la estimación de $\frac{\partial C}{\partial t}$. Se asume que esta aproximación de $\frac{\partial C}{\partial t}$ es el incremento de concentración de soluto en la celda por unidad de volumen $\Delta x \cdot \Delta y$ en una celda de espesor unidad:

$$\frac{\delta C_k}{\Delta x \cdot \Delta y} = \frac{dC}{dt} \Big|_{t_k} \approx \frac{1}{\Delta x \cdot \Delta y} \left[\varepsilon \cdot \frac{C^k - C^{k-1}}{\Delta t_{k-1}} + (1 - \varepsilon) \cdot \frac{C^{k+1} - C^k}{\Delta t_k} \right] \quad (0 \leq \varepsilon \leq 1) \quad (4.23)$$

Componente 2:

Balance neto de entradas menos salidas debidas a la componente convectiva del transporte. Es el término δA_k , ya definido en el punto anterior como la componente convectiva del transporte:

$$\begin{aligned} \delta A_k = & \frac{\Delta y}{2} (C_{i,j-1} + C_{i,j}) \cdot v_{i,j}^x - \frac{\Delta y}{2} (C_{i,j} + C_{i,j+1}) \cdot v_{i,j+1}^x + \\ & + \frac{\Delta x}{2} (C_{i+1,j} + C_{i,j}) \cdot v_{i+1,j}^y - \frac{\Delta x}{2} (C_{i,j} + C_{i,j+1}) \cdot v_{i,j}^y \end{aligned} \quad (4.24)$$

En la celda (i, j) para un instante t, la ecuación del transporte expresada en su forma clásica, es:

$$\frac{dC}{dt} = \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{dC}{dx_j} \right) \right] - \frac{d}{dx_i} (v_i \cdot C) \quad (4.25)$$

Reordenando términos, podemos obtener esa misma ecuación como:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{dC}{dx_j} \right) \right] = \frac{dC}{dt} - \left(-\frac{d}{dx_i} (v_i \cdot C) \right) \quad (4.26)$$

Identificando términos, obtenemos el valor de la componente dispersiva en función de las componentes del balance anteriormente calculadas. Se tiene así,

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{dC}{dx_j} \right) \right] \approx \frac{\delta C_k}{\Delta x \cdot \Delta y} - \delta A_k \quad (4.27)$$

Obsérvese que, en un instante dado t_k , esta ecuación es análoga a la ecuación diferencial en derivadas parciales de tipo elíptico que resuelve el flujo estacionario. Basta para ello identificar la concentración con la altura piezométrica, el tensor de dispersión con el de conductividad hidráulica y el término independiente con las acciones externas en la ecuación del flujo,

$$\begin{aligned} C &\rightarrow h \\ D_{ij} &\rightarrow k_{ij} \\ \frac{\delta C_k}{\Delta x \cdot \Delta y} - \delta A_k &\rightarrow Q \end{aligned}$$

Puesto que se conoce en cada instante el valor de la concentración ($C \rightarrow h$) y el del término independiente $\left(\frac{\delta C_k}{\Delta x \cdot \Delta y} - \delta A_k \rightarrow Q \right)$, y esto en cada celda, se trata de resolver el problema inverso para obtener los valores de D_{ij} . En principio, una vez evaluado el tensor \mathbf{D} en cada celda, podrían identificarse las dispersividades conocido el campo de velocidades.

Obsérvese que la analogía con la ecuación del flujo permite hacer uso de las herramientas y procedimientos de cálculo desarrollados para esta. En todo caso, dado que las componentes del tensor de dispersión son función de las velocidad del flujo y de las dispersividades longitudinal y transversal, en lo que sigue se simplifica el problema para la estimación directa de las dispersividades celda a celda.

4.3.3 Obtención de las dispersividades locales instantáneas en cada celda (i, j)

En el apartado anterior hemos desarrollado el cálculo del valor instantáneo de la componente dispersiva en cada punto o celda del dominio de estudio mediante un procedimiento de modelación inversa basado en la disponibilidad de información exhaustiva del campo de velocidades y de la distribución espacial y temporal de las concentraciones. En el presente apartado desarrollaremos numéricamente la expresión de la componente dispersiva a fin de estimar la dispersividades locales instantáneas efectivas en la celda.

Se tiene que en cada celda la componente dispersiva es,

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \right] \approx \frac{\delta C_k}{\Delta x \cdot \Delta y} - \delta A_k$$

Podemos desarrollar numéricamente el primer término de la ecuación anterior. De ese modo:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_l} \left(D_{lm} \frac{\partial C}{\partial x_m} \right) \right]_{i,j} = \frac{\partial}{\partial x} (D_{xx} \cdot \partial_x C_{ij}) + \frac{\partial}{\partial y} (D_{yy} \cdot \partial_y C_{ij}) + \frac{\partial}{\partial x} (D_{xy} \cdot \partial_y C_{ij}) + \frac{\partial}{\partial y} (D_{yx} \cdot \partial_x C_{ij}) \quad (4.28)$$

donde para facilitar el desarrollo posterior se introduce la notación $\partial_x C_{ij} = \frac{\partial C_{ij}}{\partial x}$ y

$\partial_y C_{ij} = \frac{\partial C_{ij}}{\partial y}$; se entiende además que las componentes del tensor **D** están referidas al elemento discretizado (i, j).

Desarrollando términos separadamente, y recurriendo a un esquema de diferencias finitas centradas:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} (D_{xx} \cdot \partial_x C_{ij}) &\approx \frac{D_{xx}}{2\Delta x} [\partial_x C_{i,j+1} - \partial_x C_{i,j-1}] = \frac{D_{xx}}{2\Delta x} \left[\frac{C_{i,j+2} - C_{i,j}}{2\Delta x} - \frac{C_{i,j} - C_{i,j-2}}{2\Delta x} \right] = \\ &\frac{D_{xx}}{4\Delta x^2} [C_{i,j+2} + C_{i,j-2} - 2C_{i,j}] = a_{ij} \cdot D_{xx} \end{aligned} \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} (D_{yy} \cdot \partial_y C_{ij}) &\approx \frac{D_{yy}}{2\Delta y} [\partial_y C_{i-1,j} - \partial_y C_{i+1,j}] = \frac{D_{yy}}{2\Delta y} \left[\frac{C_{i-2,j} - C_{i,j}}{2\Delta y} - \frac{C_{i+2,j} - C_{i,j}}{2\Delta y} \right] = \\ &\frac{D_{yy}}{4\Delta y^2} [C_{i-2,j} + C_{i+2,j} - 2C_{i,j}] = b_{ij} \cdot D_{yy} \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} (D_{xy} \cdot \partial_y C_{ij}) &\approx \frac{D_{xy}}{2\Delta x} [\partial_y C_{i,j+1} - \partial_y C_{i,j-1}] = \frac{D_{xy}}{2\Delta x} \left[\frac{C_{i-1,j+1} - C_{i+1,j+1}}{2\Delta y} - \frac{C_{i-1,j-1} - C_{i+1,j-1}}{2\Delta y} \right] = \\ &\frac{D_{xy}}{4\Delta x \Delta y} [C_{i-1,j+1} + C_{i+1,j-1} - C_{i+1,j+1} - C_{i-1,j-1}] = c_{ij} \cdot D_{xy} \end{aligned} \quad (4.31)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (D_{yx} \cdot \partial_y C_{ij}) \approx \frac{D_{yx}}{2\Delta y} [\partial_x C_{i,j+1} - \partial_x C_{i,j-1}] = \frac{D_{yx}}{2\Delta y} \left[\frac{C_{i-1,j+1} - C_{i+1,j+1}}{2\Delta x} - \frac{C_{i-1,j-1} - C_{i+1,j-1}}{2\Delta x} \right] =$$

$$\frac{D_{yx}}{4\Delta y \Delta x} [C_{i-1,j+1} + C_{i+1,j-1} - C_{i+1,j+1} - C_{i-1,j-1}] = d_{ij} \cdot D_{yx} = c_{ij} \cdot D_{xy}$$

(4.32)

De ese modo, se tiene, con la notación introducida de a_{ij} , b_{ij} y c_{ij} , (directamente calculables a partir del mapa de concentraciones en cada instante) la siguiente expresión para cada celda (i, j),

$$\frac{\delta C_k}{\Delta x \cdot \Delta y} - \delta A_k = a_{ij} D_{xx} + b_{ij} D_{yy} + 2c_{ij} D_{xy} \quad (4.33)$$

Las dispersividades efectivas instantáneas de la celda (i, j), α_L y α_T , están referidas a los ejes de referencia definidos por la velocidad local instantánea, que no coinciden necesariamente con los ejes X e Y del sistema de referencia global para el dominio estudiado. Las expresiones que relacionan la forma diagonal del tensor de dispersión mecánica en ambos sistemas de referencia son,

$$D_{xx} = \alpha_L \cdot \frac{v^2}{|\vec{v}|} + \alpha_T \cdot \frac{v_y^2 \cdot |\vec{v}|}{(v_x^2 + v_y^2)}$$

$$D_{yy} = \alpha_L \cdot \frac{v^2}{|\vec{v}|} + \alpha_T \cdot \frac{v_x^2 \cdot |\vec{v}|}{(v_x^2 + v_y^2)} \quad (4.33)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = \alpha_L \cdot \frac{v_x \cdot v_y}{|\vec{v}|} - \alpha_T \cdot \frac{v_x \cdot v_y \cdot |\vec{v}|}{(v_x^2 + v_y^2)}$$

Expresiones que reducen las incógnitas a obtener en cada celda las dos dispersividades efectivas buscadas. Por otra parte, la dispersividad transversal tiene un valor próximo a un orden de magnitud menor a la dispersividad longitudinal lo que permite una nueva simplificación en el cálculo. Si asumimos que $\alpha_T = \varepsilon \alpha_L$, la ecuación que se ha obtenido para cada celda pasa a depender exclusivamente de α_L . Se tiene así, por tanto, una expresión para la estimación de las dispersividades longitudinales locales efectivas instantáneas a partir de un conocimiento exhaustivo del campo de velocidades y de los valores de concentración locales en cada instante t_k .

$$\begin{aligned} \frac{\delta C_k}{\Delta x \cdot \Delta y} - \delta A_k &= a_{ij} \cdot \alpha_L \left(\frac{v_x^2}{|\vec{v}|} + \varepsilon \frac{v_y^2 \cdot |\vec{v}|}{(v_x^2 + v_y^2)} \right) + b_{ij} \cdot \alpha_L \left(\frac{v_y^2}{|\vec{v}|} + \varepsilon \frac{v_x^2 \cdot |\vec{v}|}{(v_x^2 + v_y^2)} \right) \\ &+ 2 \cdot c_{ij} \cdot \alpha_L \left(\frac{v_x \cdot v_y}{|\vec{v}|} + \varepsilon \frac{v_x \cdot v_y \cdot |\vec{v}|}{(v_x^2 + v_y^2)} \right) \end{aligned} \quad (4.33)$$

Llamando a cada una de las expresiones entre paréntesis K_1 , K_2 y K_3 , respectivamente, el valor de la dispersividad local instantánea en cada celda (i, j) e instante k será:

$$\alpha_L(i, j, k) = \frac{\frac{\delta C_k}{\Delta x \cdot \Delta y} - \delta A_k}{a_{ij} \cdot K_1 + b_{ij} \cdot K_2 + 2 \cdot c_{ij} \cdot K_3} \quad (4.33)$$

Así, a partir de los mapas de concentración de soluto a lo largo del tiempo es posible, obtener estimaciones de mapas de dispersividades locales efectivas a lo largo del tiempo. Las posibilidades de análisis que aporta la disponibilidad de estos mapas son fundamentalmente la de la influencia del tiempo y del tamaño de celda, y la influencia de las propiedades hidrodinámicas conocidas del material de la celda sobre el valor de la dispersividad, entre otras.

5. Resultados y discusión

5.1 *Dispersividades medias efectivas*

5.1.1 Momentos centrales del penacho

En el capítulo anterior se explica cómo obtener los momentos centrales de orden cero, de orden uno y orden dos. Estos momentos centrales informan de características del penacho tales como su masa total, la velocidad y trayectoria de su centro de masas y de la dispersión que experimenta. Puesto que se dispone de un mapa detallado de las diferentes concentraciones a lo largo del tiempo, en este apartado se procede a realizar el cálculo de estos momentos espaciales. Para ello se calcula la evolución de estos momentos considerando un flujo bidimensional ($i = 1,2; j = 1,2$). Se dispone, además, de un mapa exhaustivo de las velocidades en el tanque, necesario para obtener los valores de la dispersividad media efectiva.

Para obtener el momento espacial de orden cero se multiplica el valor de la concentración de soluto obtenida para cada elemento del medio mediante el tratamiento de imagen digital, por el volumen y porosidad de ese elemento. Aunque durante la inyección se puso todo el cuidado posible en aplicar el trazador de forma uniforme en todo el espesor del tanque, es inevitable que en los instantes iniciales la concentración de soluto no sea igual en todo el espesor del tanque. Se trata de un fenómeno transitorio que desaparece conforme el penacho evoluciona y se aprecia en el hecho de que en los instantes iniciales, el resultado de la multiplicación anterior no corresponda con la masa total inyectada. Una vez la concentración es uniforme en la dirección perpendicular a la pared del tanque, la masa calculada permanece constante e igual a la masa total inyectada.

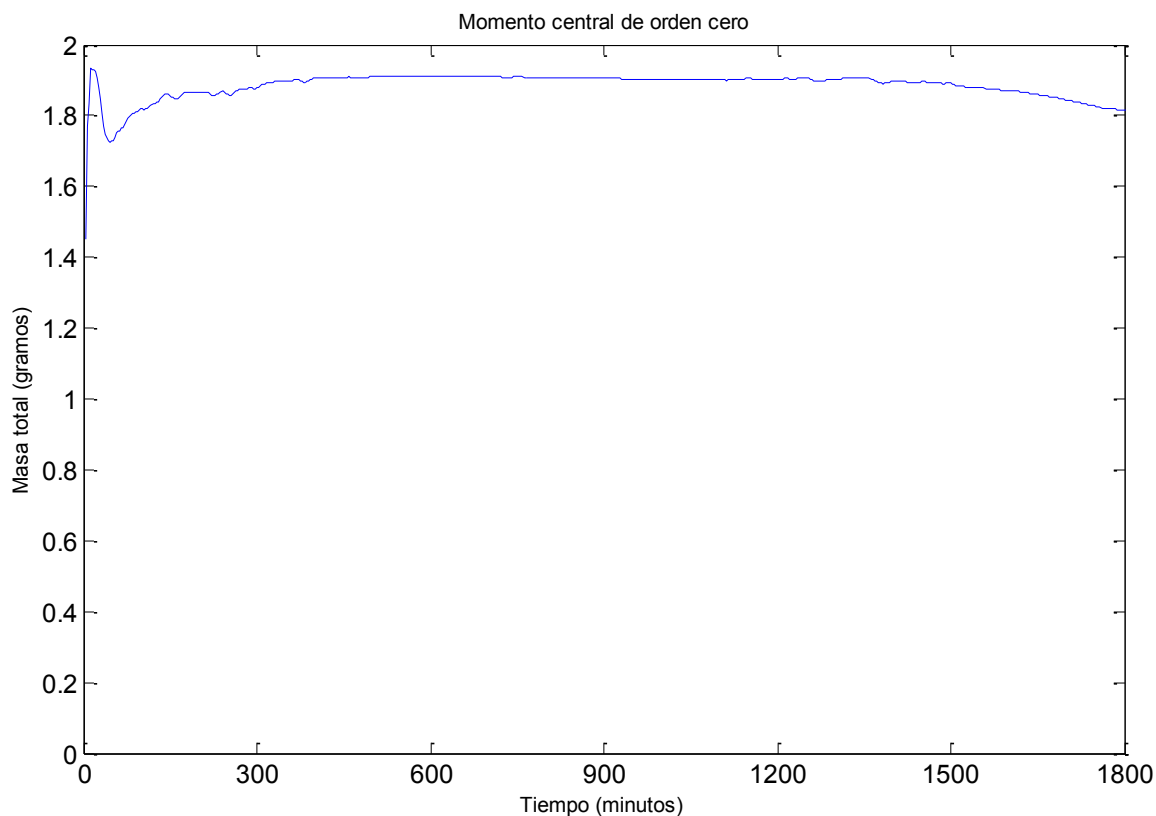


Figura 5.1 - Evolución temporal del momento de orden 0

En la Figura 5.1 se observa que se alcanza un valor estable correspondiente al valor de la masa total de soluto inyectada en el tanque. Conforme el penacho evoluciona, en algunos elementos del medio se da una concentración de soluto menor que la mínima detectable por medio del análisis de imagen digital. A esos elementos se les atribuye una concentración de soluto igual a cero. Por ello, al calcular la masa total presente, ésta parece disminuir con el tiempo.

Sin embargo, no es el valor de la masa total, sino la distribución espacial de esta masa en el interior del penacho lo que determina el valor de los momentos de primer y segundo orden. La evolución del momento de orden 1 corresponde a la trayectoria del centro de masas del penacho. Esta trayectoria queda definida por sus coordenadas x e y a lo largo del tiempo. Para ello se utiliza la ecuación del momento central de primer orden, que nos ofrece la trayectoria, en sus coordenadas X e Y , del recorrido del centro de masas del penacho.

En la figura 5.2 se observa que la trayectoria del centro de masas del penacho dista mucho de ser rectilínea en el sentido del gradiente piezométrico medio. Esto se debe a que el soluto se mueve a través de las zonas de menor resistencia al flujo. Estas zonas, llamadas “vías de flujo preferente”, dependen de la configuración espacial del gradiente piezométrico y de la distribución espacial de las conductividades hidráulicas.

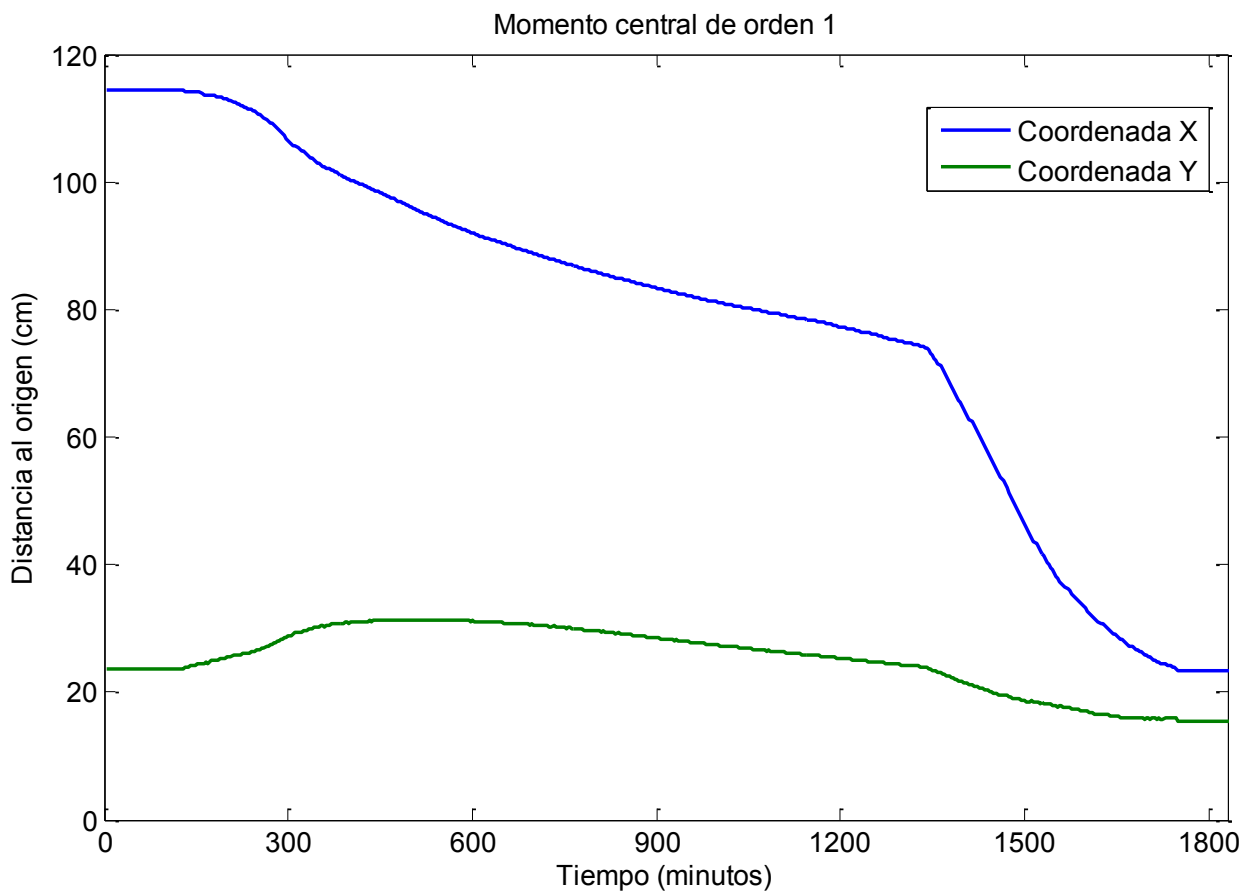


Figura 5.2 - Coordenadas del Cdm a lo largo del tiempo

Conocidas las coordenadas del centro de masas, es posible representarlas sobre una foto del propio tanque para observar el movimiento del centro de masas del penacho. En la figura 5.3, se aprecia cómo la velocidad del centro de masas del penacho aumenta conforme el centro de masas atraviesa zonas con mayor conductividad y cómo esta trayectoria busca siempre el camino de menor resistencia al flujo (los elementos más oscuros son los de mayor conductividad hidráulica).

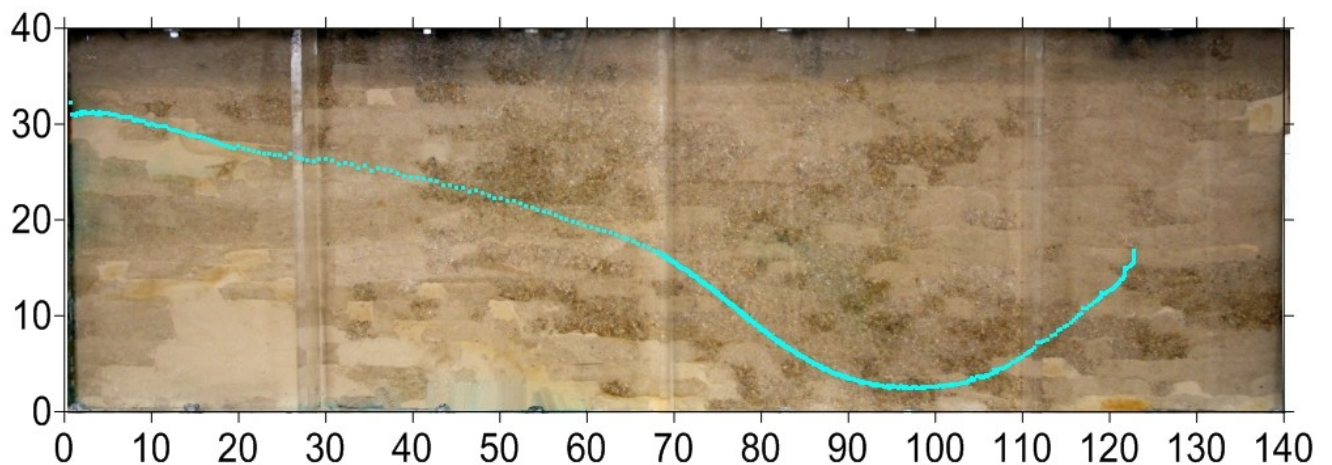


Figura 5.3 - Trayectoria del Centro de masas (momento orden 1)

Tal como se observa en la figura 5.3, el centro de masa del penacho muestra un claro descenso hacia la parte inferior del tanque en los momentos iniciales. Esto puede deberse a caminos preferentes de flujo creados por heterogeneidades no representadas en la discretización numérica y que modifican las trayectorias en el interior del medio. También puede deberse a efectos gravitatorios a causa de la densidad del trazador, mayor que la del agua, o una combinación de ambas causas. En el caso del efecto gravitatorio debido a la densidad, la dilución del trazador haría descender la densidad hasta asemejarla a la del agua, por lo que pasado un cierto tiempo el trazador ajustaría su comportamiento a la ecuación de convección-dispersión. Se ha realizado una modelación satisfactoria de esta hipótesis en Garzón-Morales, C. L. (2009), en la que se demuestra la posibilidad de que esta trayectoria sea debida a efectos gravitatorios.

Puesto que se conoce la posición del centro de gravedad del penacho en todos los instantes, puede obtenerse de manera inmediata los valores de la velocidad del centro de masas del penacho:

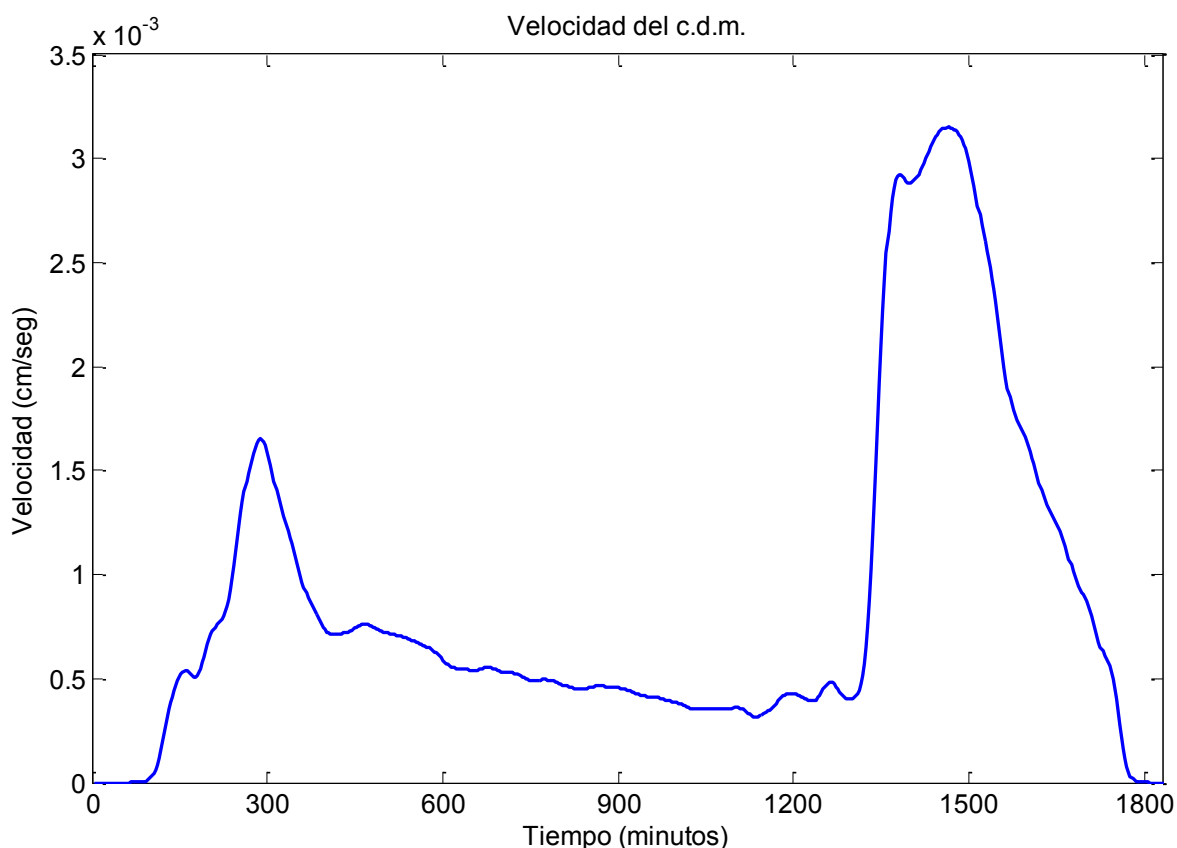


Figura 5.4 - Módulo de la velocidad del centro de masas del penacho a lo largo del tiempo

En la figura 5.4 se observa cómo la velocidad del centro de masas del penacho no es constante, sino claramente irregular. Este hecho es debido a la heterogeneidad del medio. Cuando el centro de masas del penacho atraviesa zonas de mayor conductividad esta velocidad es mayor que cuando atraviesa zonas de conductividad más baja. Esta irregularidad de la velocidad local existe en todas las trayectorias que siguen las moléculas de soluto, y no sólo las del centro de gravedad. El resultado es que en cada zona del penacho las moléculas se mueven con una velocidad y dirección independientes de las demás zonas debido a la heterogeneidad del medio. Esta es la causa principal de la dispersión macroscópica de los solutos en el seno de un acuífero y la razón de la importancia de modelar correctamente las heterogeneidades del medio.

Hay que destacar que en los instantes iniciales, el centro de gravedad del penacho no parece moverse. Esto se debe a que, al inyectar un volumen finito de disolución de trazador, se crea una pequeña perturbación transitoria del campo de alturas piezométricas, que tarda unos instantes en volver al régimen estacionario. Durante esos instantes, el penacho crece alrededor de su centro de masas, aumentando su volumen, pero sin desplazarse de manera apreciable. De ahí que la curva de velocidades muestre un valor casi nulo en los primeros momentos de su evolución.

Los momentos centrales de segundo orden miden la desviación típica de la distribución de las concentraciones de soluto alrededor del centro de masas del penacho. Estos valores tienen gran importancia a la hora de determinar la dispersividad, puesto que definen un tensor \mathbf{S} , relacionado con el tensor de dispersión según su evolución en el tiempo. Esta evolución puede verse gráficamente en la siguiente figura 5.5:

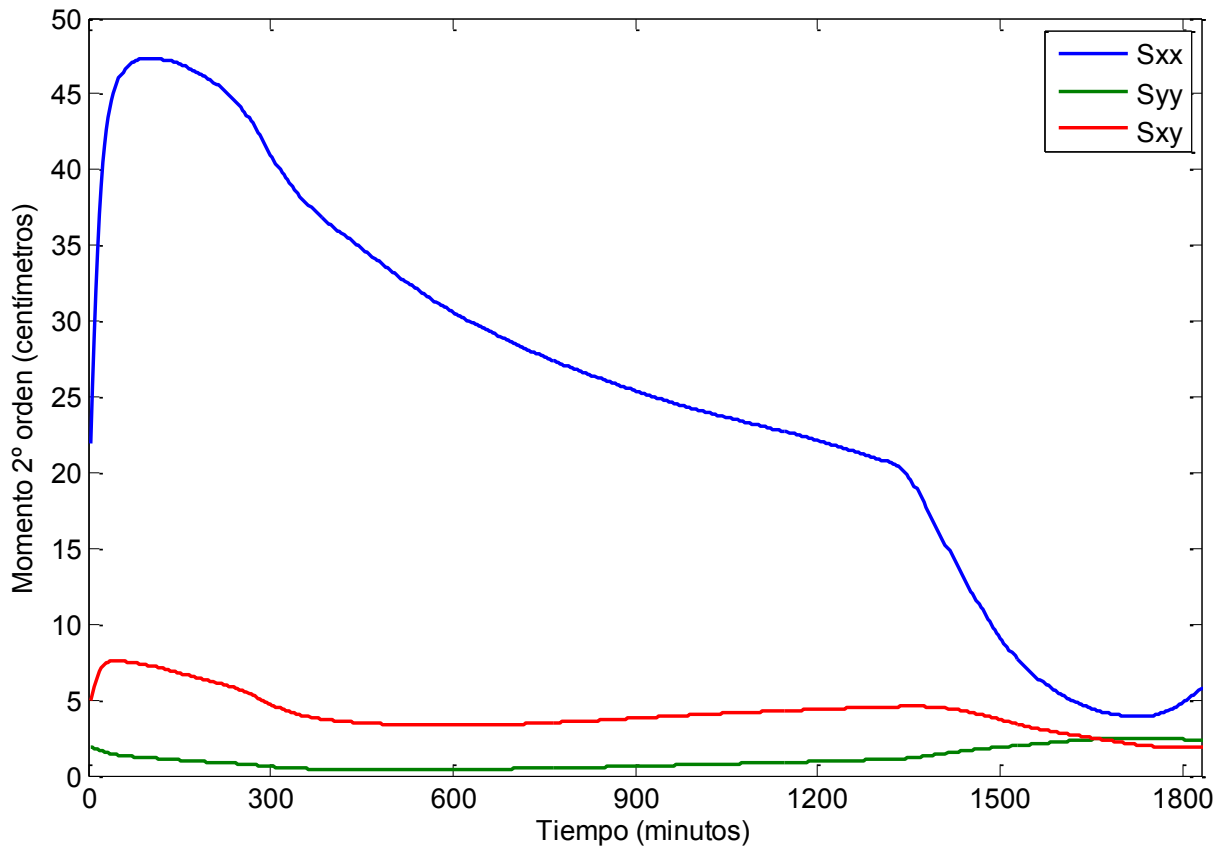


Figura 5.5 - Evolución del momento de 2º orden

De estos valores, aplicando la relación:

$$D_{ij}(t) = \frac{1}{2} \frac{d\langle S_{ij} \rangle}{dt}$$

Pueden obtenerse así los valores componentes del tensor de dispersión D_{ij} a lo largo del tiempo, sabiendo que entre una imagen y la siguiente transcurren 180 segundos. De esta forma, la evolución de los valores de los distintos componentes de la matriz de dispersión, queda representada en la siguiente figura 5.6:

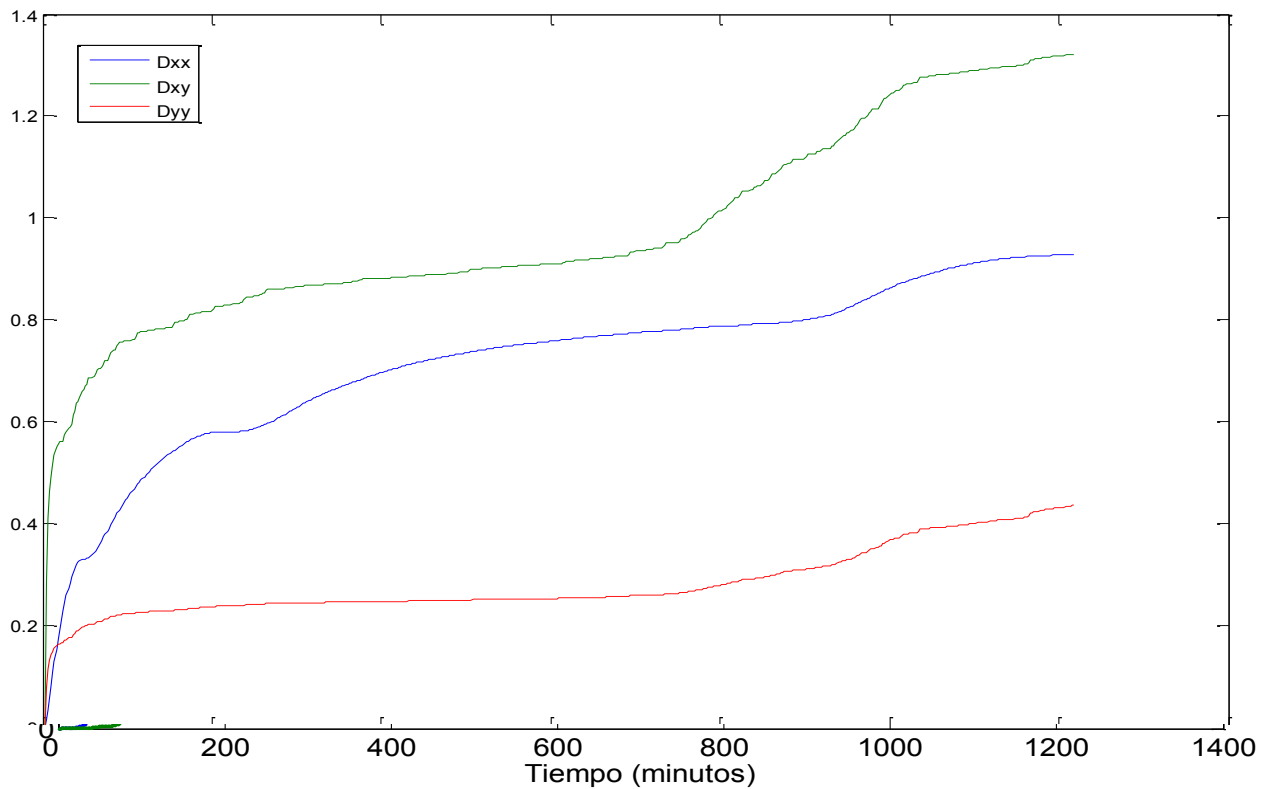


Figura 5.6 - Evolución de los valores de los elementos de la matriz de dispersión

Estos valores están referidos a un sistema de coordenadas x,y que coincide con los ejes del propio tanque, y no con el vector de velocidad instantánea del centro de masas del penacho. Por ello, la matriz de dispersión es simétrica con valores no nulos fuera de la diagonal principal. Para obtener las dispersividades medias efectivas es necesario referir los valores del tensor de dispersión a un sistema de coordenadas coincidente con el vector velocidad $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ del centro de masas en cada instante de tiempo. Esto se consigue diagonalizando para cada instante la matriz formada por los valores de S_{11} , S_{12} , S_{21} y S_{22} . La evolución de los valores de la matriz diagonalizada según los ejes de coordenadas definidos por $\mathbf{v}(\mathbf{x})$ quedan mostrados en la siguiente figura

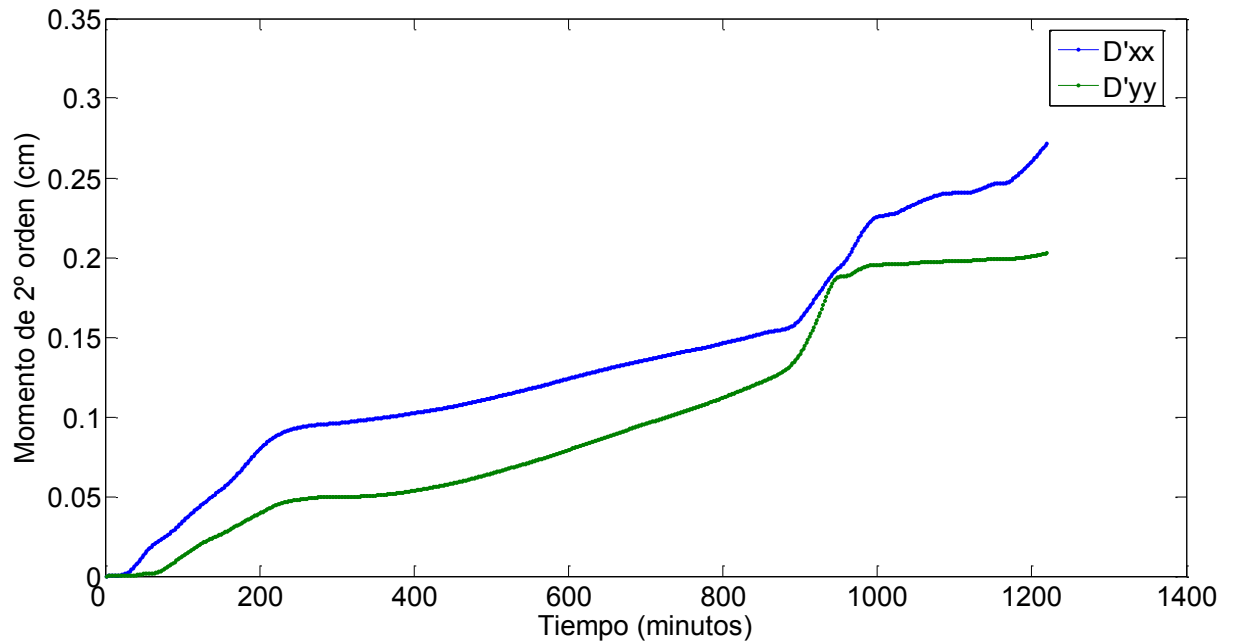


Figura 5.7 - Evolución de los valores de la dispersión longitudinal y transversal vertical

Los valores medios de la dispersividad longitudinal y transversal (α_L y α_T), y su evolución en el tiempo, se calculan utilizando la expresión:

$$[D] = \begin{bmatrix} \alpha_L |\mathbf{v}| & 0 \\ 0 & \alpha_T |\mathbf{v}| \end{bmatrix} \quad (5.1)$$

Puesto que conocemos el valor de $|\mathbf{v}|$, es inmediato obtener el valor de α_L y α_T . La evolución temporal de sus valores queda reflejada en la figura 5.8.

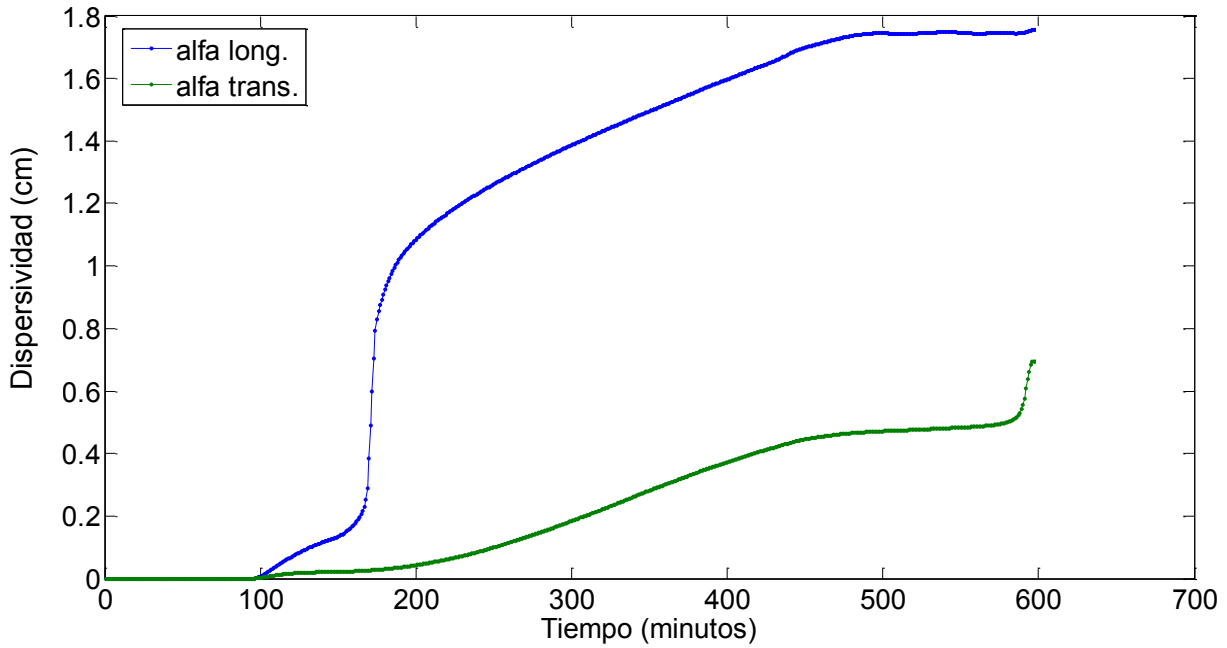


Figura 5.8 Evolución de los valores globales de dispersividad longitudinal y transversal

Aquí se observa una de las principales dificultades prácticas a la hora de utilizar la ecuación de convección-dispersión: que los valores de dispersividad media aumentan con el recorrido del penacho. Esto es debido a la influencia conjunta de todos los elementos a través de los cuales pasa el penacho y que van modificando su forma. Además, el valor concreto de la dispersividad en un instante dado depende no sólo de las características de los materiales por los que discurre el penacho en ese instante, sino de la influencia de todos los materiales por los que ha discurrido anteriormente el penacho. Esto hace difícil cuantificar la influencia de un elemento concreto sobre el valor de la dispersividad media efectiva. En los siguientes apartados tratamos de obtener los valores locales de la dispersividad en cada uno de los elementos en que hemos discretizado el medio utilizado. Para ello, utilizamos los valores de concentración obtenidos por medio del tratamiento de imagen digital y los valores de altura piezométrica y velocidades locales obtenidos mediante la modelación numérica del tanque de experimentación.

5.2 *Dispersividad local efectiva instantánea*

5.2.1 Estimación del balance de masa instantáneo

En la figura siguiente se observa el mapa de concentración obtenido a partir del tratamiento de la imagen digital para el instante n° 300 (900 minutos desde el inicio). Hay que hacer notar que este mapa consta de 2880 píxeles de anchura por 920 píxeles de altura, lo que significa que cada punto corresponde a un área cuadrada de 0,4 mm de lado ($0,16 \text{ mm}^2$). Esto trae no sólo numerosos problemas de cálculo numérico, sino que para los materiales más gruesos, el nivel de detalle es inferior incluso al tamaño medio de grano. Es decir, estaríamos obteniendo datos de concentración por debajo del Volumen Elemental Representativo (REV), lo que nos haría caracterizar efectos del transporte que no se pueden tratar con la ADE. Para evitar estos problemas, se agruparon los resultados en un número de elementos coherente con la modelación numérica del medio (esto es, 180 elementos de longitud por 40 elementos de altura).

Para ello, se tomaron grupos de 23 píxeles de alto por 18 píxeles de ancho, y a cada grupo se asoció la media aritmética del valor de todos estos puntos (a fin de conservar el valor de la masa total). De ese modo, el valor de dispersividad asociado a cada elemento del tanque está formado por la media geométrica del valor de todos los puntos del elemento. Los nuevos elementos cubren un área rectangular de 6 mm de anchura por 10 mm de altura (60 mm^2) cada uno.

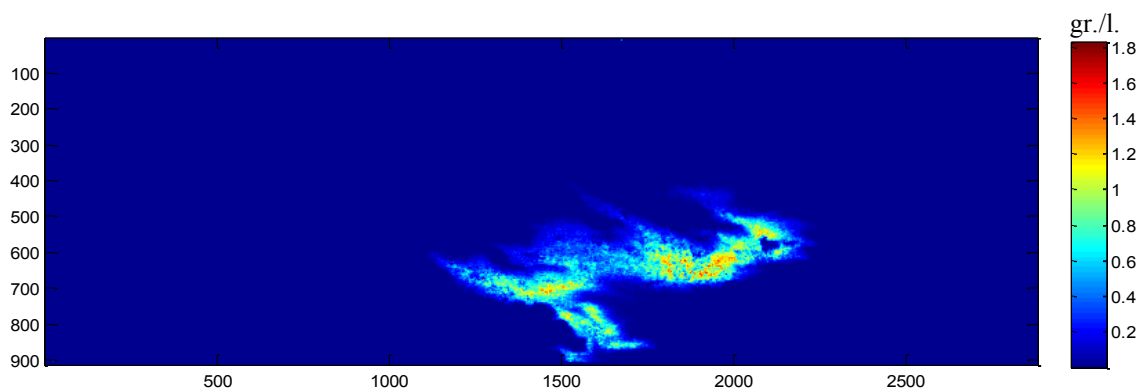


Figura 5.9 Mapa de concentración de trazador en el instante $t = 900 \text{ min}$

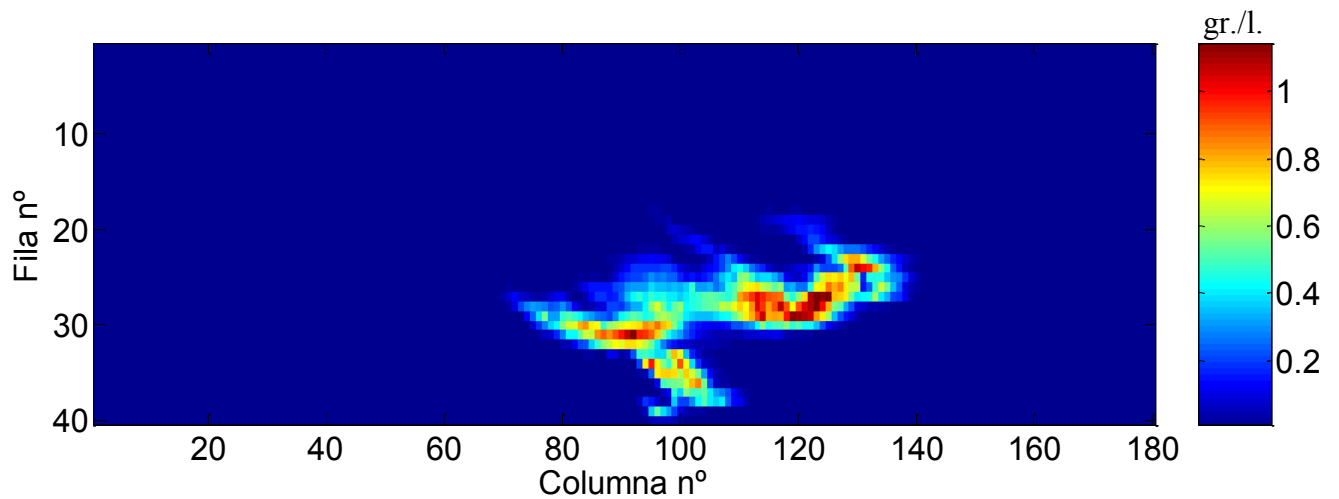


Figura 5.10 Media aritmética de los valores de concentración asociados a cada elemento del tanque en el instante $t = 900$ min

De esta forma se obtienen los valores de concentración asociados a cada elemento del tanque en un instante determinado. Puesto que también se tienen los valores en los instantes inmediatamente anterior y posterior, es posible representar el mapa del valor del balance instantáneo de masa en cada punto aplicando la ecuación (4.22) asumiendo un valor de $\varepsilon = 0,45$.

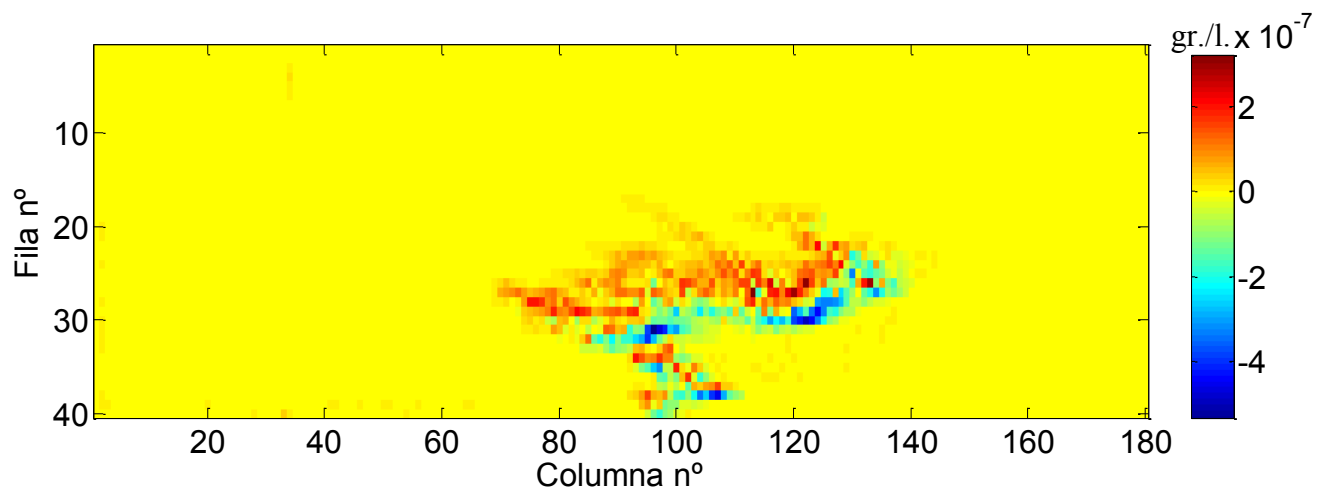


Figura 5.11 Balance de masa en el instante $t = 900$ min

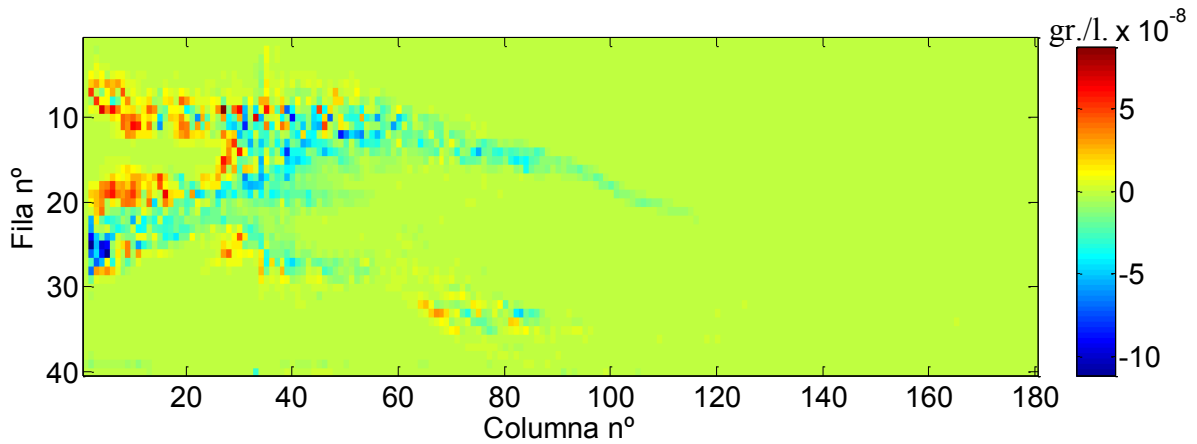


Figura 5.12 Balance de masa en el instante $t = 1650$ min.

Como puede observarse en las figuras, aquellos puntos que forman el frente de avance (el penacho se mueve de izquierda a derecha) adoptan valores positivos, ya que son puntos en los que aumenta la concentración de soluto. Igualmente, los valores negativos indican que la concentración disminuye. No es de extrañar, pues, que los valores positivos se concentren en las zonas donde se produce un avance del penacho y los negativos en la cola del penacho.

5.2.2 Componente convectiva instantánea del balance de masa

Gracias a los mapas de velocidad local obtenidos a partir del modelo numérico calibrado, es posible estimar la componente convectiva instantánea del balance de masa en cada punto e instante estudiado gracias a la ecuación (4.23).

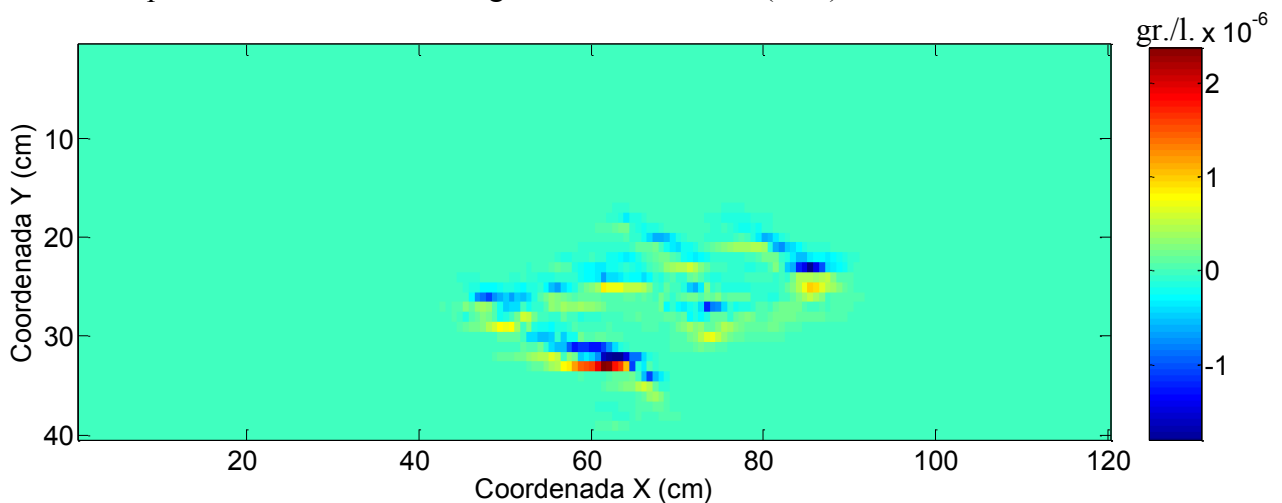


Figura 5.13 Componente convectiva del balance de masa en el instante $t = 900$ min

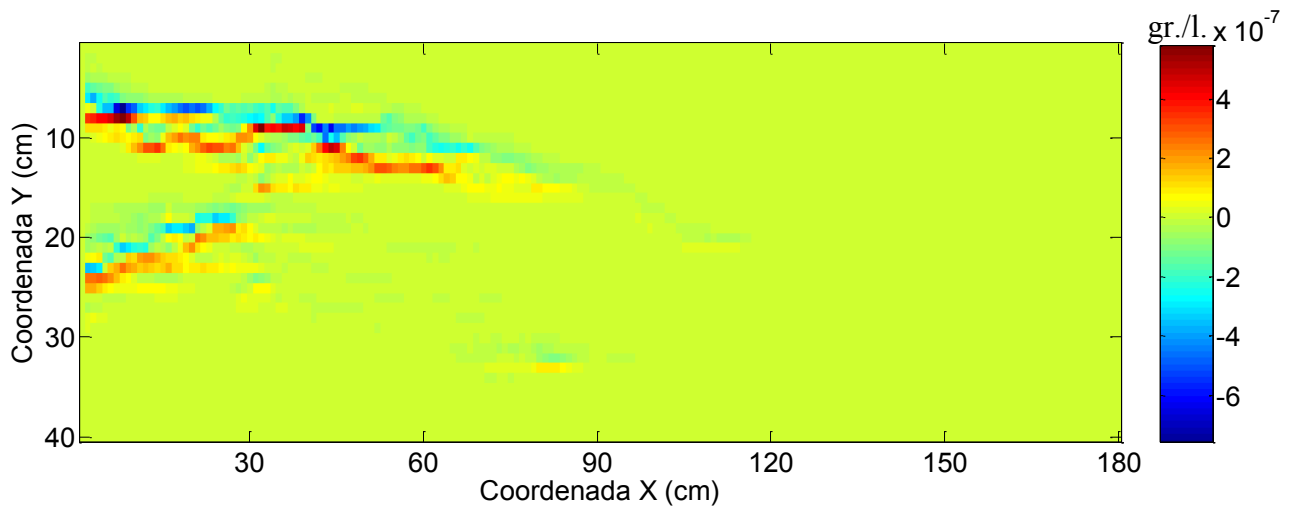


Figura 5.14 Componente convectiva del balance de masa en el instante $t = 1650$ min

Se observa, del mismo modo que para el balance de masa, que aquellos puntos en que el penacho avanza (es decir, que aumentan su concentración en ese instante frente al instante anterior) tienen un valor positivo y se dan valores negativos en aquellos puntos que el penacho va dejando atrás. Se observa que los valores máximos, tanto positivos como negativos, se encuentran en la zona del centro de masas del penacho. Esto se debe a que es la zona donde existe una mayor cantidad de masa de soluto en movimiento. Esta componente explica qué parte del balance de masa calculado en cada instante, tal como se explica en el punto anterior, es debida al arrastre de las moléculas de soluto por la velocidad local de flujo.

5.2.3 Componente dispersiva instantánea

Al disponer ya de los diferentes valores para el balance de masa y para la componente convectiva en cada punto y en cada instante, la estimación de la componente dispersiva resulta de restar ambos conjuntos de valores. La componente dispersiva del balance de masa explica qué salidas o entradas de soluto se dan en un elemento en un instante dado debido a los fenómenos de difusión y dispersión hidrodinámica. En las condiciones creadas en el interior del tanque de experimentación, esta componente es de menor importancia que la componente debida a la convección. Sin embargo, su estudio es el tema central de este trabajo.

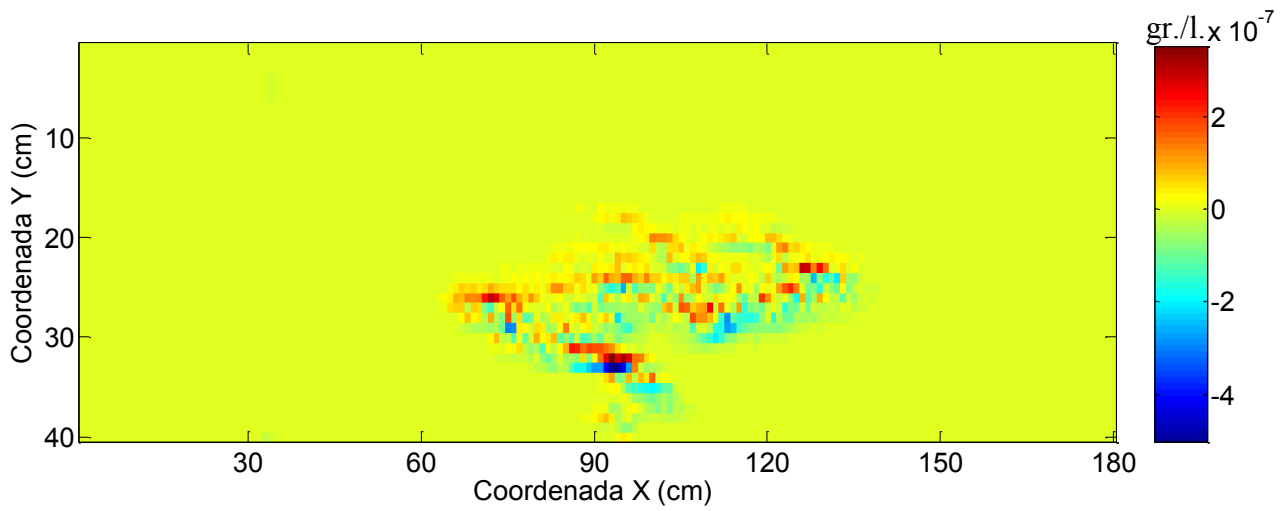


Figura 5.15 Componente dispersiva en el instante $t = 900$ min (en gr./litro)

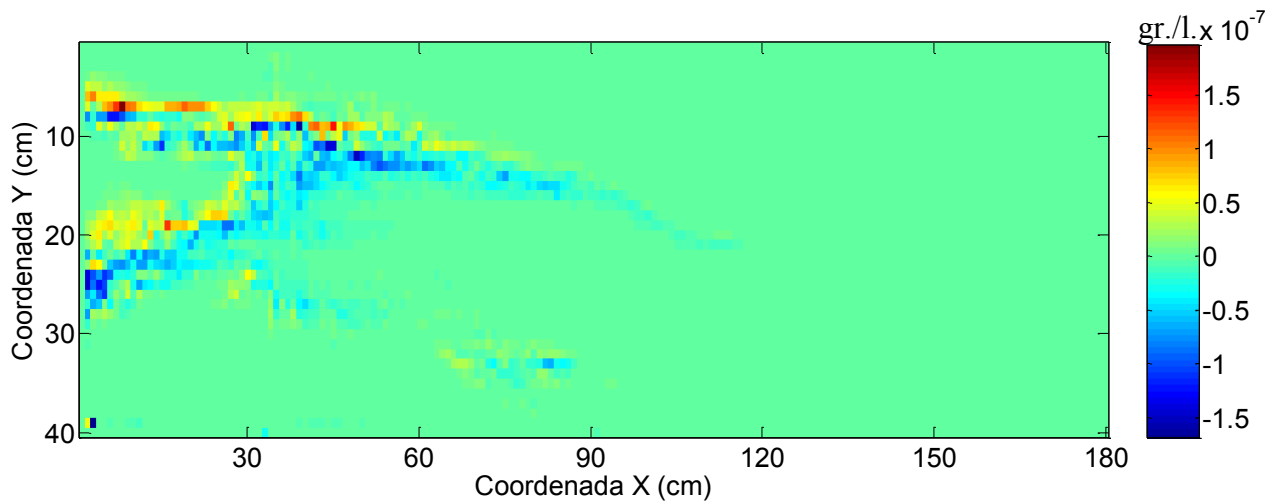


Figura 5.16 Componente dispersiva en el instante $t = 1650$ min (en gr./litro)

Se observa que los valores de la componente dispersiva no muestran el mismo patrón espacial que tiene el mapa del balance de masa o de la componente convectiva.

5.3 Cálculo de las dispersividades locales efectivas instantáneas

El valor de las dispersividades efectivas locales instantáneas puede obtenerse a partir de los datos de que se dispone aplicando la metodología de modelación inversa desarrollada en la sección 4.6. De esa forma pueden obtenerse mapas tanto del valor de las dispersividades locales efectivas instantáneas correspondientes a cada elemento discretizado del medio en un instante determinado, como gráficos de la evolución temporal de la dispersividad en cualquier celda (i,j).

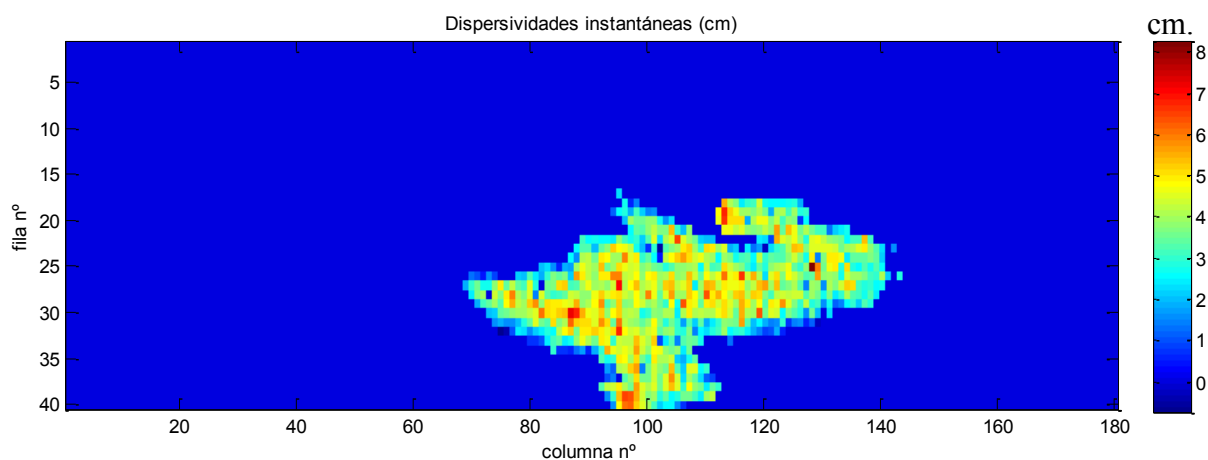


Figura 5.17 Dispersividades locales instantáneas en el instante $t = 54000$ s

En los siguientes apartados se realiza un repaso exhaustivo de los principales resultados obtenidos con este ensayo.

5.4 Comportamiento temporal de la dispersividad

En todos los puntos analizados se observa un comportamiento similar en lo que respecta a la dispersividad en función del tiempo. Se aprecia un periodo rápido de aumento del valor de la dispersividad hasta alcanzar un máximo, más largo o más corto según la distancia al centro de masas del penacho. Este periodo viene seguido por una caída coincidiendo con el paso completo del penacho a través de la celda. Debido a la forma de estimar la dispersividad que se ha desarrollado, el valor de ésta sólo puede determinarse en los instantes en que existe una concentración de soluto no nula en la celda. Es decir, en los instantes en que existe en la celda una curva de llegada de soluto. Conforme la celda está más alejada de la trayectoria del centro de masas, esta curva de llegada es más corta, lo que hace que las etapas de crecimiento y caída de la dispersividad sean más acusadas.

El instante en que sucede el máximo valor de dispersividad coincide con el instante en que se produce el valor máximo del gradiente de concentración en la celda. Aunque la velocidad relativa de crecimiento y decrecimiento varíen, se puede observar para todas las celdas estas tres etapas definidas: crecimiento, máximo y cola.

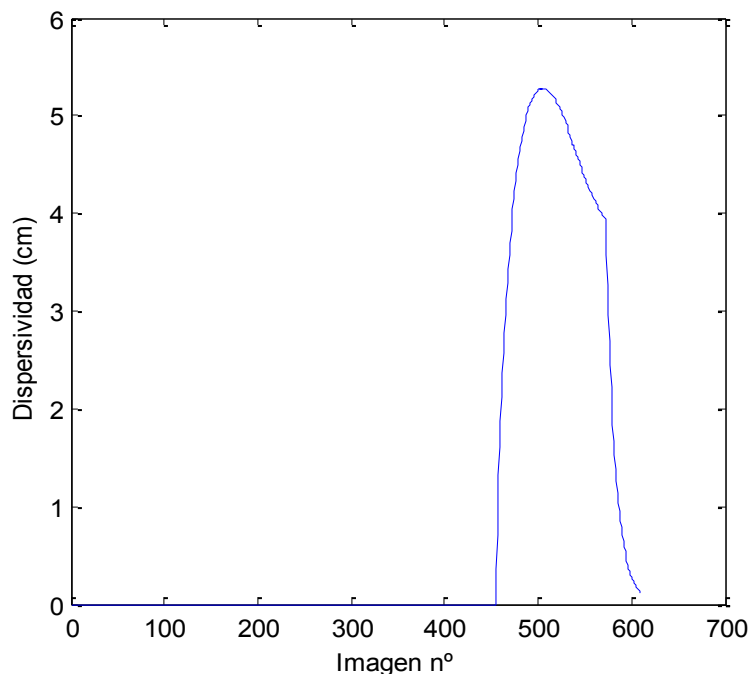


Figura 5.18 Comportamiento típico de la dispersividad en función del tiempo

5.5 Mapa de dispersividades máximas

Una vez obtenidos los valores de dispersividad local en todos los instantes y puntos por los que discurre el penacho, puede obtenerse un mapa del máximo valor de la dispersividad en cada uno de estos puntos obtenido a lo largo del ensayo. Dicho mapa se muestra en la figura siguiente.

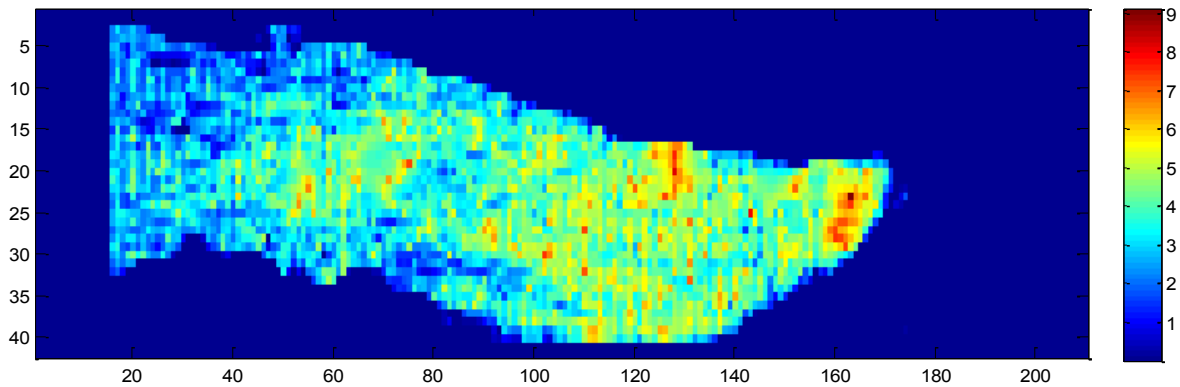


Figura 5.19 Mapa de dispersividades máximas (en cm)

En el mapa se aprecia una cierta correlación espacial entre los valores de la dispersividad, agrupándose los valores altos en zonas definidas, aunque esta distancia de correlación sea escasa. También puede verse una cierta relación con los diferentes materiales que forman el tanque, produciéndose mayores valores máximos de la dispersividad en aquellos elementos formados por materiales con conductividad hidráulica alta. Trabajaremos con estos valores máximos de dispersividad a la hora de realizar un ensayo numérico de flujo y transporte que reproduzca el experimento llevado a cabo en el tanque. En los siguientes apartados realizamos un análisis del comportamiento temporal de la dispersividad en cada punto.

5.6 Evolución temporal de las dispersividades locales instantáneas.

5.6.1 Selección de puntos de control de la evolución de la dispersividad local efectiva instantánea

Dada la extensión del medio y del penacho, se realiza una selección de puntos de control que permita efectuar un análisis del comportamiento de la dispersividad local efectiva instantánea en localizaciones de interés y representativas del comportamiento de esta dispersividad. En este apartado se seleccionan, por su interés, varios grupos de puntos en base a características como:

- La distancia al centro de masas del penacho
- El material a que corresponden
- La distancia al punto de inyección

5.6.2 Comportamiento temporal de la dispersividad local instantánea según su distancia al cdm

Puesto que se dispone de las coordenadas de la trayectoria del centro de masas del penacho a lo largo del tiempo, pueden seleccionarse puntos en función a la distancia al cdm. El interés de seleccionar los grupos en base a este criterio se debe a que, a mayor distancia al cdm, menor será la concentración máxima de trazador alcanzada en ese punto. Esto arroja luz sobre el comportamiento de la dispersividad local instantánea en función de la masa máxima de soluto que pasa por ese punto. Para ello, se seleccionan 15 puntos agrupados en:

- a) Puntos que coinciden con la trayectoria del cdm
- b) Puntos algo apartados de la trayectoria del cdm, del interior del penacho, con una concentración máxima importante
- c) Puntos muy apartados, en el borde del penacho, con concentración máxima pequeña.

<i>GRUPO A</i>			<i>GRUPO B</i>			<i>GRUPO C</i>		
Nombre	Columna	Fila	Nombre	Columna	Fila	Nombre	Columna	Fila
A1	163	24	B1	161	22	C1	160	30
A2	150	30	B2	143	23	C2	128	40
A3	122	34	B3	114	20	C3	96	38
A4	101	27	B4	89	15	C4	70	31
A5	68	22	B5	52	9	C5	28	33
A6	35	19	B6	31	9	C6	29	19

Tabla 5.1 – Coordenadas de los puntos seleccionados

En las figuras siguientes se observa la situación geométrica de los puntos de la tabla anterior. En color violeta se indica el recorrido seguido por el penacho a lo largo de toda su evolución, con el fin de apreciar la posición de los puntos de estudio:

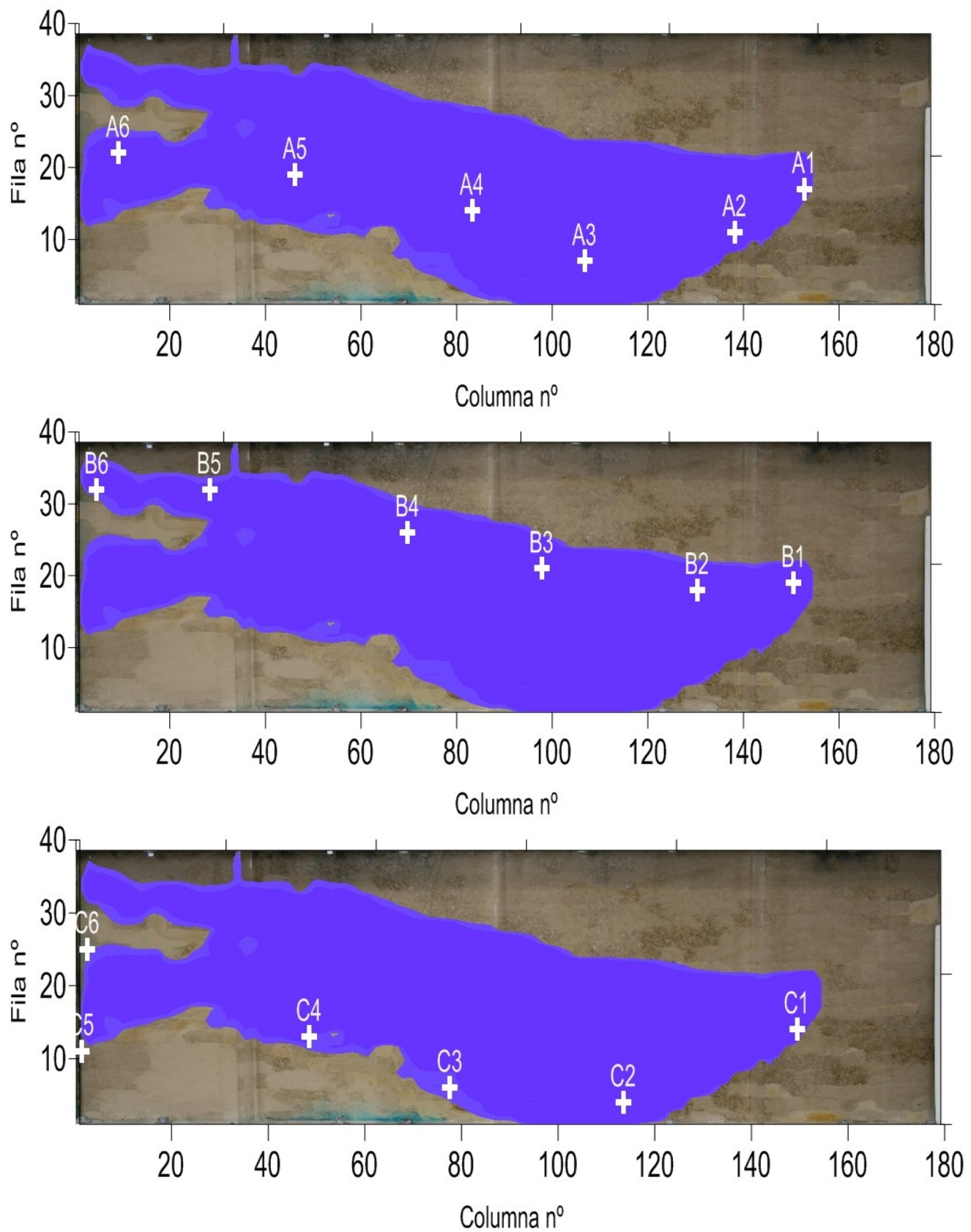


Figura 5.20 Situación de los puntos seleccionados en función a la distancia al centro de masas del penacho

En los siguientes gráficos se observa el comportamiento temporal de la dispersividad local instantánea en los puntos seleccionados.

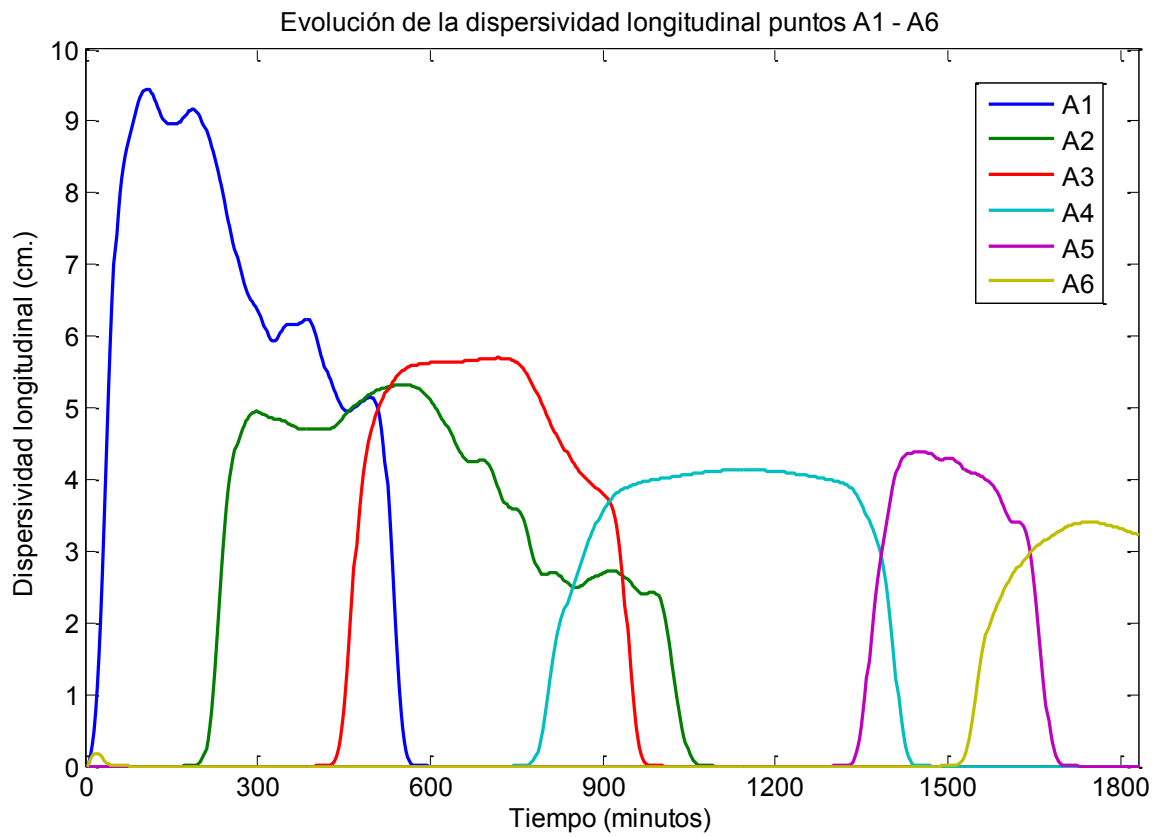


Figura 5.21 Comportamiento de la dispersividad en los puntos del grupo A

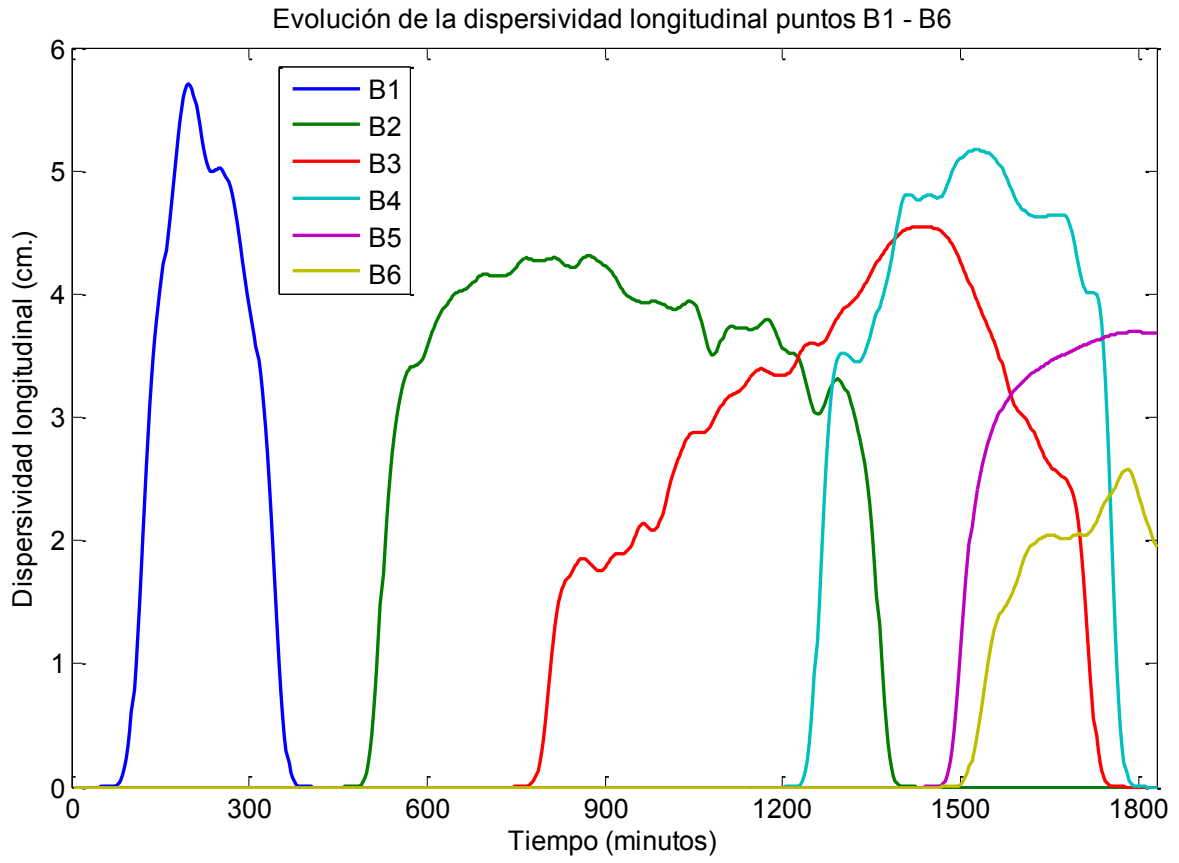


Figura 5.22 Comportamiento de la dispersividad en los puntos del grupo B

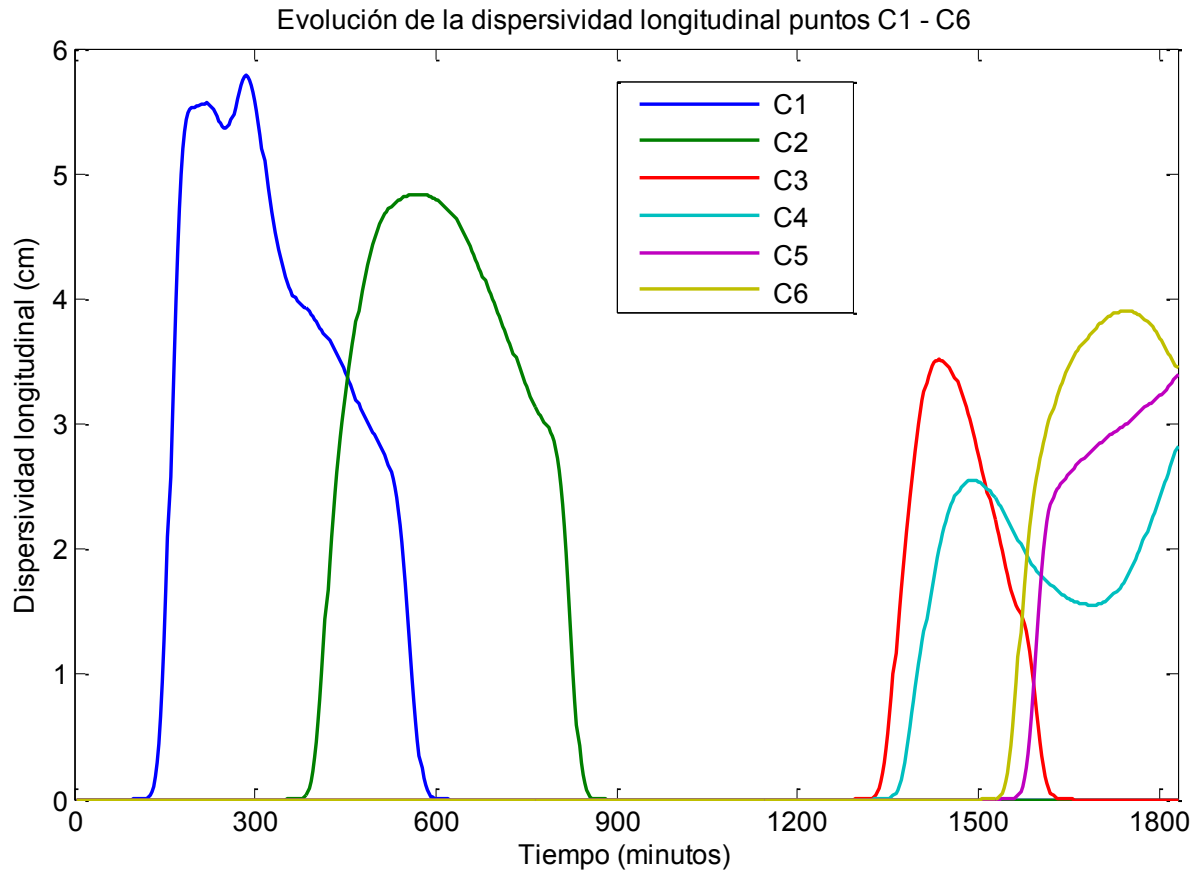


Figura 5.23 Comportamiento de la dispersividad en puntos del grupo C

En estas curvas se puede apreciar varias características:

- Puesto que el campo de velocidades es estacionario, las únicas variables que tienen influencia en la evolución temporal de la dispersividad serán la concentración y, más en concreto, el gradiente de concentración.
- El valor máximo de la dispersividad tiende a reducirse conforme nos alejamos del centro de masas del penacho. Esto es debido a que en estas celdas, la curva de llegada de soluto es más corta, y debido a ello, con pendientes (es decir, el valor del gradiente de concentraciones) más acusadas.
- En los puntos del interior del penacho, aún mostrando unas curvas con mayor ruido, se observa un aumento y disminución de la dispersividad más suave que en los otros grupos de puntos.
- En los puntos más alejados del centro de masas del penacho se observa que los periodos de crecimiento y decrecimiento de la dispersividad son mucho

más cortos, debido también a que las curvas de llegada de soluto para esos puntos son más cortas.

5.6.3 Comportamiento según su distancia al punto de inyección

Para analizar este comportamiento se toman los puntos anteriores agrupados en tres categorías:

- 1) Cercanos al punto de inyección (puntos A1 – A2 hasta C1- C2)
- 2) En la zona central del recorrido del penacho (A3 – A4 hasta C3 – C4)
- 3) En la zona más alejada del punto de inyección (A5 – A6 hasta C5 – C6)

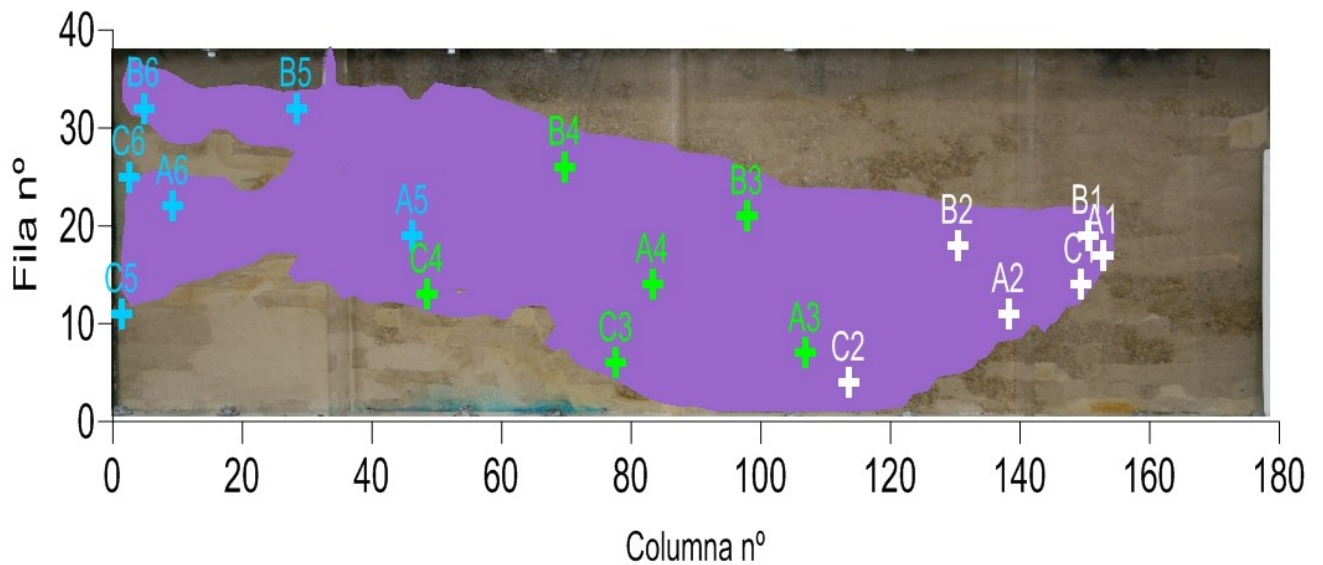
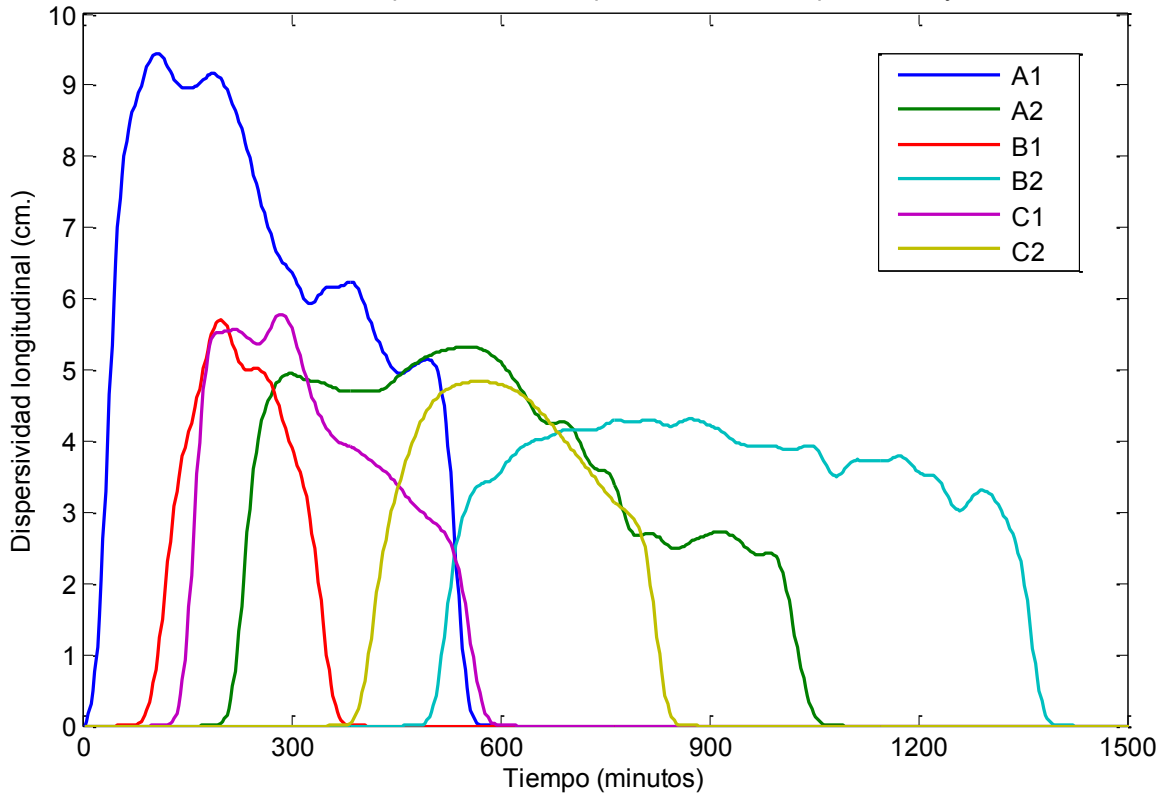
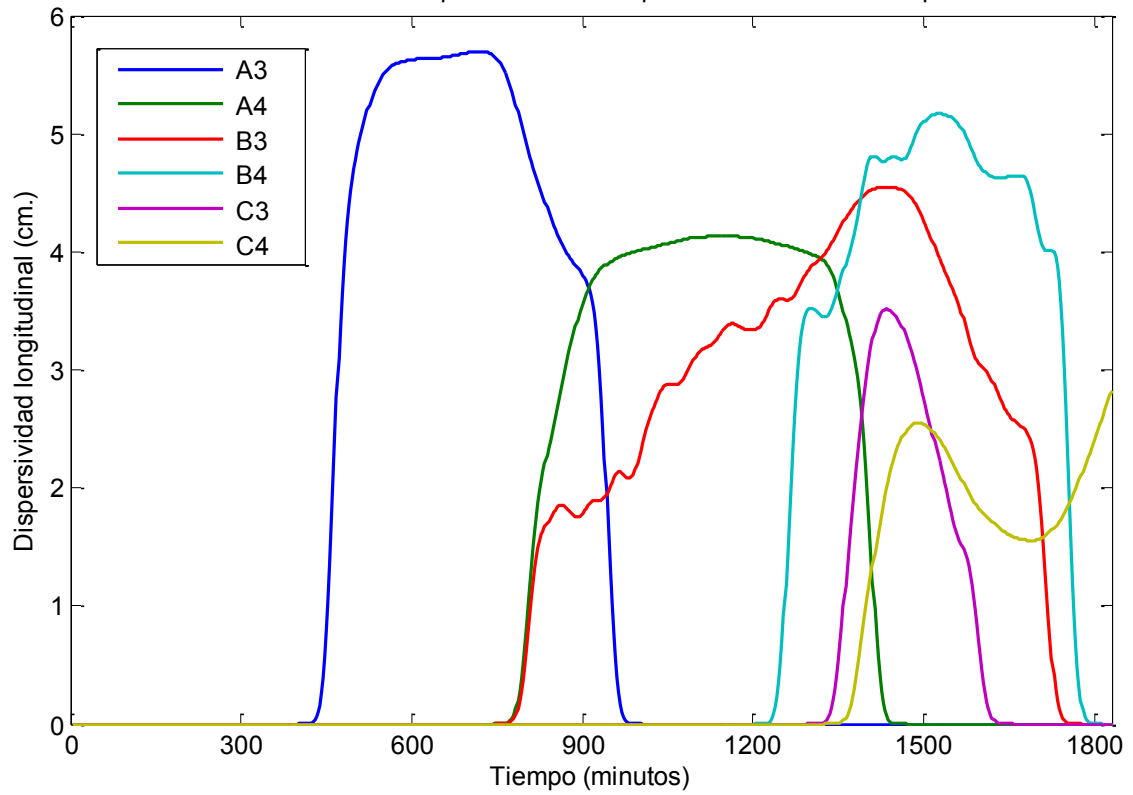


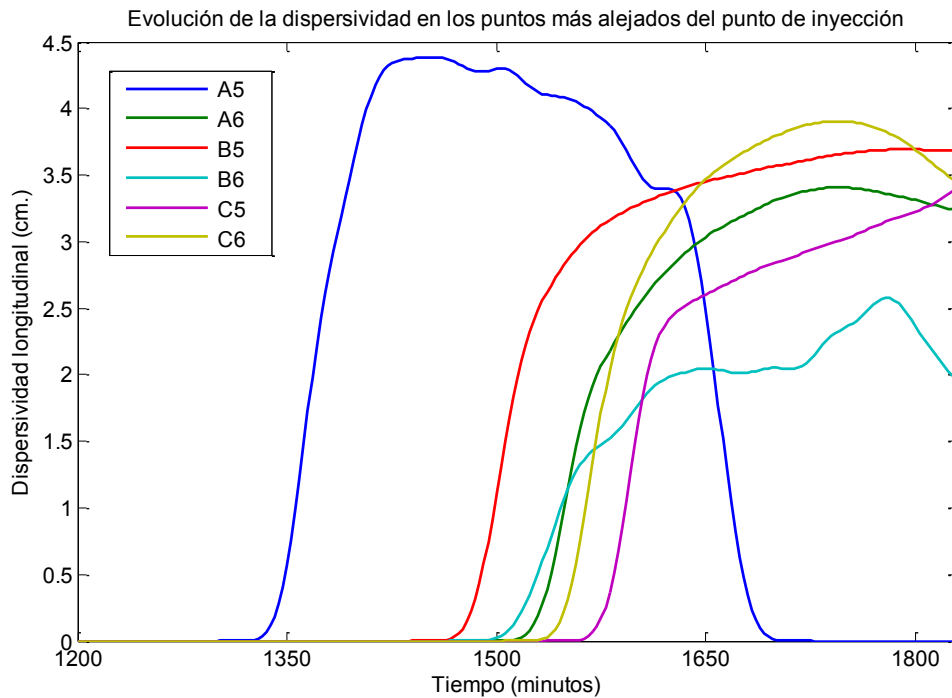
Figura 5.24 Situación de los puntos agrupados según su distancia al punto de inyección

Evolución de la dispersividad en los puntos cercanos al punto de inyección



Evolución de la dispersividad en los puntos centrales del tanque





Se observa, en estas figuras, que las etapas de crecimiento y decrecimiento de los valores de dispersividad local instantánea dependen de la distancia al punto de origen. En los puntos cercanos al origen se comprueba una etapa de decrecimiento más acusada, debido a que las colas de las curvas de llegada son más cortas en los puntos cercanos al punto de inyección. En los puntos más alejados puede verse una zona de crecimiento más suave y una zona de decaimiento brusco. Esto es debido a que las curvas de llegada en esos puntos tienen una etapa de crecimiento suave (debido al efecto de la dispersión aguas arriba) y una etapa de decaimiento brusca debido a que están cerca del límite del tanque donde la masa de soluto desaparece. También puede observarse cómo conforme nos alejamos del origen de masas, el valor de la dispersividad disminuye ligeramente, aunque esto también depende de la proximidad o lejanía al centro de masas del penacho. Se observa asimismo que en la zona central del tanque la evolución de la dispersividad es más lenta, extendiéndose durante mayor número de instantes.

Hay que prestar atención a las irregularidades en las curvas que muestran la evolución de la dispersividad a lo largo del tiempo. Estas irregularidades no quedan bien explicadas por el método numérico desarrollado y se deben a factores no tenidos en cuenta en la formulación numérica desarrollada. Entre estos factores, se deben tener en cuenta heterogeneidades de escala más pequeña que el tamaño de los elementos discretizados. Como son los efectos del apelmazamiento, compactación, arrastre de finos o el hecho inevitable que en el tanque real algunos elementos no están alineados con la discretización adoptada en el modelo numérico. Esto supone que en realidad estamos obteniendo parámetros de dispersividad efectivos que no tienen en cuenta estas heterogeneidades.

5.7 Correlación entre el valor máximo de la dispersividad y el valor máximo del gradiente

Una de las posibles causas que explica el comportamiento observado de la dispersividad efectiva local sería la dependencia de ésta con el gradiente de concentración, ya que en los instantes iniciales, donde los valores locales del gradiente son más altos, los valores de la dispersividad local son mayores.

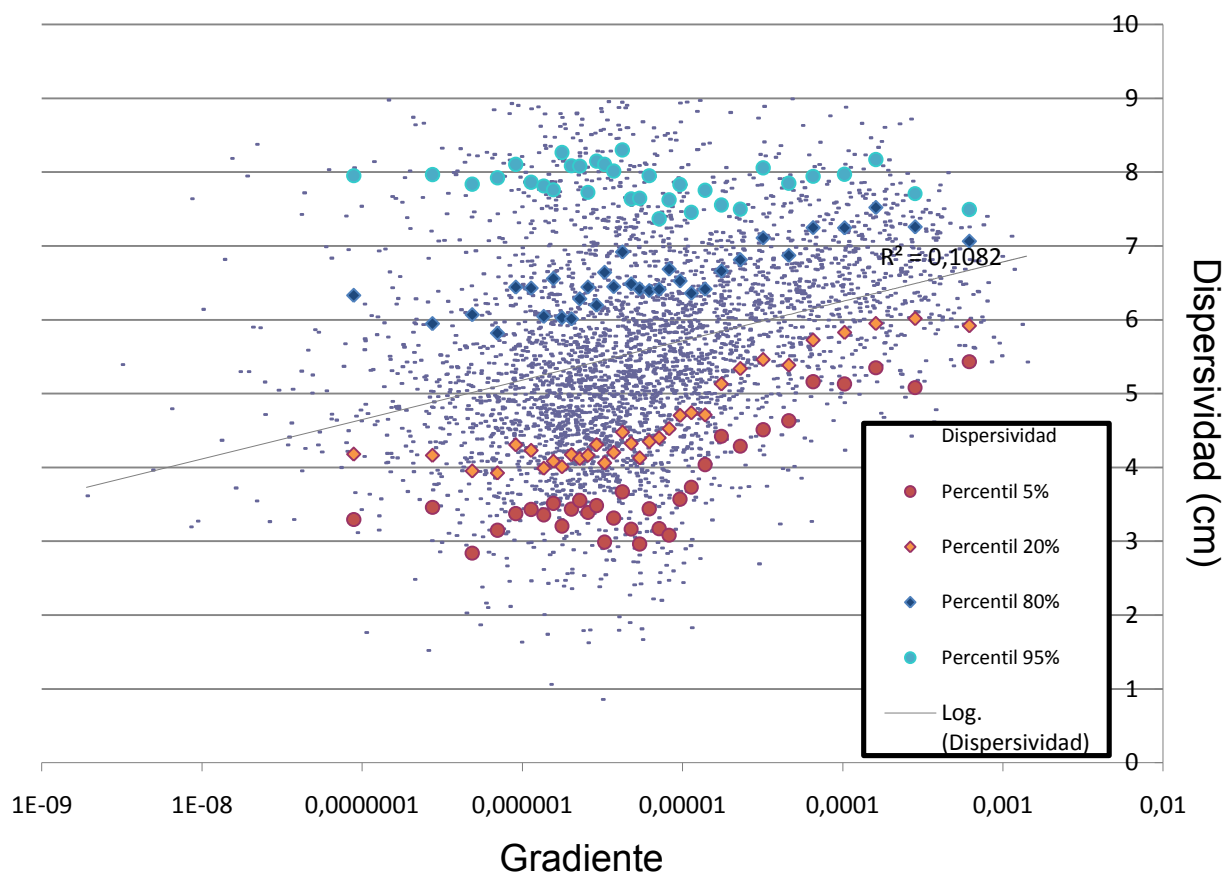


Figura 5.25 Correlación entre el valor máximo local del gradiente y la dispersividad local efectiva máxima

Podemos observar que no parece existir ninguna correlación evidente entre el módulo del gradiente de concentración y el valor de la dispersividad local, aunque podría apuntarse a ello visto el valor de la R^2 .

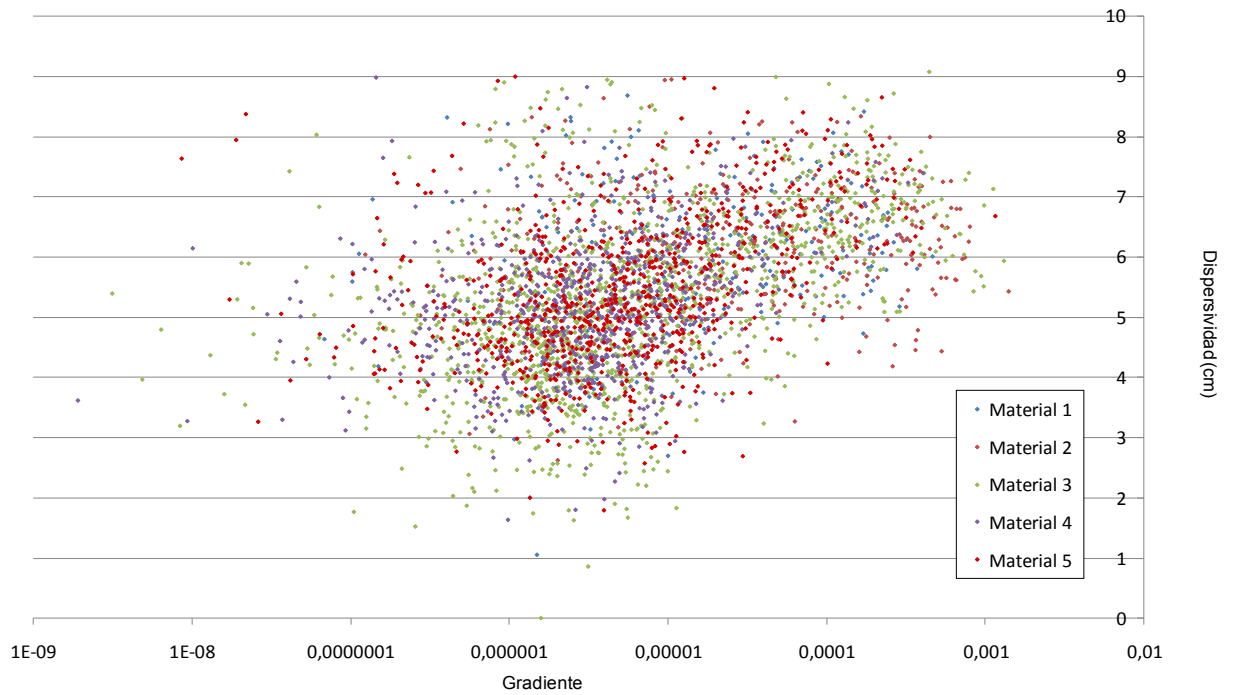


Figura 5.26 Correlación entre el valor máximo local del gradiente y de la dispersividad local efectiva máxima según tipo de material

Prestando atención a estos datos agrupados según el tipo de material, no se aprecia una correlación similar. Esto supone que el valor de la dispersividad está relacionado principalmente con el valor del gradiente de concentraciones..

Sin embargo, si atendemos al instante en que se observa el valor máximo de la dispersividad y lo relacionamos con el instante en que aparece el valor máximo del gradiente, se observa una correlación entre el instante en que acontece el mayor valor del gradiente de concentraciones con el instante en que se da el mayor valor de la dispersividad

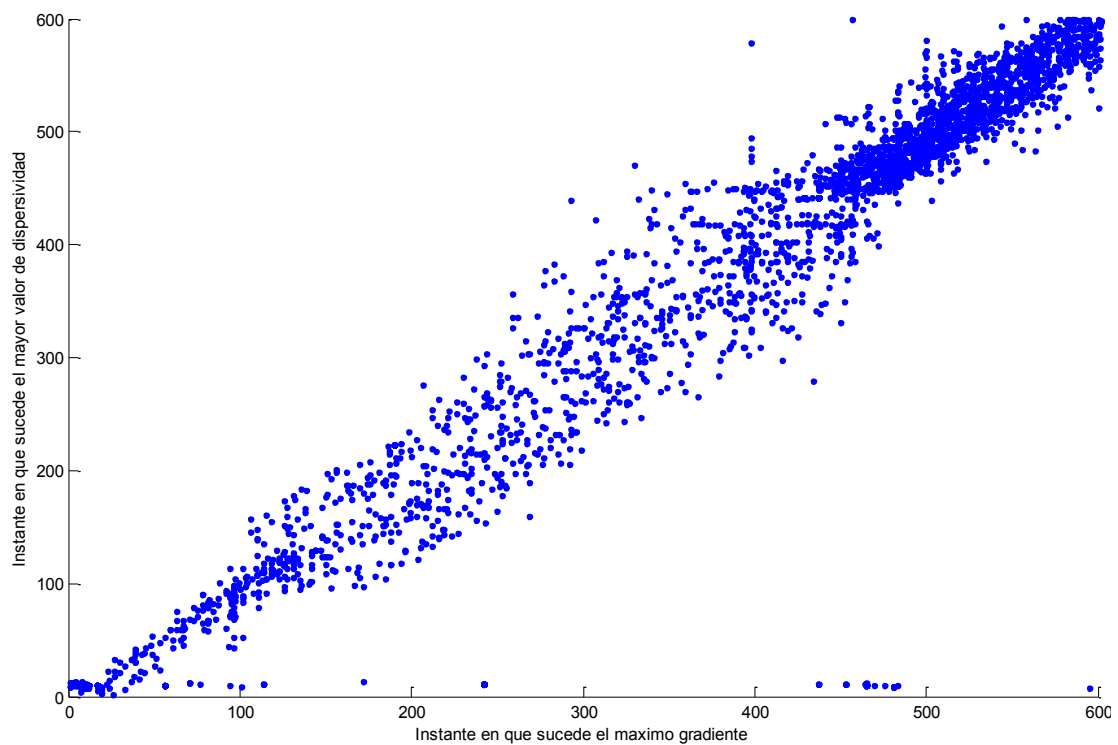


Figura 5.27 Correlación entre el instante en que aparece el máximo gradiente y el máximo valor de dispersividad

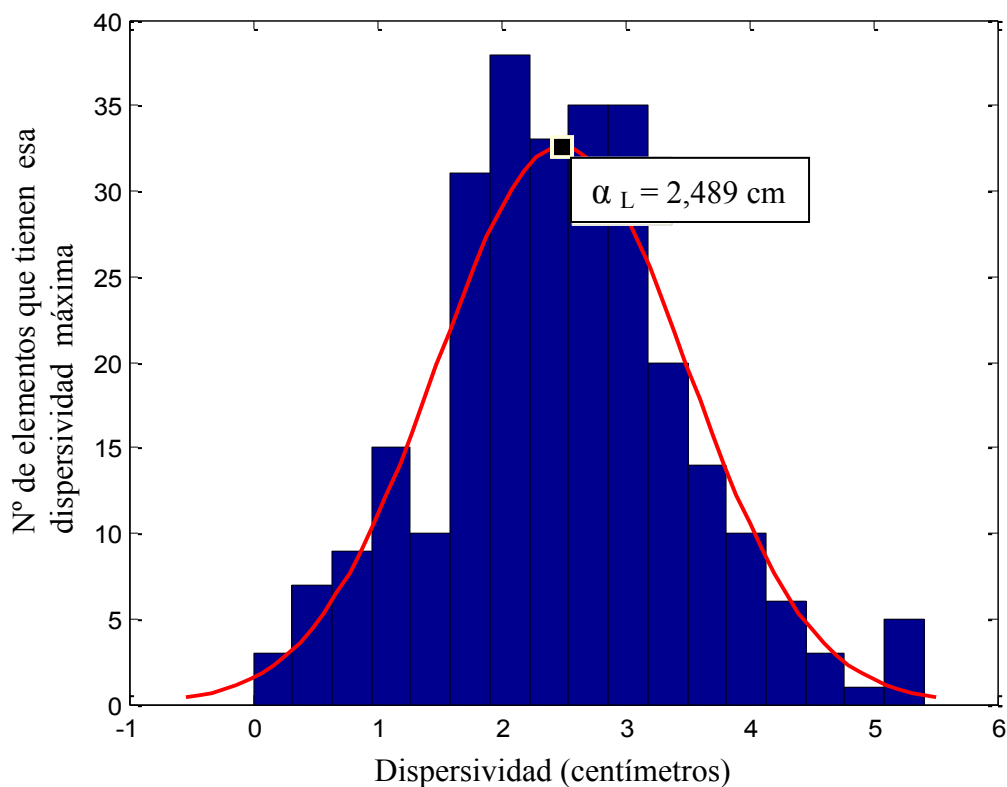
Es decir, el máximo valor de la dispersividad local instantánea se produce en el momento en que se da la máxima pendiente en la curva de llegada de soluto, puesto que el gradiente no es sino la derivada de la curva de llegada de concentraciones. De la misma forma, esto implica también, que el valor máximo de la dispersividad se produce en el momento en que la segunda derivada de la curva de llegada cambia de signo. En el caso de buscar una expresión analítica de la evolución relación entre el gradiente de concentración y el valor de la dispersividad, ésta obtendría su valor máximo en el que la segunda derivada es igual a cero. Sin embargo, esa expresión queda fuera del alcance de esta tesis y queda como proyecto para próximas líneas de investigación.

5.8 Comportamiento de la dispersividad efectiva local máxima según el tipo de material

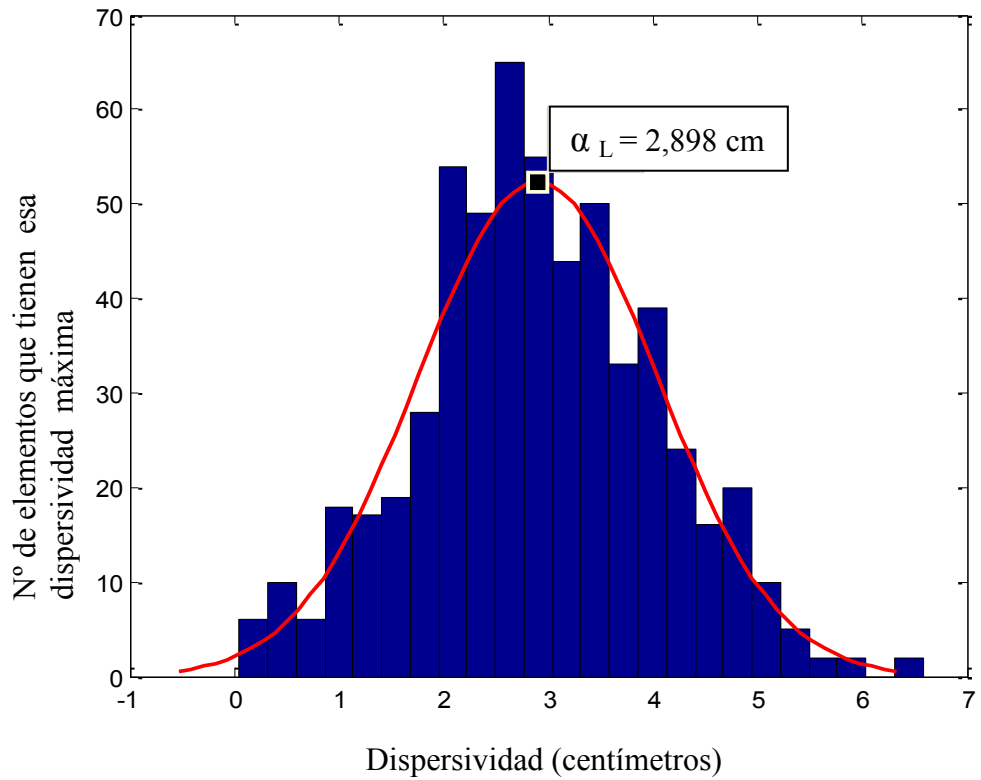
Los siguientes histogramas relacionan, para cada uno de los materiales que forman el medio, el número de elementos de ese material para los que la dispersividad máxima se encuentra dentro de determinado intervalo. A cada uno de estos histogramas se le ajusta una curva gaussiana, de donde se obtiene el valor medio de dispersividad máxima del material.

En estos histogramas se observa que, conforme el material del que está formado el elemento tiene mayor conductividad hidráulica, también el valor de la dispersividad máxima del elemento es mayor.

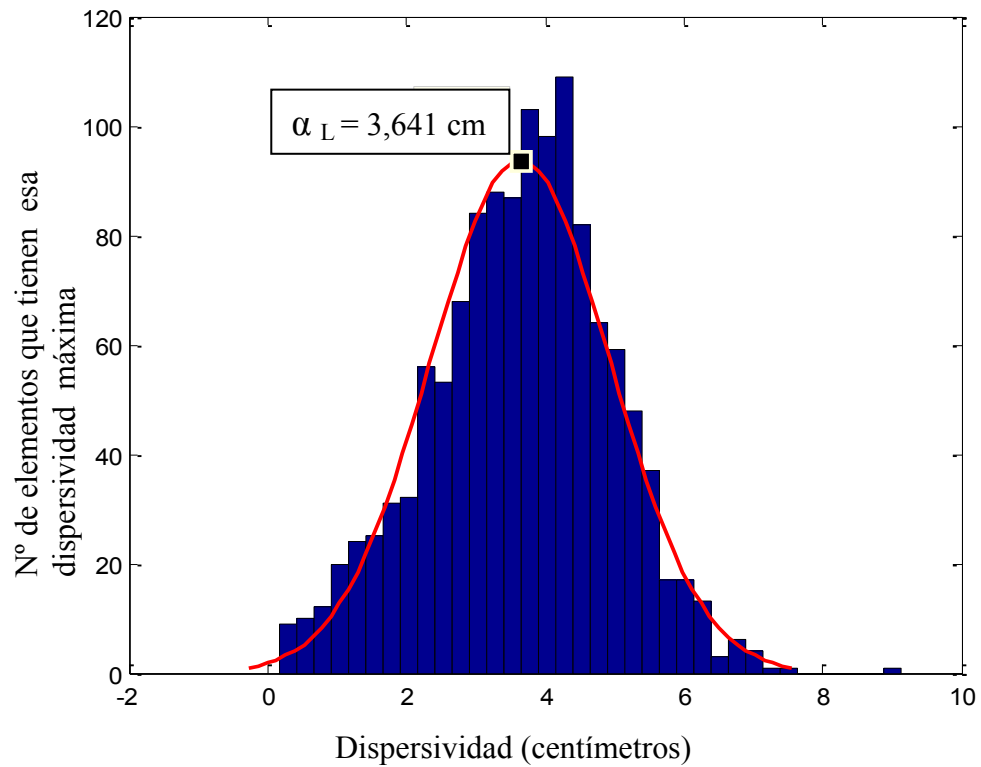
a) Material 1:



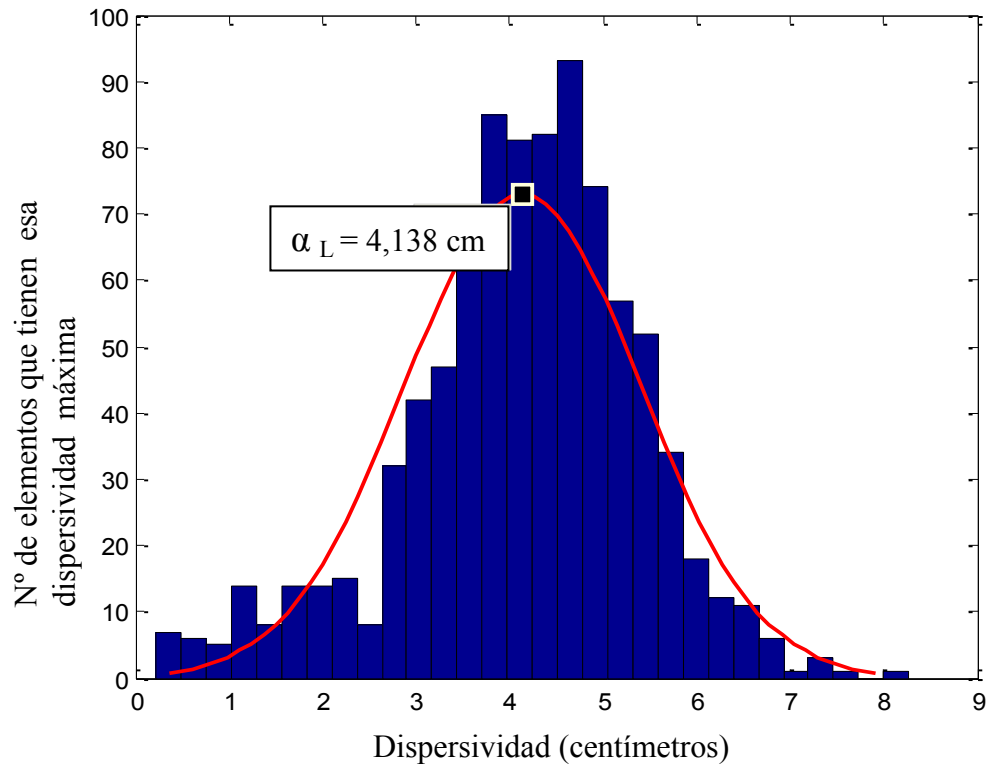
b) Material 2:



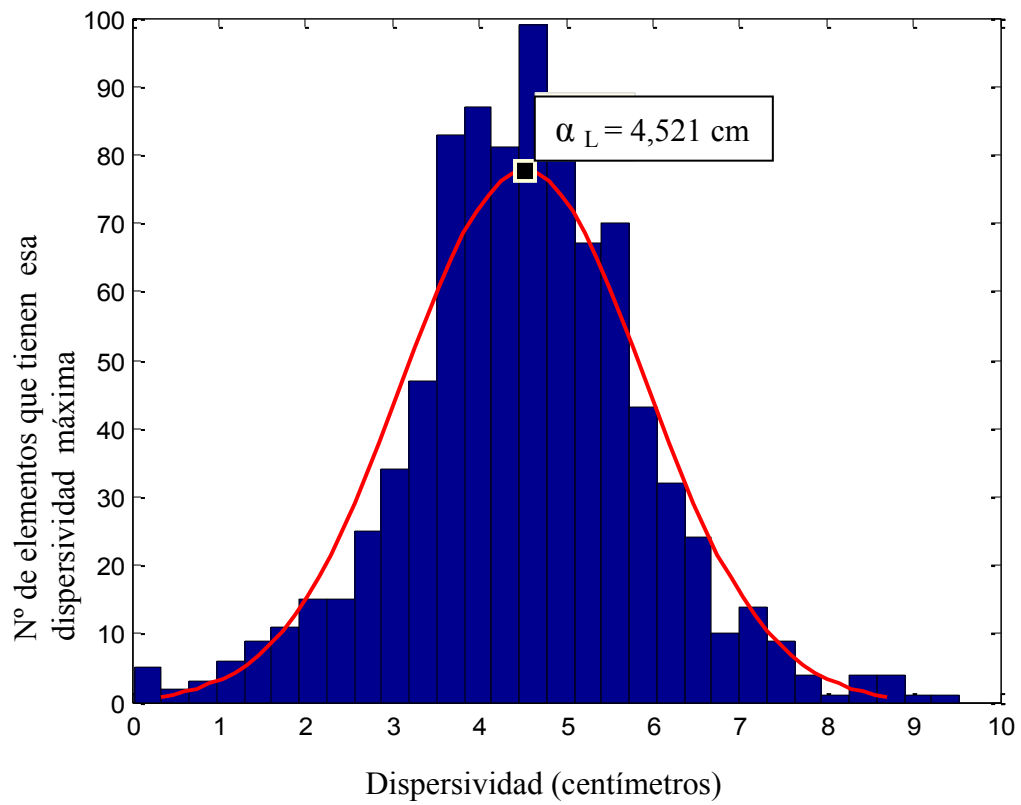
c) Material 3:



d) Material 4:



e) Material 5:



Los resultados de la dispersividad local efectiva máxima según el valor de la conductividad del material son:

<i>Material</i>	<i>Conductividad K (cm/s)</i>	<i>Dispersividad (cm)</i>	<i>Desv. estándar σ</i>
1	0,0055	2,489	1,007
2	0,0212	2,898	1,142
3	0,1032	3,641	1,302
4	0,3941	4,138	1,258
5	0,6934	4,521	1,393

Tabla 5.2 – Estimación de los valores de conductividad y dispersividad de los diferentes materiales

Tal como se aprecia en las figuras, se observa cierta relación entre el valor de la dispersividad en cm y el valor del logaritmo de la conductividad en cm/s. Puesto que consideramos la dispersividad como un parámetro con base física, no es de extrañar que tenga relación con la conductividad, igual que la porosidad lo tiene también con la conductividad. En la figura adjunta se puede observar gráficamente esta relación.

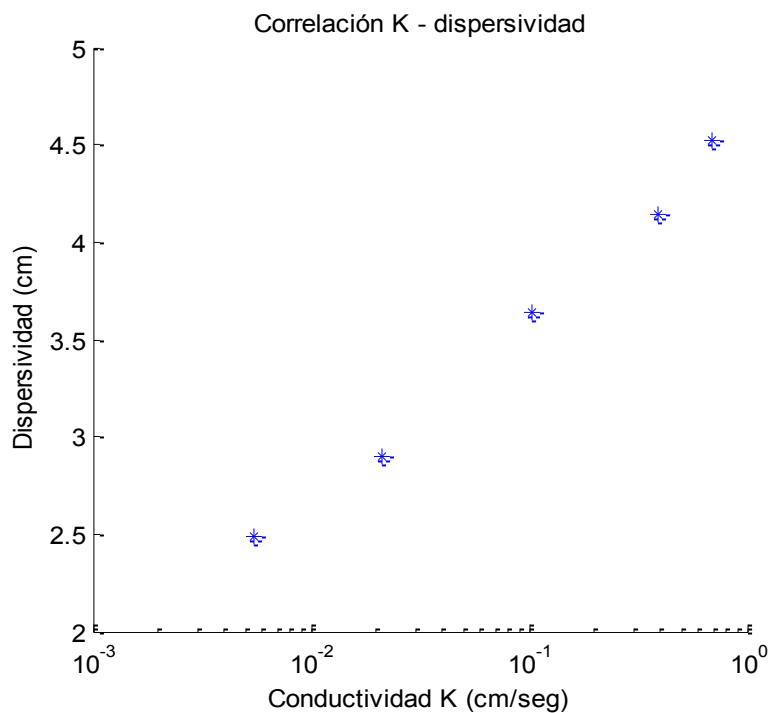


Figura 5.28 Correlación entre la dispersividad y log K

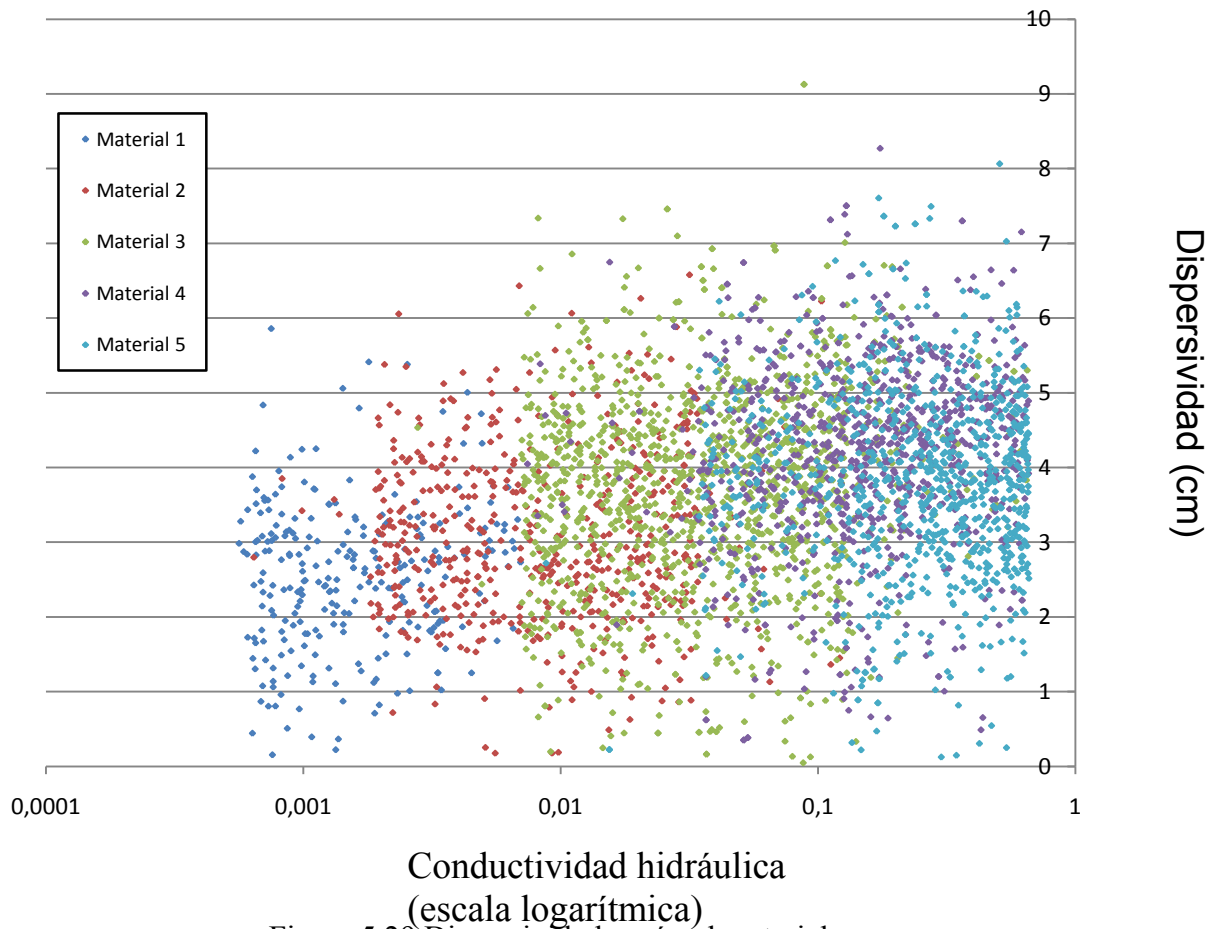


Figura 5.29 Dispersividad según el material

Al representar la totalidad de valores de dispersividad frente a la conductividad del elemento, se observa cómo la dispersión de los valores aumenta, igualmente, con el valor de la conductividad. En todo caso, esto también puede ser debido a que se dispone de un mayor número de valores de dispersividad para zonas con mayor conductividad, ya que es por donde preferentemente se mueve el penacho.

5.9 Modelación numérica utilizando los valores de dispersividad local efectiva instantánea

El siguiente paso consiste en utilizar los datos de dispersividad máxima local para realizar ensayos numéricos de flujo y transporte de las mismas características al realizado en el tanque de experimentación. Se ha optado por realizar dos ensayos numéricos diferentes y comparar los resultados obtenidos con la evolución real del penacho de trazador observado en el tanque. De esa forma, para cada punto seleccionado se obtienen tres conjuntos de datos:

- las concentraciones reales obtenidas a partir de imagen digital
- las concentraciones obtenidas a partir de un modelo numérico que utiliza el valor de la dispersividad media efectiva
- las concentraciones obtenidas a partir de un modelo numérico que utiliza la dispersividad local instantánea efectiva máxima

Los resultados de los modelos numéricos se comparan de dos formas. En una de ellas se observa la evolución de las concentraciones en un punto dado a lo largo del tiempo. Es decir, se observan las curvas de llegada en un punto, mientras que en la otra se observa la forma adoptada por el penacho en un determinado instante. En los siguientes apartados se muestran los resultados obtenidos.

5.9.1 Curvas de llegada

En las siguientes figuras se observan las tres curvas para varios puntos seleccionados, según su distancia al origen de inyección de masa:

- Puntos cercanos al origen de inyección de masas

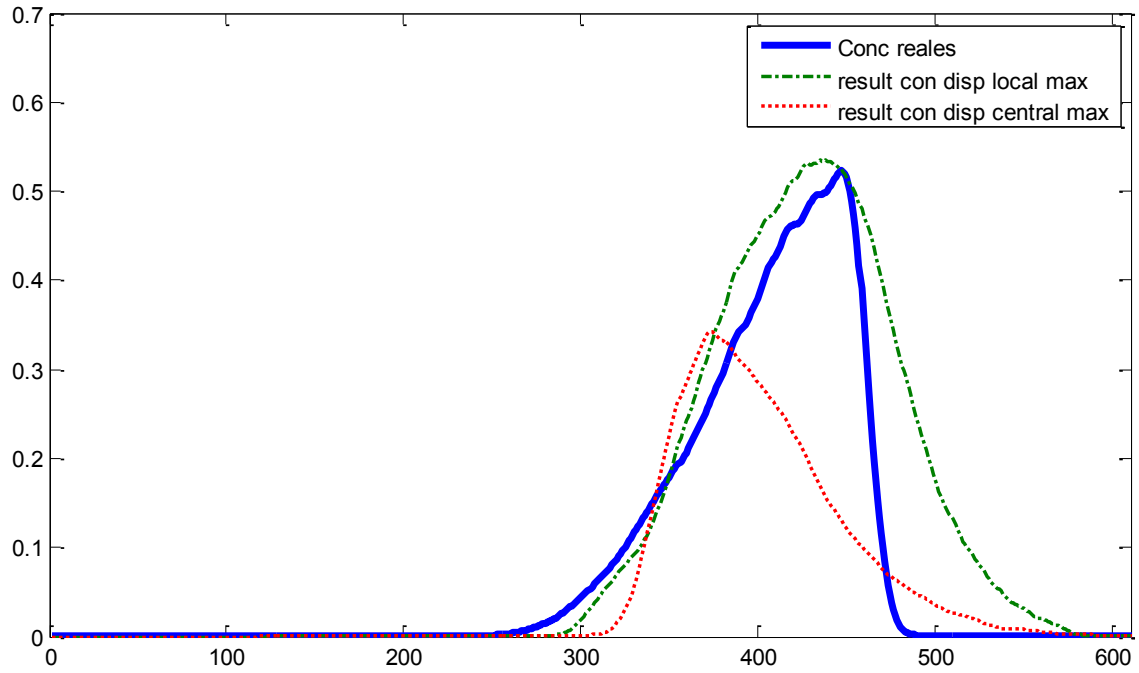


Figura 5.30 – Resultados para el elemento situado en la fila 25, columna 120

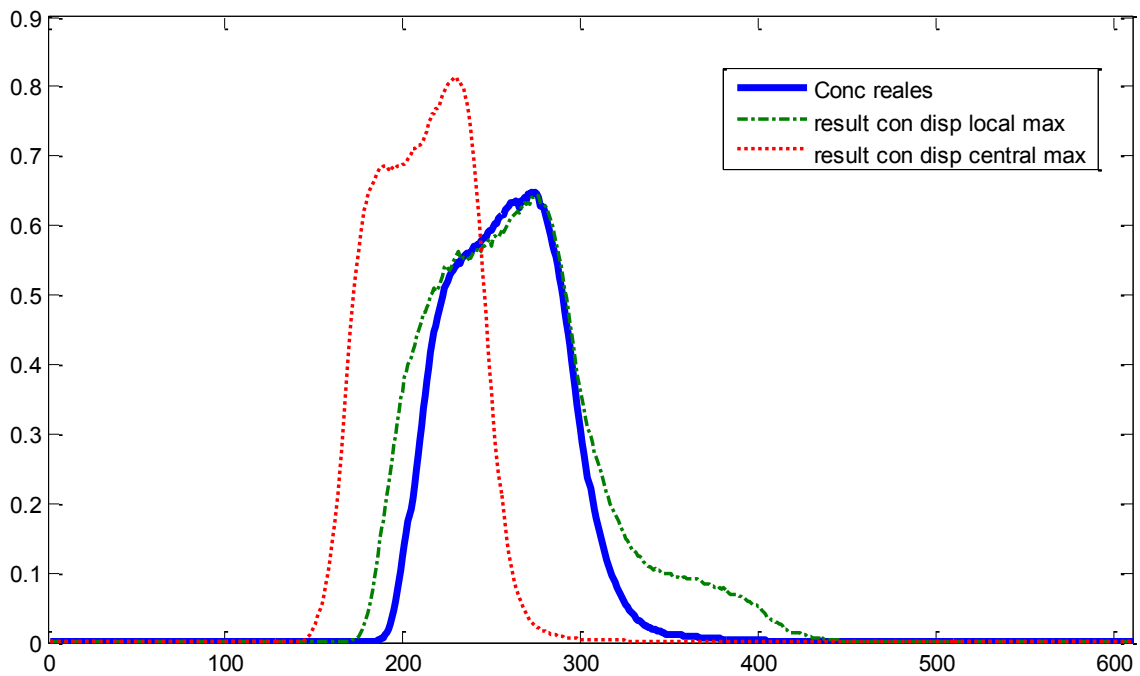


Figura 5.31 – Resultados para el elemento situado en la fila 30, columna 100

- Puntos de la zona central del tanque

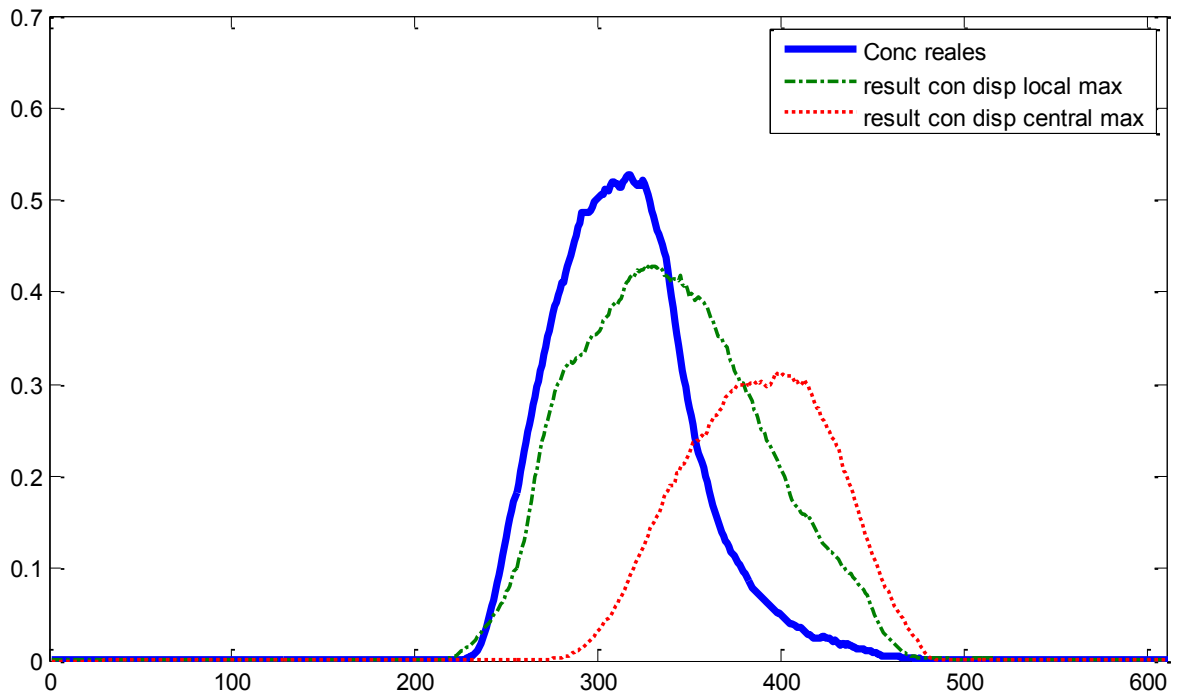


Figura 5.32 – Resultados para el elemento situado en la fila 30, columna 85

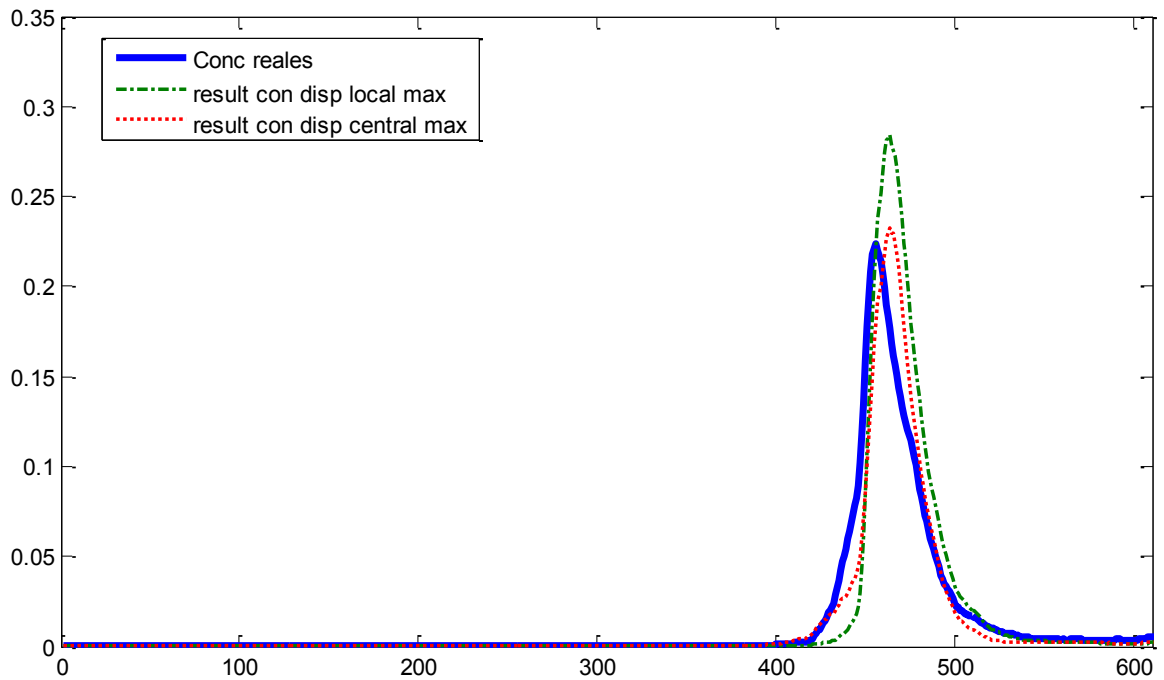


Figura 5.33 - Resultados para el elemento situado en la fila 25, columna 80

- Puntos de la zona del tanque más alejada del punto de inyección:

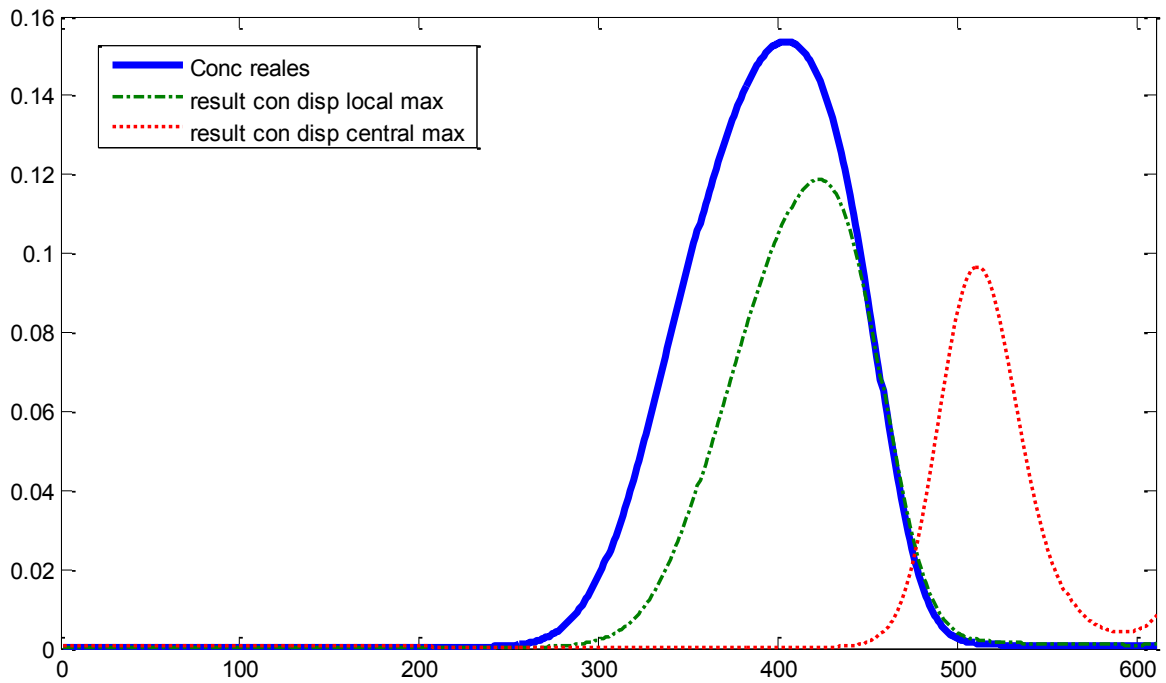


Figura 5.34 - Resultados para el elemento situado en la fila 25, columna 55

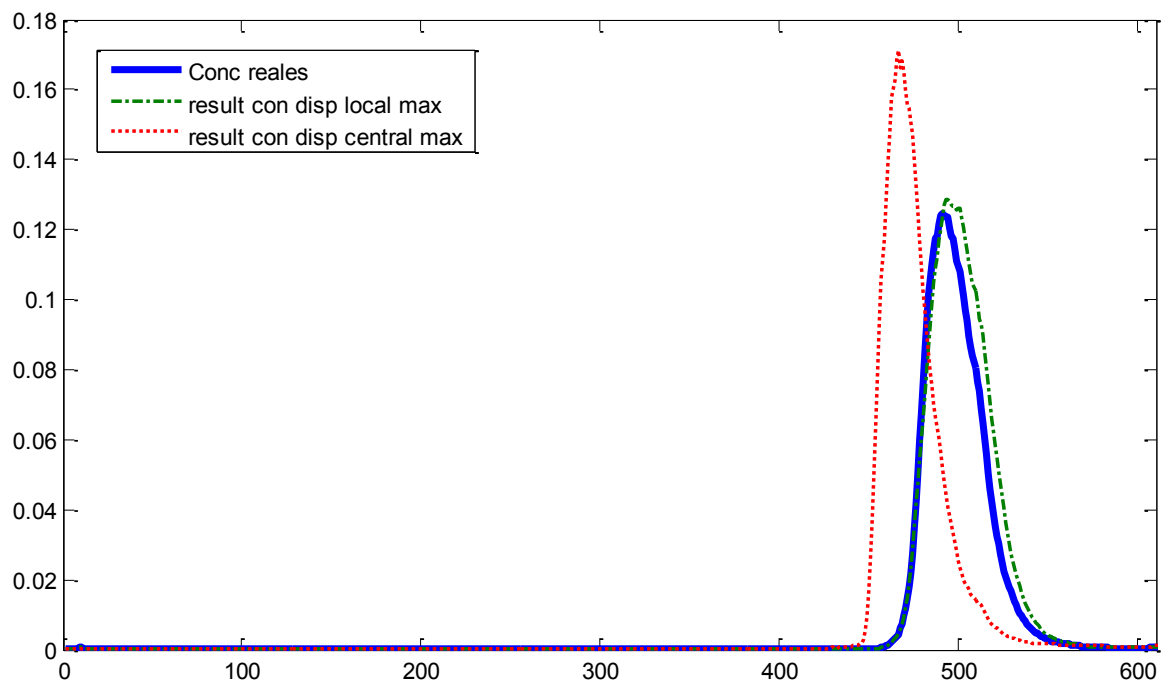


Figura 5.35 - Resultados para el elemento situado en la fila 20, columna 55

5.9.2 Mapas de concentración

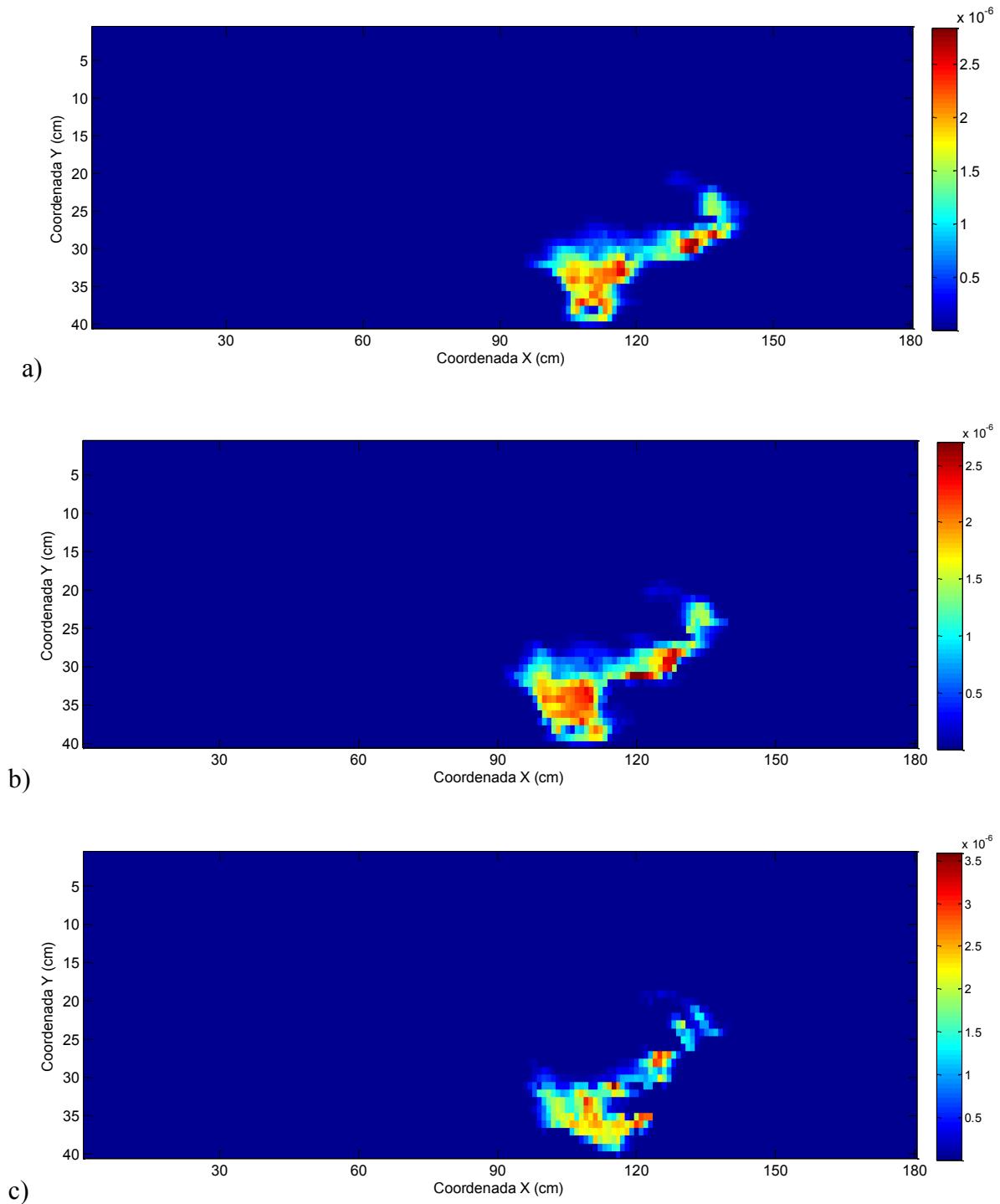


Figura 5.36 – Mapa de la evolución del penacho a los 18000 segundos. a) Obtenidas mediante imagen digital en el tanque de experimentación. b) Utilizando un modelo numérico con el valor máximo de la dispersividad local instantánea y c) Utilizando un modelo numérico con la dispersividad efectiva máxima

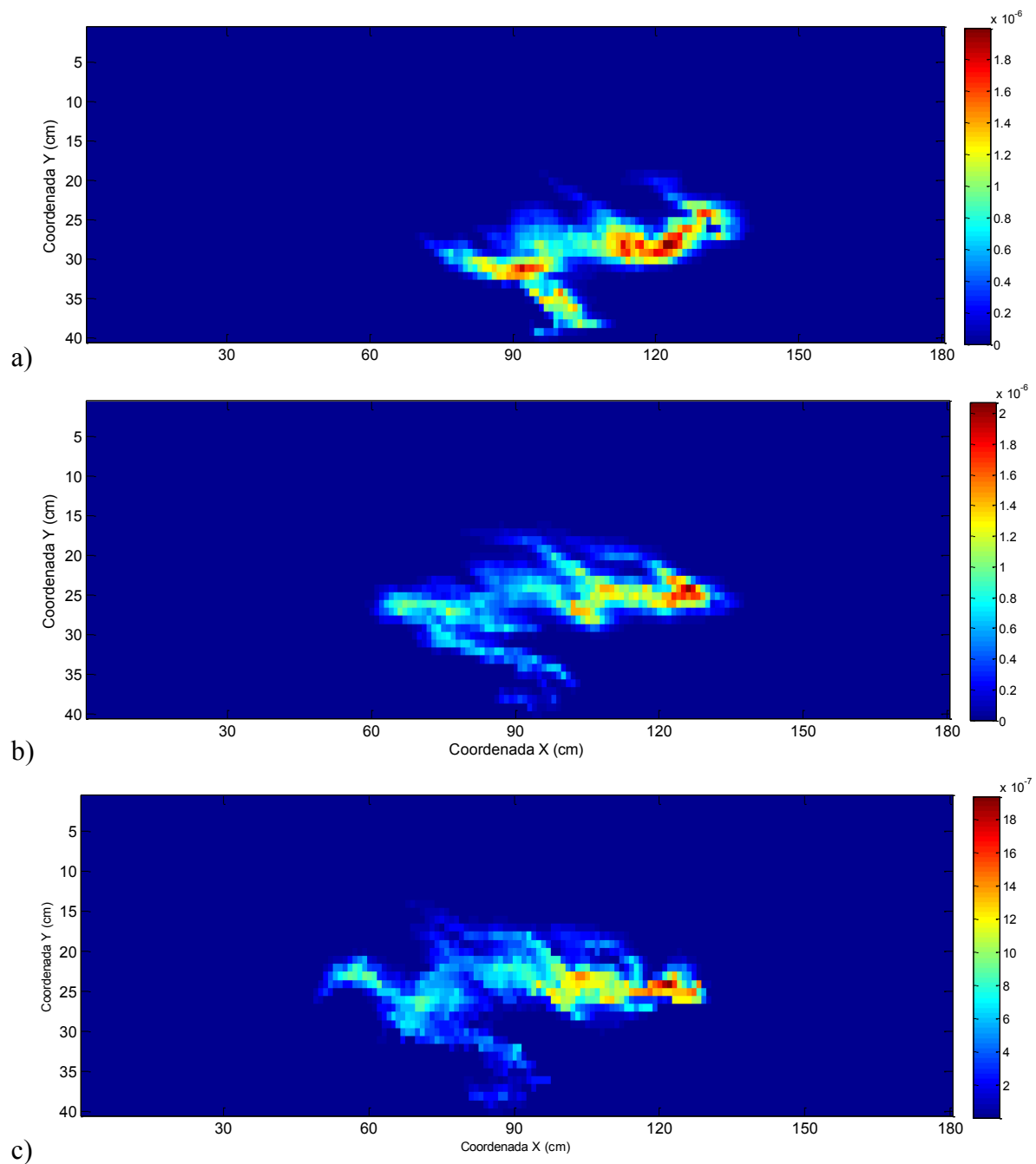


Figura 5.37 – Mapa de la evolución del penacho a los 40500 segundos. a) Obtenidas mediante imagen digital en el tanque de experimentación. b) Utilizando un modelo numérico con el valor máximo de la dispersividad local instantánea y c) Utilizando un modelo numérico con la dispersividad efectiva máxima

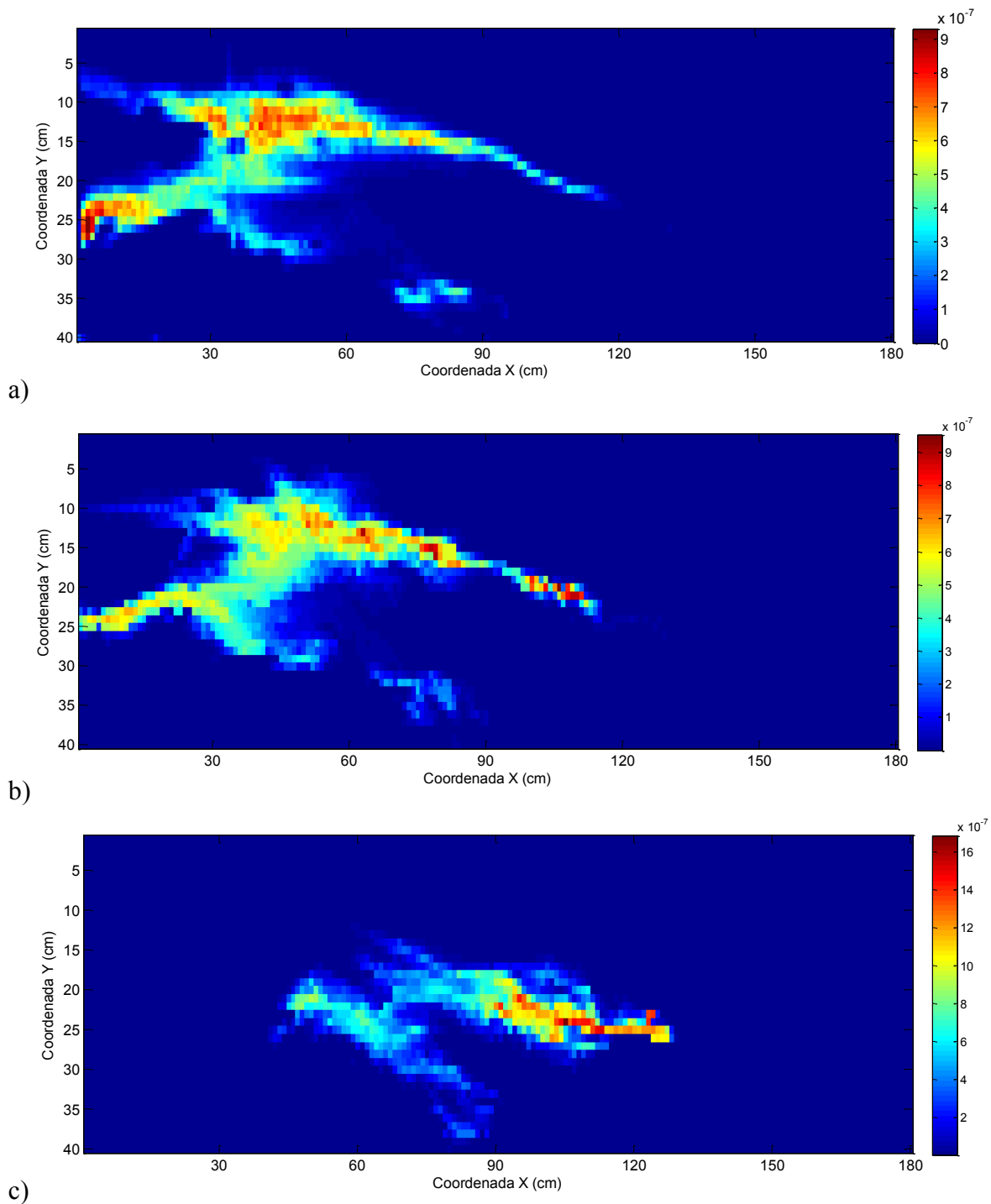


Figura 5.38 – Mapa de la evolución del penacho a los 45000 segundos. a) Obtenidas mediante imagen digital en el tanque de experimentación. b) Utilizando un modelo numérico con el valor máximo de la dispersividad local instantánea y c) Utilizando un modelo numérico con la dispersividad efectiva máxima

Con los anteriores modelos también se han realizados mapas de concentración en distintos instantes a lo largo de la evolución del penacho. En este apartado se observa el mapa de concentraciones reales para un instante dado y los resultados de los modelos numéricos utilizados en esos mismos momentos.

En las anteriores figuras se observa cómo utilizando una modelación en la que se incluyen los valores locales máximos de la dispersividad local en lugar del valor de la dispersividad efectiva máxima se mejora sensiblemente la predicción del comportamiento real de un penacho de trazador no conservativo. Esto es debido a que al utilizar el valor de la dispersividad local se recoge el efecto individual de cada elemento discretizado del medio sobre la forma del penacho. Mientras que el valor de la dispersividad efectiva recoge el efecto ponderado de todos los elementos del medio sobre el penacho. De ahí que se obtenga una predicción más detallada al utilizar el valor de la dispersividad local que al usar un mismo valor promedio para todos los elementos de la discretización.

Del mismo modo, se observa cómo utilizando una modelación numérica con la dispersividad local, se reproducen mejor algunas características de las curvas de llegada reales, como la forma no gaussiana y las colas de distribución. Del mismo modo, se aprecia que tanto la evolución temporal de las concentraciones como el pico de estas curvas están mejor representados en los resultados del modelo que utiliza el valor máximo de la dispersividad local, que en los resultados del modelo que utiliza el valor de la dispersión central.

6. Síntesis y Conclusiones

Entre el gran número de investigaciones llevadas a cabo en el ámbito de las aguas subterráneas, uno de los temas que ha centrado la atención es el proceso de dispersión de solutos en el seno de un medio poroso heterogéneo. Esta necesidad de investigación es debida tanto a las limitaciones de las ecuaciones matemáticas que lo describen como a la necesidad de describir y predecir el movimiento de contaminantes en acuíferos reales. La complejidad de este fenómeno proviene de los patrones espaciales de heterogeneidad reales y otras incertidumbres en el conocimiento del medio.

Si asumimos que la ecuación clásica de convección-dispersión (ADE) es válida a escala microscópica, podemos adoptar dos puntos de vista principales. El primero consiste en determinar valores efectivos para los parámetros en todo el dominio, de forma que la evolución del penacho pueda ser predicha por medio de la ADE. Conforme un penacho evoluciona, va atravesando diferentes heterogeneidades en su camino, por cuyo efecto va evolucionando el valor del parámetro que rige la dispersión hasta que, teóricamente, a partir de cierto momento se estabiliza. Sin embargo, distintos estudios demuestran que no siempre se alcanza un valor asintótico para la dispersividad. Esto se ha achacado tanto al efecto combinado de las distintas conductividades hidráulicas a distintas escalas como a un posible comportamiento no fickiano de la dispersión.

Otro punto de vista asume la importancia de modelar adecuadamente la conductividad hidráulica a las distintas escalas, asumiendo el comportamiento fickiano de la dispersión y asociando las desviaciones de los resultados reales frente a los teóricos a heterogeneidades de la conductividad a escalas inferiores a la de trabajo. Y, para tratar esta dificultad, utilizan conceptos como modelos de porosidad dual o transporte multitasa.

Sin embargo, ambos puntos de vista se centran en un único parámetro para explicar la desviación del comportamiento de un penacho de soluto frente a los resultados predichos por la ADE: la variabilidad de la conductividad hidráulica. En ningún caso se hace referencia o se tiene en cuenta la variabilidad de la dispersividad como parámetro asociado a cada uno de los distintos materiales que conforman un acuífero real. La táctica común es la de calcular un valor efectivo para la dispersividad en todo el dominio en que existe el penacho utilizando el método de los momentos espaciales o a partir de las curvas de llegada a ciertos puntos del medio.

Este hecho es comprensible a la luz de la dificultad que supone estimar la dispersividad como parámetro local asociado a un material concreto a partir del comportamiento del penacho al atravesarlo, eliminando la influencia en la dispersión de todos los materiales por los que ha discurrido el penacho anteriormente.

A la vista de lo anterior, se desarrolla la investigación de esta tesis cuyas principales resultados se resumen a continuación:

1) Se desarrolla y demuestra la posibilidad de estimar valores locales efectivos instantáneos de la dispersividad en un medio poroso construido en un tanque de experimentación cuasi-2D de escala intermedia. En dicho tanque se construye un medio poroso haciendo uso de distintos materiales (arenas) que constituyen un medio que reproduce patrones de heterogeneidad basados en la variabilidad espacial de la conductividad hidráulica de una formación real. En dicho tanque se llevaron a cabo varios experimentos bajo condiciones controladas, en los que se midió de forma exhaustiva los niveles piezométricos y concentraciones de trazador, utilizando para ello un sistema de toma de datos diseñado y construido especialmente para este trabajo.

Este sistema de toma de datos utiliza transductores de presión de alta precisión distribuidos homogéneamente en el tanque, de forma que se obtienen datos de la distribución de presiones de manera no invasiva y sostenida en el tiempo. Al introducir los datos de conductividad hidráulica estimados mediante un permeámetro en un modelo numérico, que pretende reproducir las condiciones del tanque, se observa que es necesario recalibrar la conductividad para reproducir las medidas de piezometría. Esto se debe a varios factores, entre los que se cuentan la compactación en el seno del tanque, el arrastre de finos de un elemento a los vecinos, o la decantación de estos mismos finos durante la construcción del medio. Además, la discretización del modelo numérico requiere introducir valores efectivos de la conductividad que representen, numéricamente, el efecto de la yuxtaposición en el tanque de zonas con distintos valores de conductividad (distintos materiales).

2) Por otra parte, se ha diseñado y puesto a punto un sistema muy preciso de estimación de concentraciones basado en fotografías digitales de alta resolución en el que se asocia la variación en los tres canales de color de la fotografía (rojo, verde y azul) de un pixel del medio con la concentración de soluto presente en ese pixel (un pixel correspondería a una zona de tamaño reducido aunque suficientemente amplia para que se pierda el efecto local de los granos sólidos del medio y otros ruidos de fondo asociados). Se obtiene un gran ajuste entre las concentraciones del trazador y los resultados del tratamiento de imagen digital. Esto proporciona no sólo un mapa de alta resolución de la distribución de concentraciones de soluto en un instante dado, sino que además permite seguir la evolución de esta distribución de concentraciones a instantes tan cercanos como se desee. La escala de los datos es perfectamente ajustable a la escala de la discretización de cualquier modelo numérico que lo represente y, permitiría estudiar el efecto desde tamaños de malla superiores (upscaling) experimentalmente. Además, este sistema tiene la ventaja de ser un sistema no invasivo, que no interfiere en el campo de flujo y que no elimina masa del tanque.

3) Los datos de concentraciones han sido procesados matemáticamente para estimar valores de las dispersividades efectivas centrales y de las dispersividades locales efectivas instantáneas asociadas a los elementos de la discretización numérica del medio. Estos últimos se han obtenido a partir de una metodología desarrollada en este trabajo que permite estimar valores locales efectivos de la dispersividad a partir de los valores locales de las concentraciones. Esta aproximación de modelación inversa se ha basado en formular el balance de masas mediante diferencias finitas en cada elemento de la discretización numérica del medio. El resultado es un mapa detallado del valor de la dispersividad efectiva asociada a cada elemento de la discretización en cada instante de la evolución del penacho.

4) Los resultados muestran el incremento del valor de la dispersividad global conforme aumenta el tiempo de viaje o la distancia recorrida. Este comportamiento concuerda con lo descrito por Pickens y Grisak (1981) y se conoce como “transporte anómalo”. Esta dependencia de la dispersividad global con la escala muestra un comportamiento no lineal, de exponente superior a 1, tal como describe Neumann (1990). Por ello, se muestran desviaciones en los resultados obtenidos mediante la modelación numérica y las curvas de llegada obtenidas mediante imagen digital. Este comportamiento, que en condiciones de campo ha sido achacado a la heterogeneidad no modelada del medio, se observa también a pequeña escala dentro del tanque de experimentación construido donde la heterogeneidad está controlada. Puesto que estas heterogeneidades siguen sin haber sido modeladas en este trabajo, se asume que este comportamiento es, en parte, debido a la heterogeneidad de escala menor a la de la escala de soporte del cálculo.

5) En esta trabajo se han definido los parámetros introducidos en la ADE de manera determinística, aunque al contrario que Bear (1972), al ser parámetros efectivos, sus valores no se han tratado como constantes, sino como variables en el tiempo para tener en cuenta la posible influencia en estos de la variabilidad del campo de concentraciones. También, de forma distinta a la teoría estocástica, el parámetro de la dispersividad no se considera como el resultado de una función aleatoria de punto (Neuman y col, 2003 y 2005), sino como una función continua susceptible de ser modelada. No obstante, las conclusiones obtenidas, podrían ser utilizadas para abordar la modelación estocástica de la dispersividad y así tener en cuenta la inevitable incertidumbre en su estimación.

6) Los valores máximos locales efectivos de la dispersividad muestran una cierta correlación con el logaritmo de la conductividad hidráulica; este resultado puede tener el sentido físico de que la tortuosidad del medio de la que deriva la conductividad hidráulica también influye en la dispersividad y, además, la dispersividad efectiva integra el efecto de la conductividad a escala inferior a la del soporte de su estimación. Por otra parte, los valores efectivos instantáneos muestran una etapa de crecimiento rápida y corta en el tiempo al llegar el penacho a la celda correspondiente, seguida de una etapa más larga de crecimiento más suave hasta alcanzar un valor máximo, que

tiende a coincidir con el instante en que se da el valor máximo del gradiente de concentraciones. Tras este máximo, el valor de la dispersividad local instantánea tiende a disminuir también de forma suave, con una bajada abrupta al abandonar el penacho la celda de cálculo. Hay que hacer notar que, aunque el valor máximo de la dispersividad y del gradiente de concentraciones coincidan en el tiempo, el valor de uno no está relacionado con el otro o, al menos, no se ha encontrado esta relación.

7) De igual forma que las curvas de llegada en cada punto tienen una evolución y características muy influenciadas por la distancia recorrida por el contaminante desde el punto de inyección, o de su posición con respecto al recorrido del centro de masas del penacho, ocurre con la evolución temporal de la dispersividad local efectiva instantánea. Así, las etapas de crecimiento y decrecimiento de los valores de dispersividad local instantánea dependen de la distancia al punto de origen. En los puntos cercanos al punto de inyección se comprueba una zona de bajada más abrupta, mientras que en los puntos más alejados puede verse una zona de crecimiento más suave y una zona de descenso menos brusca. También puede observarse cómo conforme nos alejamos del punto de inyección, el valor de la dispersividad disminuye ligeramente, aunque esto también depende de la proximidad o lejanía al centro de masas del penacho. Se observa asimismo que en la zona central del tanque el crecimiento y decrecimiento de la dispersividad es más suave, extendiéndose durante un tiempo más prolongado.

8) Respecto a la distribución espacial de los valores máximos de la dispersividad local instantánea, se aprecian varias características. El valor máximo de la dispersividad tiende a reducirse conforme nos alejamos del punto de inyección del penacho. Esto supone una diferencia importante respecto a los valores de la dispersividad global, que aumentan con la distancia recorrida. Igualmente, el valor máximo de la dispersividad tiende a reducirse conforme nos alejamos del centro de masas del penacho. No obstante, la distribución espacial, si bien presenta un cierto ruido aleatorio, muestra una cierta correlación espacial que tendría interés estudiar.

9) Los resultados obtenidos para la dispersividad no local coinciden con la teoría desarrollada por Lapidus y Amundson (1957), en el sentido de que resulta posible estimar el parámetro de dispersividad media dependiente del tiempo, lo que se ha realizado en este trabajo a partir de los momentos espaciales de la distribución de soluto según los trabajos de Freyberg (1986) y Fischer y al. (1979).

10) Barlebo y Hill (2004) sostienen que las heterogeneidades de pequeño tamaño, tales como las que forman vías de flujo preferente descritas en los estudios anteriores, no tienen gran importancia en el transporte de solutos. A la luz de los resultados obtenidos en los ensayos de flujo y transporte, es realista afirmar que la distribución de heterogeneidades, y una adecuada descripción de éstas, tiene un importante papel a la hora de modelar adecuadamente el comportamiento de los solutos. Estos autores sostienen que el modelo clásico de convección-dispersión es capaz de explicar las anomalías observadas en el penacho de soluto si se utiliza un modelo 3D calibrado con

8 parámetros diferentes. Sin embargo, en este trabajo se demuestra una mejora en la modelación utilizando la ecuación clásica con valores de la dispersividad local efectiva.

11) Finalmente se realizaron dos simulaciones numéricas del experimento de flujo y transporte seleccionado y se compararon las curvas de llegada en puntos seleccionados, y los mapas de concentraciones para varios instantes, obtenidos con los resultados del experimento en el tanque de laboratorio. Para una de las simulaciones numéricas se utilizó el valor máximo de la dispersividad global para todos los elementos del dominio, mientras que para cada uno de los elementos discretizados de la otra simulación se utilizó el valor máximo de la dispersividad local instantánea de cada elemento. Los resultados de los modelos numéricos muestran un mayor ajuste temporal con la curva real cuando se utiliza el valor máximo de la dispersividad local efectiva instantánea que utilizando el valor máximo de la dispersividad global. Sin embargo, al contrario de lo observado por Fernández-García et al. (2007), estos modelos tienden a sobreestimar las colas de las curvas de llegada, especialmente en zonas cercanas al punto de inyección de masas. Esto puede ser debido al hecho de que los modelos numéricos más utilizados para estudiar el transporte de solutos, como el MT3D o el MOC3D, no permitan incluir un valor de dispersividad diferente en cada instante de tiempo, por lo que al utilizar los valores máximos de ésta, el valor de dispersividad aplicado en los momentos iniciales de la evolución del penacho sea excesivo. Del mismo modo, queda abierta la vía de investigación relativa a cómo se comportan los valores de dispersividad al modificar el tamaño de discretización.

6.1 Conclusiones

Para la realización del presente trabajo se ha tenido una idea fundamental en mente: que una adecuada modelación del flujo y transporte de solutos en medios porosos saturados, pasa por una adecuada comprensión de los procesos fundamentales que rigen este fenómeno. Esta comprensión, por sí sola no basta si no se traduce adecuadamente a un modelo matemático para modelar la evolución de un soluto de manera realista y adecuada a los objetivos propuestos. Actualmente, la mayoría de modelos utilizados no tratan el efecto de la dispersividad de manera localizada, sino, en muchos casos, utilizando un parámetro efectivo que recoge de manera agregada la contribución de todos los materiales presentes en la zona de estudio. Debido a ello, muchas de las características observadas en las curvas de llegada reales no quedan representadas en los modelos numéricos actuales.

En el presente trabajo se ha demostrado, basándose en un experimento controlado de laboratorio, que una modelación utilizando el valor local efectivo del parámetro de dispersividad logra una mejor predicción del comportamiento de las curvas de llegada y distribuciones de concentraciones de los ensayos realizados en laboratorio. Esta mejora se observa tanto en la mejor predicción del tiempo de llegada,

como de la duración del paso del penacho por el punto. Pero también se observa algo más importante en los resultados, y es la mejora en la modelación de características de las curvas reales, como las colas de la curva de llegada o la forma no gaussiana de estas.

De la misma manera, se observa que la dispersividad es un parámetro físico relacionado con la conductividad hidráulica de los materiales que constituyen el tanque de laboratorio. Además, los resultados muestran con claridad que la modelación de la variabilidad espacial de la dispersividad puede mejorar sustancialmente los resultados del transporte y, a la vista de los gráficos obtenidos, esta variabilidad espacial es susceptible de un análisis estructural que debería relacionarse con el de la conductividad hidráulica. Se ha visto, igualmente, que el valor de la dispersividad local efectiva no es constante en el tiempo; tiene un crecimiento inicial cuando el soluto llega a la zona donde se determina, alcanza un valor máximo que depende, entre otras cosas, el valor del gradiente de concentración en el instante previo. Y tiene un posterior decrecimiento a partir del instante de gradiente de concentraciones máximo. Esto lleva a concluir que la dispersividad no debe considerarse como un parámetro constante, sino que la posibilidad de que varíe en el tiempo, dependiendo de la historia previa de valores y gradientes locales de concentraciones pueda mejorar los resultados de la solución de la ecuación del transporte.

Algunos modelos existentes, como los modelos de porosidad dual o los modelos estocásticos, también son capaces de reproducir estas características. Sin embargo, que el uso de un recurso aparentemente sencillo conceptualmente, como modelar la variabilidad espacial de la dispersividad permita un buen ajuste de observaciones como las del experimento expuesto en esta tesis, abre una nueva vía de aproximación y de interpretación física del fenómeno de la dispersión. En la bibliografía científica consultada, hasta la fecha no se ha tratado de modelar el movimiento de un penacho de trazador utilizando datos reales para estimar la dispersividad local efectiva instantánea en un medio heterogéneo.

Todas estas conclusiones se basan en los datos obtenidos mediante un tanque de laboratorio en el que es posible medir directamente los potenciales hidráulicos en una malla de transductores de presión y estimar mapas de concentraciones de alta resolución. Este tanque es, hasta el punto que tenemos conocimiento, único en el conjunto de instituciones de I+D españolas. En este trabajo, además, se ofrecen varias soluciones constructivas originales para obtener un mejor rendimiento a la hora de estimar las concentraciones de soluto en el interior del medio. Aunque el uso de tanques de experimentación en laboratorio haya estado ligado a la investigación hidrogeológica desde hace décadas, este trabajo abre la vía a una nueva utilidad de estos dispositivos: la de servir como herramienta de apoyo en la investigación de los valores de la dispersividad local o del comportamiento temporal de ésta. No obstante, como se ha indicado en otros capítulos de la tesis, la utilidad de este tipo de experimentación, con las posibilidades de la instrumentación y medios informáticos actuales, puede ir mucho más allá, y especialmente en el estudio de flujos de densidad variable sujetos a efectos

gravitatorios, transporte multifase, movimiento de NAPLs, transporte reactivo y otros problemas con interacción geoquímica.

En este trabajo se demuestra una alternativa para el tratamiento de la dispersión basada en la modelación espacial de la dispersividad y se apunta a la posible consideración de su variabilidad temporal. Estas conclusiones enlazan, sin ser independientes, con los trabajos de otros autores centrados en conseguir una modelación más precisa de la dispersión recurriendo a la modelación de alta resolución del campo de conductividad hidráulica o al uso de formulaciones de la dispersividad efectiva que tienen en cuenta la “historia” local reciente de paso del contaminante.

6.2 Futuras líneas de investigación

En la investigación presentada en este documento se ha construido un modelo de laboratorio instrumentado que ha permitido la estimación de mapas de dispersividad local efectiva instantánea a partir del conocimiento exhaustivo de los campos de velocidad del fluido y de los mapas de concentraciones. Todo ello se ha hecho para un determinado experimento con trazador no-reactivo y habiendo hecho una selección de las escalas soporte tanto para la calibración de las relaciones color-concentración como para los modelos numéricos empleados. Así, surgen de manera natural diversas cuestiones, por ahora no resueltas, que abren futuras líneas de investigación basadas en el uso del prototipo de laboratorio diseñado y construido en esta tesis. Estas nuevas líneas incluyen entre otras las siguientes:

- a) Modificar las condiciones de flujo y transporte en el tanque para analizar los cambios en el comportamiento local de la dispersividad y tratar de entender y cuantificar hasta que punto depende del medio físico y del tamaño de la discretización.
- b) Analizar los efectos de escala: Estudiar de qué forma influye el tamaño de la discretización en la dispersividad local efectiva instantánea.
- c) Analizar la posibilidad de incorporar la variación temporal de la dispersividad en la modelación. Podría analizarse la obtención de una expresión analítica que permita modelar el comportamiento de la dispersividad local efectiva instantánea a partir de la distribución local de las variables de velocidad instantánea, concentración instantánea y gradientes.
- d) Modificaciones en el tanque de experimentación: Distintas configuraciones de heterogeneidad del medio. Materiales de relleno transparentes que permitan

integrar la concentración en el sentido del espesor. Utilización de trazadores con diferentes características (decaimiento, adsorción, reactividad...) estudiando los problemas asociados a la sorción y, más avanzado, al transporte reactivo.

- e) Simulación numérica del experimento real utilizando valores diferentes de la dispersividad local instantánea en cada instante de tiempo.

- f) Análisis de los patrones de variabilidad espacial de las dispersividades locales.

Para todas estas posibles líneas de investigación se dispone ya de una herramienta fundamental como es el tanque de experimentación existente en el laboratorio de Área de Modelación Matemática del Flujo y Transporte en el Subsuelo (FLUTMAS), en el seno del Instituto Universitario de Investigación de Ingeniería del Agua y del Medio Ambiente de la UPV (IIAMA), y la experiencia adquirida a lo largo de la construcción de éste, y la ejecución e interpretación de los ensayos realizados durante la realización de esta tesis. Esta experiencia ha aportado, y puede aportar aun más, una importante base de datos de manera sencilla y precisa, útiles tanto para investigaciones propias como para contrastar otras investigaciones numéricas que se realicen en base a modelación matemática en ordenador. Así, otra tarea a realizar, de gran utilidad, es la organización de los datos que se han ido obteniendo de las experiencias realizadas como base para que otros investigadores puedan tener acceso y contribuir al progreso en las direcciones apuntadas. El tanque de experimentación muestra la evolución de un penacho de soluto real en un medio real, revelando detalles del proceso que pueden quedar enmascarados por las simplificaciones realizadas en las ecuaciones constitutivas o en los modelos numéricos. Esta capacidad de mostrar el transporte de solutos tal como realmente es, es la diferencia fundamental que hace valiosos los experimentos en medios físicos y la razón por la que deberían ser utilizados en investigaciones de flujo y transporte en las que a menudo se encuentran infrutilizados.

7. Referencias

Aeby, P., J. Forrer, C. Steinmeier, and H. Flühler. (1997) "Image analysis for determination of dye tracer concentration in sand columns *Soil Sci. Soc. Am. J.* 61, 33–35.

Aeby, Schultze, U. (2001) "Fluorescence Imaging of Tracer Distributions in Soil Profiles", *Environ. Sci. Technol.*, 35 (4), 753–760

Anderson. M. P. (1979). "Using models to simulate the movement of contaminants through groundwater flow systems", *Crit. Rev. Environ. Controls* 9(2), 97-156.

Aris, R. (1956) "On the Dispersion of a Solute in a Fluid Flowing through a Tube"; *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 235, N° 1200 pp. 67-77

Bachmat, Y.; Bear, J. (1967) "The General Equations of Hydrodynamic Dispersion in Homogeneous Isotropic, Porous Media" *Journal of Geophysical Research*, 69 (12), 2561-2567

Barlebo, H. C., M. C. Hill, and D. Rosbjerg (2004), "Investigating the Macrodispersion Experiment (MADE) site in Columbus, Mississippi, using a three-dimensional inverse flow and transport model" *Water Resour. Res.*, 40, W04211, doi:10.1029/2002WR001935.

Barth, G. R., T. H. Illangasekare, and H. Rajaram (1996), "Use of tracer techniques to characterize non aqueous phase liquid entrapment in heterogeneous aquifers", *Eos Trans. AGU*, 77(46), Fall Meet. Suppl., F243.

Barth, G.R., Hill, M.C., Illangasekare, T.H. and Rajaram, H., (2001). "Predictive modeling of flow and transport in a two-dimensional intermediate-scale, heterogeneous porous medium". *Water Resour. Res.* 37 10, pp. 2503–2512.

Barth, G.R., Illangasekare, T.H., Hill, M.C., Rajaram, H., (2001) "A new tracer-density criterion for heterogeneous porous media, *Water Resour. Res.* 37, 21–31

Bear, J. (1960) "Scales of viscous analog models for groundwater studies"; *Proc. Amer. Soc. Civil Eng. Hydraul. Div.* n° HY2, 86, 11-23

Bear, J., (1972). "Dynamics of Fluids in Porous Media". , American Elsevier Publishing, New York

Berkowitz B, Cortis A, Dentz M, Scher H. "Modeling non-Fickian transport in geological formations as a continuous time random walk". *Rev Geophys* (2006)

Berkowitz, B. and Scher, H., (1995) "On characterization of anomalous dispersion in porous and fractured media". *Water Resour. Res.* 31 6, pp. 1461–1466.

- Berkowitz, B. Scher, H., Silliman, SE. (2000) “Anomalous transport in laboratory-scale, heterogeneous porous media“, *Water Resources Research* 36 (1): 149–158
- Boggs JM, Beard LM, Long SE, McGee MP, MacIntyre WG, Antworth CP, Stauffer TB. “Database for the second macrodispersion experiment (MADE-2)”. Tech. Rep. TR-102072, Electric Power Res. Inst., Palo Alto, California. (1993).
- Chao, H.-C., H. Rajaram, and T. H. Illangasekare (1996) “Experimental and computational investigation of radial flow tracer tests in heterogeneous formations”, *Eos Trans. AGU*, 77(46), Fall Meet. Suppl., F275
- Cushman JH, Ginn TR. (1993) “Nonlocal dispersion in media with continuously evolving scales of heterogeneity”. *Transp Porous Media* 13(1):123–38
- Dagan G. (1984) “Solute transport in heterogeneous formations”. *J Fluid Mech* 1984;145:151–77.
- De Josselin de Jong, G. (1958) “Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits”. *Trans. Amer. Geophys. Union*, 39, 67-74
- Dentz M, Tartakovsky DM. “Self-consistent four-point closure for transport in steady random flows”. *Phys Rev E* 2008;77(6)
- Dentz, M., Berkowitz, B. (2003) “Transport behavior of a passive solute in continuous time random walks and multirate mass transfer”. *J. of Cont. Hydrology*, 39(5), 1111, doi:10.1029/2001WR001163, 2003
- Doherty J (2000), “PEST - Model-independent parameter estimation. User’s manual”. Watermark Computing. Australia
- Doherty J, Brebber L and Whyte P (1994), “PEST - Model-independent parameter estimation. User’s manual”. Watermark Computing. Australia
- Ewing, R.P., R. Horton. (1999). “Discriminating dyes in soil with color image analysis” *Soil Sci. Soc. Am. J.* 63, 18–24.
- Feller, W. (1958) “An introduction to Probability Theory and its applications”, John Wiley Ed., New York, 1958
- Fernández-García y Gómez-Hernández (2007) “Impact of upscaling on solute transport: travel times, scale-dependence of dispersivity and uncertainty”, *Water Resources Research*, Vol. 42, W02423, doi: 10.129/2005WR004727, 2007
- Fischer, H. B., et al. “Mixing in Inland and Coastal Waters”, Academic, San Diego, Calif., 1979.
- Forrer a,c , A. Papritz; (2000) “Quantifying dye tracers in soil profiles by image processing”; *European Journal of Soil Science*, Volume 51 (2), 313 – 322

- Forrer, I., R. Kasteel, M. Flury, and H. Flühler (1999), “Longitudinal and Lateral Dispersion in an Unsaturated Field Soil, Water Resour”. Res., 35(10), 3049–3060.
- Freyberg, D. L., “A natural gradient experiment on solute transport in sand aquifer, 2, Spatial moments and the advection and dispersion of nonreactive tracers”, Water Resour. Res., 22(13), 2031-2046, 1986.
- Fried, J. J. (1975) “Groundwater pollution”, Elsevier, Amsterdam, 330 pp.
- Gaganis, P., Skouras, E.D. , Theodoropoulou, M.A. (2004) “On the evaluation of dispersion coefficients from visualization experiments in artificial porous media”, Journal of Hydrology, 307, (1-4), 79-91
- Gelhar, L.W., and C.L. Axness. (1983). “Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers”. Water Resour. Res. 19:161–180.
- Gelhar, L.W., C. Welty, and K.R. Rehfeldt. (1992). “A critical review of data on field scale dispersion in aquifers”. Water Resour. Res. 28:1955–1974.
- Glass, R.J., Steenhuis, T.S. and Parlange, J.-Y., (1988). “Wetting front instability as a rapid and far-reaching hydrologic process in the vadose zone”. J. Contam. Hydrol. 3, pp. 207–226.
- Goswami, R. R., Ambale, B., Clement, T. P., (2009) “Estimating Errors in Concentration Measurements Obtained from Image Analysis”, Vadose Zone J. 8(1): 108 - 118.
- Han, N.W., J. Bhakta, and R.G. Carbonell. (1985). “Longitudinal and lateral dispersion in packed beds: Effect of column length and particle size distribution”. AIChE J. 31:277–288.
- Hatano, Y., Hatano, N. (1998) “Dispersive transport of ions in column experiments: an explanation of long-tailed profiles” Water Resour. Res. 34 5, pp. 1027–1033.
- Hoffman, F., Ronen, D. and Pearl, Z., (1996). “Evaluation of flow characteristics of a sand column using magnetic resonance imaging”. J. Contam. Hydrol. 22, pp. 95–107
- Imamura M, Koizumi M (1955) “Irreversible photobleaching of the solution of fluorescent dyes. I. Kinetics studies on the primary process.” Bull Chem Soc Jpn 28:117–124
- Koch DL, Brady JF (1988). “Anomalous diffusion in heterogeneous porous media”. Phys Fluids 31(5):965–73.
- Lallemand-Barres, Peaudecerf P., (1978) “Recherche des relations entre la valeur de la dispersivite macroscopique d’un milieu aquifere, ses autres caracteristiques et les conditions de mesure. Etude bibliographique”. *Bull. BRGM., section I11* no. 4, 277-284.

- Leutz W, Ricka J (1996) "On light propagation through glass bead packings", *Optics Communications* 126, (4-6), 260-268
- Levy, M., Berkowitz, B.(2003) "Measurement and analysis of non-Fickian dispersion in heterogeneous porous media" *Journal of Contaminant Hydrology* 64 (3-4): 203-226
- Lipiec, J., Hatano, R. (1998) "The fractal dimension of pore distribution patterns in variously-compacted soil", *Soil and Tillage Research* 47 (1-2): 61-66
- Logan, J.D. (1996). Solute transport in porous media with scale-dependent dispersion and periodic boundary conditions. *J. Hydrol.* 184:261–276
- Löhmannsröben, H.-G., and T. Roch. (2000). "In situ laser-induced fluorescence (LIF) analysis of petroleum product-contaminated soil samples". *J. Environ. Monit.* 2:17–22
- Maiera RS, Kroll DM, Peters JF, Davis HT. (2000) "Pore-scale simulation of dispersion". *Phys Fluids* 12(8):2065–79.
- McNeil, J.D., Oldenborger, G.A. (2006), "Quantitative imaging of contaminant distributions in heterogeneous porous media laboratory experiments", *Journal of Contaminant Hydrology* 84 (1-2), 36-54
- Morales-Casique E, Neuman SP, Guadagnini A. (2006) "Nonlocal and localized analyses of nonreactive solute transport in bounded randomly heterogeneous porous media: computational analysis". *Adv Water Resour* 29(8):1399–418
- Morris, C., and S.J. Mooney. (2004) "A high-resolution system for the quantification of preferential flow in undisturbed soil using observations of tracers" *Geoderma* 118,133–143.
- Neuman SP, Di Federico V. (2003) "Multifaceted nature of hydrogeologic scaling and its interpretation". *Rev Geophys* 41(3):1014.
- Neuman SP, Tartakovsky DM, (2009) "Perspective on theories of non-Fickian transport in heterogeneous media"; *Advances in Water Resources* 32:670–680
- Neuman SP, Zhang Y-K. (1990) "A quasi-linear theory of non-Fickian subsurface dispersion: 1. Theoretical analysis with application to isotropic media". *Water Resour Res* 26(5):887–902.
- Neuman SP. (2005) "Trends, prospects and challenges in quantifying flow and transport through fractured rocks". *Hydrogeol J* 13(1):124–47.
- Oostrom, M., Dane, J. H., Wietsma, T. W., (2007) "A Review of Multidimensional, Multifluid, Intermediate-Scale Experiments: Flow Behavior, Saturation Imaging, and Tracer Detection and Quantification", *Vadose Zone J.*, 6: 610 - 637.
- Oostrom, M., Hofstee, C., Lenhard, R.J. (2003) "Flow behavior and residual saturation formation of liquid carbon tetrachloride in unsaturated heterogeneous porous media", *J. Contam. Hydrol.* 64, 93–112.

- Oppenheim I, Shuler KE, Weiss GH. (1977) “Stochastic processes in chemical physics: the master equation”. Cambridge, Mass: MIT Press.
- Pachepsky, Y., D. Benson, and W. Rawls. (2002). “Simulating scale-dependent solute transport in soils with the fractional advection-dispersion equation”. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 64:1234–1243.
- Pang, L., Hunt, B. (2001), “Solutions and verification of a scale-dependent dispersion model”, *J. Contam. Hydrol.* **53**, 21–39
- Persson, M. (2005) “Accurate Dye Tracer Concentration Estimations Using Image Analysis”, *Soil Sci. Soc. Am. J.* 69: 967 - 975.
- Pickens, JF; Grisak, GE (1981) “Scale-Dependent Dispersion in a Stratified Granular Aquifer”, *Water Resources Research* Vol 17, No 4, p 1191-1211
- Pollock DW (1988), “Semianalytical computation of path lines for finite difference models”. *Ground Water* (26)6: 743-750
- Pollock DW (1994), “User’s Guide for MODPATH/MODPATH-PLOT, Version 3: A particle tracking post-processing package for MODFLOW, the U. S. Geological Survey finite difference groundwater flow model”. U. S. Geological Survey, Open-file report 94-464
- Pollock DW(1989), MODPATH (version 1.x)- “Documentation of computer programs to compute and display pathlines using results from the U. S. Geological Survey modular three-dimensional finite-difference ground-water model”. U. S. Geological Survey Openfile report 89-381
- Porro, I., P.J. Wierenga, and R.G. Hills. (1993). “Solute transport through large uniform and layered soil columns”. *Water Resour. Res.* 29:1321–1330.
- Richard, F.A., and M.J.L. Robin. (2000). “A non-intrusive technique for investigating contaminant dispersion in porous media using image analysis”. p. 213–218. *In* A. Dassargues (ed.) *Tracers and modelling in hydrogeology*. Proc. of the TraM’2000 Conference, Liège, Belgium. IAHS no. 262. Int. Assoc. of Hydrological Sci., Wallingford, Oxfordshire, UK.
- Schincariol, R.A. and Schwartz, F.W., (1990). “An experimental investigation of variable density flow and mixing in homogeneous and heterogeneous media”. *Water Resour. Res.* **26** 10, pp. 2317–2329
- Schincariol, RA., Herderick, EE., Schwartz, FW., (1993), “On the Application of Image Analysis to Determine Concentration Distributions in Laboratory Experiments”, *Journal of Contaminant Hydrology*, 12 (3), 197-215
- Schlesinger MF. Random processes. (1996) “Encyclopedia of applied physics”, vol. 16. Hoboken (NJ): John Wiley

- Schwarze, H., U. Jaekel, and H. Vereecken. (2001). "Estimation of macrodispersion by different approximation methods for flow and transport in randomly heterogeneous media". *Transp. Porous Media* 43:265–287.
- Silliman, S. E., Konikow, L. F., Voss, C. I. (1987) "Laboratory investigation of longitudinal dispersion in anisotropic porous media", *Water Resour. Res.*, 23(11), 2145-2151, 1987
- Silliman, S.E.; Simpson, E. S., (1987), "Laboratory Evidence of the Scale Effect in Dispersion of Solutes in Porous Media", *Water Resources Research*, 23 (8), 1667-1673
- Slichter, C. S. (1905). "Field measurements of the rate of underground water", *U.S. Geol. Surv. Water Supply Pap. 140*, pp. 9-85.
- Song L, Hennink E, Young I, Tanke H (1995) "Photobleaching kinetics of fluorescein in quantitative fluorescence microscopy". *Biophys J* 68(6):2588–2600
- Stadler, D., M. Stähli, P. Aeby, H. Flühler. (2000). "Dye tracing and image analysis for quantifying water infiltration into frozen soils" *Soil. Sci. Soc. Am. J.* 64, 505–516
- Sudicky EA, Cherry JA, Frind EO. (1983) "Migration of contaminants in groundwater at a landfill: a case study. 4. A natural-gradient dispersion test". *J Hydrol* 1983;63(1–2):81–108.
- Taylor, G. I. (1921) "Diffusion by continuous movements" *Math. Soc.Ser.* 2, 20, 196-212
- Taylor, G. I. (1953) "Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube," *Proc. Roy. Soc. A* N° 1137, 219, 186-203
- Ursino, N., Gimmi, T., Fluhler, H., (1999), "The effect of lower scale anisotropy on transport in unsaturated porous media". *Modelling of transport processes in soils*, Wageningen Press, pp 174-183
- Ursino, N., Gimmi, T., Fluhler, H., (2001) "Combined effects of heterogeneity, anisotropy, and saturation on steady state flow and transport: a laboratory sand tank experiment", *Water Resour. Res.* 37, 201–208.
- Vanderborght, J., Gähwiller, P. (2002) "Imaging Fluorescent Dye Concentrations on Soil Surfaces" *Soil Science Society of America Journal* 66:760-773
- Wang, H., Persaud, N. And Zhou, X. (2006). "Specifying Scale-dependent Dispersivity in Numerical Solutions of the Convection–Dispersion Equation". *Soil Sci Soc Am J* 70:1843-1850. DOI: 10.2136/sssaj2005.0166
- Welty, C., Elsner, M. M. (1997)"Constructing correlated random fields in the laboratory for observations of fluid flow and mass transport" *J. Hydrol.*, 202(1-4), 192-211.

Wheatcraft, S.W., S.W. Tyler. 1988. "An explanation of scale-dependent dispersivity in heterogeneous aquifers using concepts of fractal geometry". *Water Resour. Res.* 24:566–578.

Yates, S.R. (1990). "An analytical solution for one-dimension transport in heterogeneous porous media". *Water Resour. Res.* 22:952–964.

Yu, Z., Schwartz, F. (1999) "Determining concentration fields of tracer plumes for layered porous media in flow-tank experiments", *Hydrogeology Journal* 7 (2), 236-240

Zhang Y, Benson DA, Meerschaert MM, LaBolle EM. (2007) "Space-fractional advection–dispersion equations with variable parameters: diverse formulas, numerical solutions, and application to the macrodispersion experiment site data." *Water Resour Res*; 43:W05439.

Anexo A Descripción del modelo físico construido y funcionamiento.

A.1 Descripción general del tanque de experimentación.

Las experiencias de flujo y transporte a realizar se llevaron a cabo en un tanque construido con planchas de metacrilato, de dimensiones generales de 1400 mm de longitud, por 400 mm de altura, por 200 de profundidad. En su interior queda un espacio vacío de 1400 x 400 x 50 mm en el que se introduce el medio utilizando el método de relleno húmedo. Para su relleno, el medio se discretizó en elementos de 25 mm de longitud y 20 de altura y 50 de profundidad

A.1.1 Montaje de la pared lateral

En primer lugar se colocaron los refuerzos necesarios en las placas destinadas a formar las paredes laterales, tanto laterales (Figura A.1) como superiores (Figura A.2)

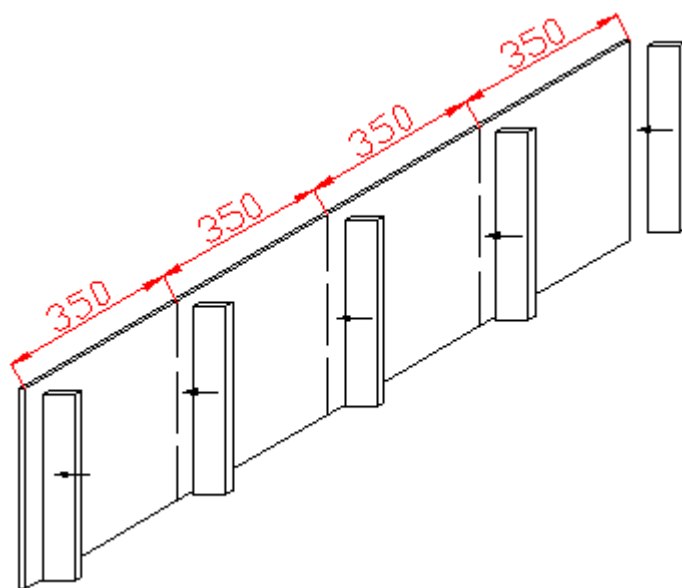


Figura A.1 – Colocación de los refuerzos laterales

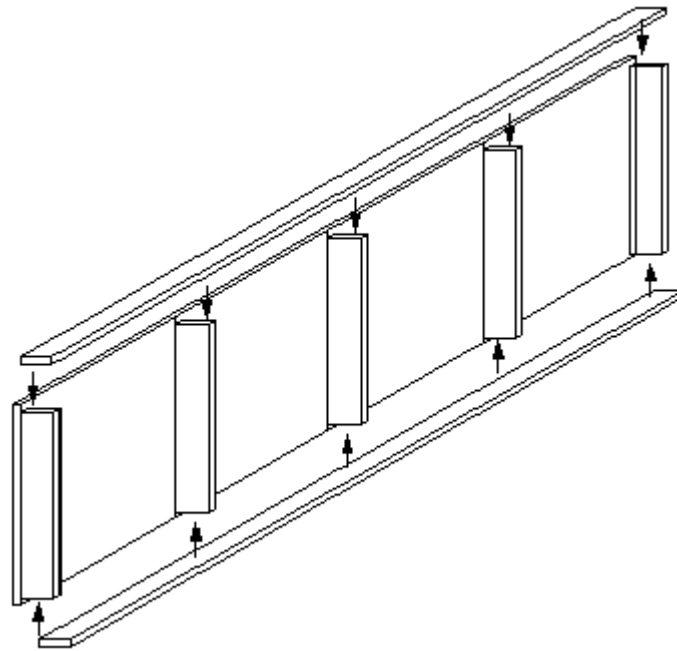


Figura A.2 – Colocación de los refuerzos superior e inferior

El resultado queda mostrado en la Figura A.3

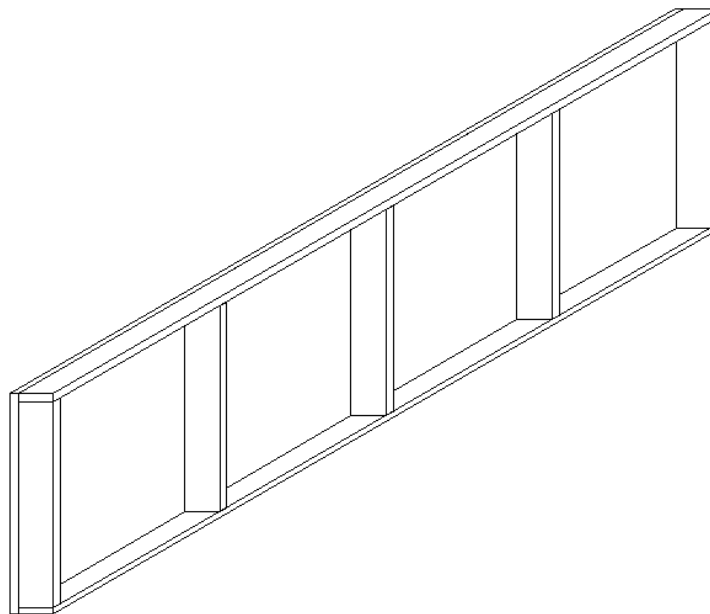


Figura A.3 – Aspecto de la pared lateral del tanque con los refuerzos colocados

A.1.2 Montaje de la parte exterior del tanque

Una vez colocados los refuerzos laterales, que sirven para añadir rigidez al conjunto, se colocan las tapas laterales y la inferior (Figura A.3) para formar un hueco central de 5 cm de anchura en el que se desarrollará el flujo de agua a través del medio poroso. Para el montaje se opta por colocar tornillos pasantes de acero de 5 mm de diámetro y se asegura la estanqueidad del conjunto utilizando adhesivo químico especial para metacrilato (Figura A.4). Este adhesivo crea una barrera impermeable y una unión de gran resistencia. Los tornillos pasantes ayudan del mismo modo a mantener la rigidez. La vista planta, alzado y perfil del conjunto se muestra en la Figura A.5.

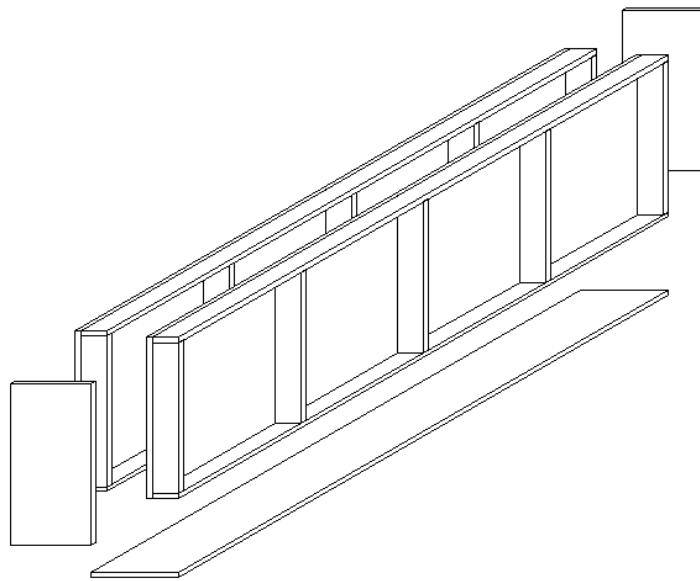
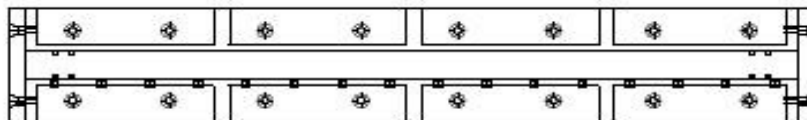


Figura A.4 – Presentación de los elementos que forman el tanque previa a su pegado



a)

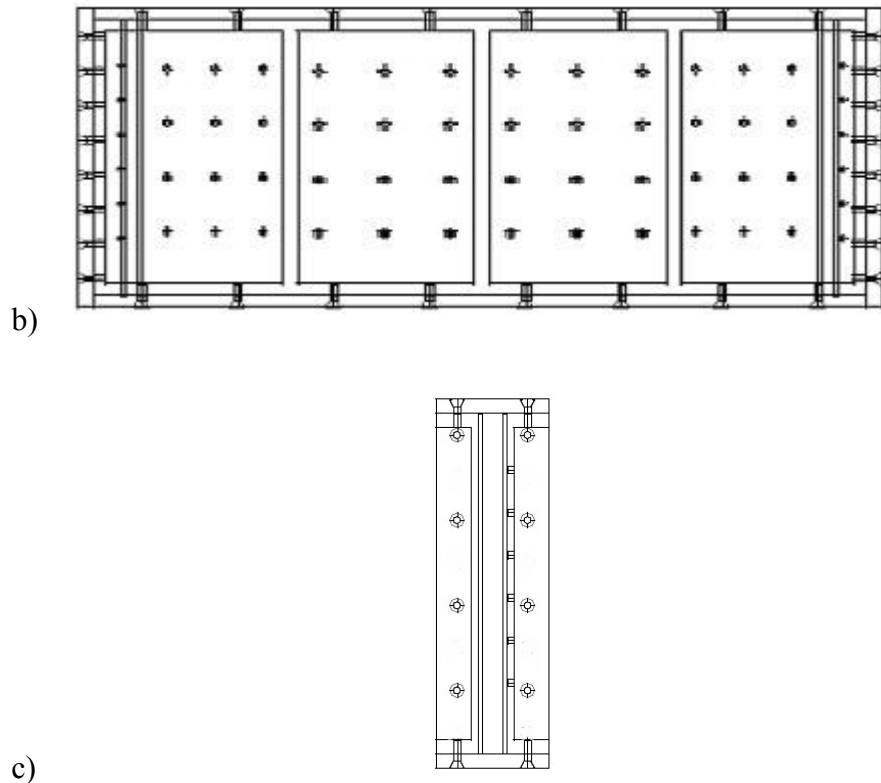


Figura A.5– Planta (a), alzado (b) y perfil (c) del montaje exterior del tanque

A.1.3 Montaje de las cámaras de entrada y salida de agua

En los extremos del hueco central se establecieron dos zonas de 100 mm de longitud y 400 mm de altura destinadas a la entrada y salida del agua del medio. Esta separación del resto del medio se realizó colocando al través una malla metálica de 560 μm de abertura, tamaño inferior a la granulometría del medio (Figura A.6). A fin de conseguir la entrada de agua con un caudal similar a lo largo de toda la altura del tanque, se colocó verticalmente un tubo de PVC de 335 mm de diámetro ranurado en toda su longitud (Figura A.7)

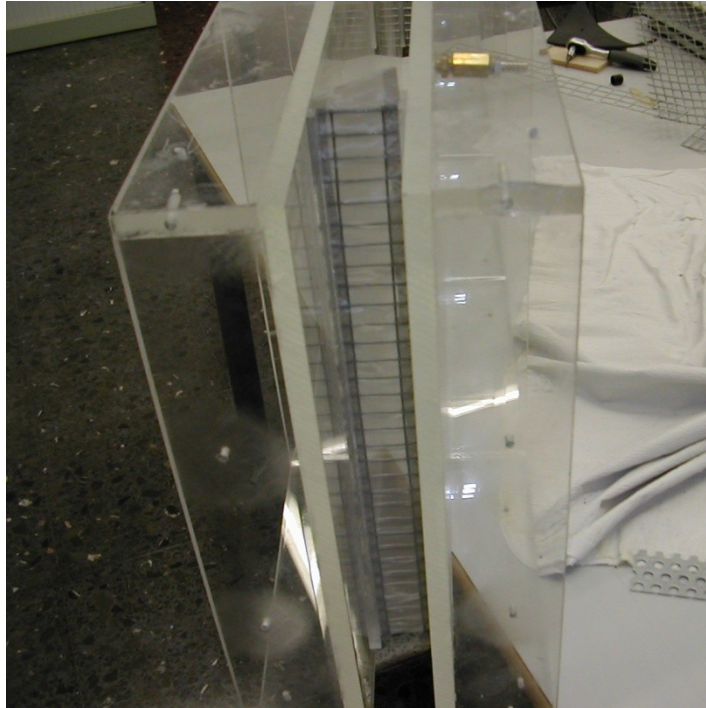


Figura A.6 – Detalle de la malla de entrada

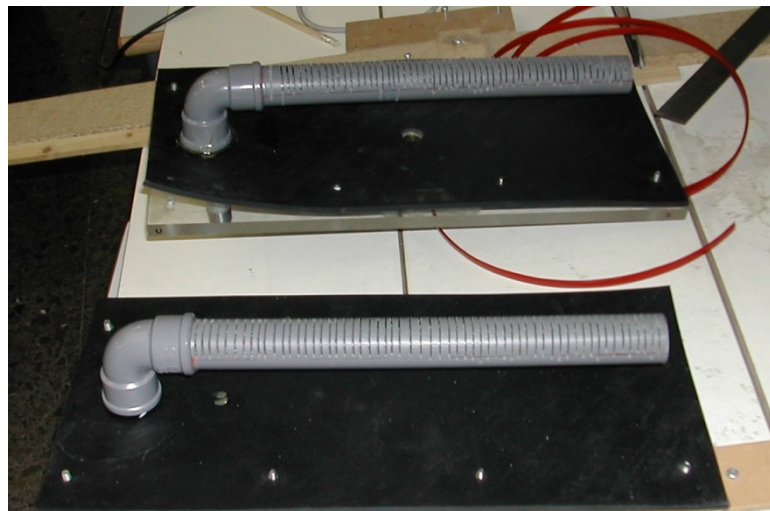


Figura A.7 - Detalle de los tubos ranurados



Figura A.8 – Detalle del montaje de la zona de entrada

Para conseguir una entrada de agua más uniforme al resto del tanque, así como para contrarrestar el empuje lateral ejercido por el medio poroso sobre la malla, el hueco restante se rellena con perlas de vidrio de 2 mm de diámetro.



Figura A.9 - Detalle del relleno de perlas de vidrio en la cámara de entrada

Los tubos de entrada y salida se conectaron a tanques de nivel constante que descansan sobre plataformas móviles ajustables a la altura deseada (Figura A.10). De forma que puede controlarse con precisión la altura piezométrica del agua en las zonas de entrada y salida. Gracias a estas cámaras de entrada y salida de agua a nivel constante, puede crearse un gradiente de potencial constante a lo largo de la vertical. Lo que consigue que la entrada y salida de agua sea uniforme en esas cámaras, evitando en lo posible la formación de vías preferenciales en el flujo.



Figura A.10 – Plataformas móviles y tanques de nivel constante

La altura piezométrica que tienen estas cámaras de entrada y salida se controla a través de unos tanques de nivel constante conectados a los tubos ranurados. Estos tanques de altura constante consisten en dos cilindros concéntricos de metacrilato con el cilindro exterior de mayor altura que el interior. El agua se aporta al cilindro exterior de forma que, al llegar a la altura del cilindro interior, rebosa por éste manteniendo de esa forma la altura de agua constante en todo el conjunto. Elevando el conjunto se consigue mantener este nivel de agua constante a la altura deseada (Figura A.11). Y colocando los tanques conectados a los tubos de entrada y salida a alturas diferentes, se establece un gradiente de flujo entre entrada y salida igual a:

$$i = \frac{\text{dif. alturas depósitos}}{\text{distancia entre entrada - salida}}$$

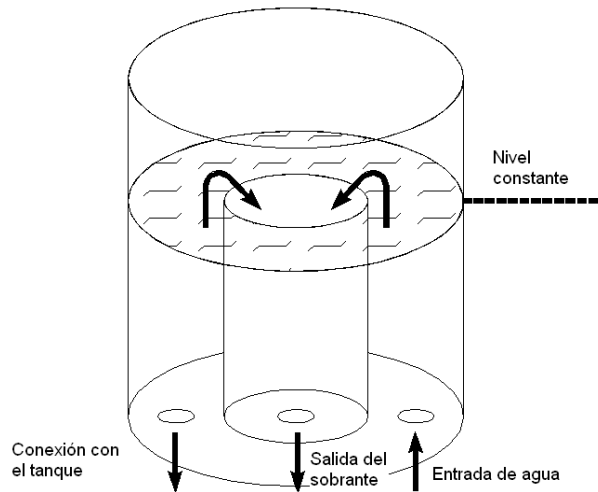


Figura A.11 - Funcionamiento del tanque del nivel constante

El tanque montado, con las cámaras de entrada y salida de agua queda tal como se muestra en la Figura A.12

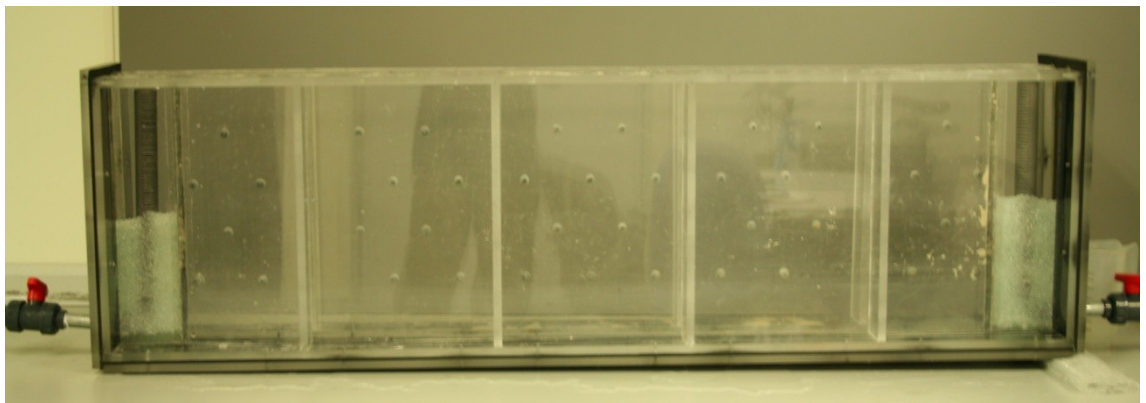


Figura A.12 - Aspecto final del tanque de experimentación

A.1.4 Colocación de los transductores de presión

Realizándolo tal como se ha descrito en el apartado anterior, una vez construidas las cámaras de entrada y salida de agua, el tanque encierra un hueco de 1200 mm de longitud, 400 mm de altura y 50 mm de fondo. En este hueco se desarrollará el flujo y transporte a través del medio poroso. Para poder obtener datos de la distribución de niveles piezométricos en el interior de este hueco es necesario poder acceder a él a través de la pared del tanque. De modo que en la pared trasera se realizan una serie de pequeños agujeros a través del metacrilato para poder introducir los sensores de presión. Para ello se realizan agujeros pasantes roscados de diámetro $\frac{1}{4}$ " en el que se enroscan los sensores. Para evitar los efectos de rozamiento de la pared del tanque sobre el flujo, se sella este agujero pasante con silicona y se introduce a través de él una aguja de 25

mm de longitud, de forma que comunique las presiones existentes en el centro del tanque con la boca del sensor. La colocación queda mostrada en las figuras A.13, A.14 y A.15

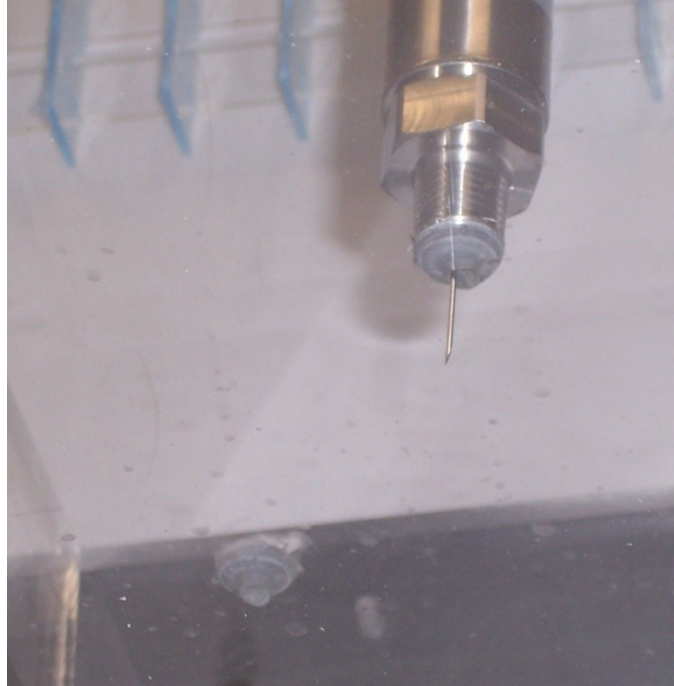


Figura A.13 - Detalle de un sensor de presión roscado a través de la pared (abajo: agujero roscado sin sensor ni aguja)



Figura A.14 – Colocación de los sensores de presión a través de la pared del tanque

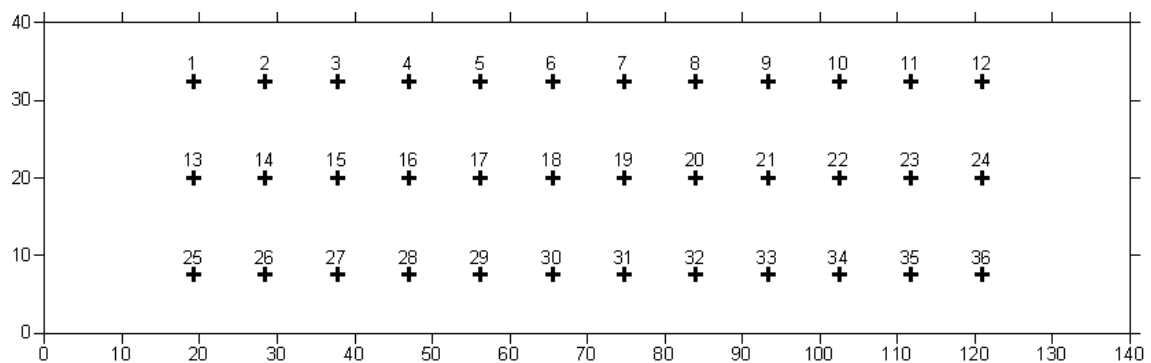


Figura A.15 – Situación de los sensores a lo largo de la pared lateral

Los sensores utilizados en nuestro caso son transductores de presión (Pressure transducers). Un transductor de presión convierte la presión que se ejerce en el sensor del instrumento en una señal eléctrica. Para ello, un transductor utiliza una resistencia de magnitud variable (un potenciómetro). Al incrementar la presión, la longitud de la resistencia se incrementa, de tal modo que la medida de diferencia de potencial también se incrementa según la ley de Ohm. Hay que señalar que, puesto que el comportamiento de la resistencia se puede asimilar al comportamiento de un muelle, la diferencia de potencial creada es linealmente proporcional a la presión establecida, según la Ley de Hooke.

Al aplicar entre ambos extremos del conductor una diferencia de potencial de 5V, el valor de la señal será proporcional a la presión aplicada (Figura A.16).

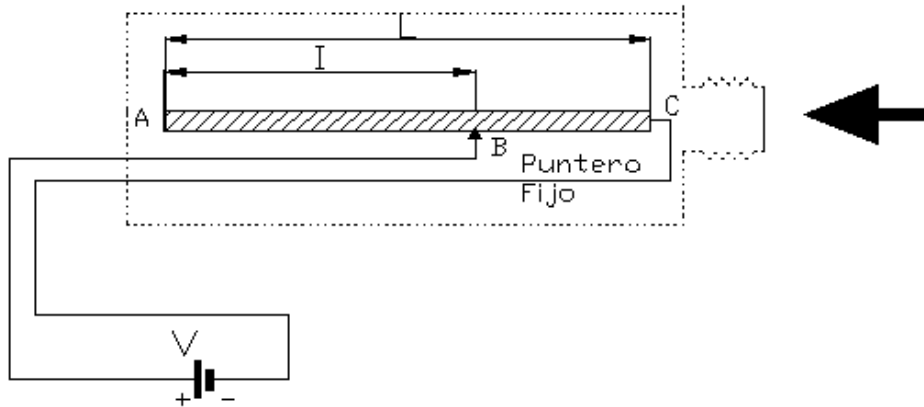


Figura A.16 - Mecanismo de un transductor de presión

Por tanto, las señales que recibimos como medida de presión son, en realidad, diferencias de potencial. Estas diferencias de potencial quedan recogidas en un voltímetro digital, que puede ser conectado a un ordenador para su control y el almacenamiento de los datos. Es por ello que debemos encontrar una relación entre las señales eléctricas obtenidas y la presión que las genera. Para ello, utilizando los tanques de nivel constante, se genera una altura de agua conocida y se mide la señal obtenida. De ese modo se logra establecer una relación señal eléctrica-presión. Es conveniente calibrar de vez en cuando los instrumentos a fin de comprobar si las relaciones averiguadas anteriormente siguen siendo válidas o, por el contrario, se han modificado con el tiempo.

En nuestro caso, se llenó parcialmente el tanque a diferentes alturas de agua y se obtuvieron así datos sobre las lecturas a distintas presiones. De este modo se pudieron obtener los datos de presión necesarios para conocer las características del flujo en el interior del tanque y se ajustaron los datos por regresión lineal, obteniéndose de esa forma la función que nos relaciona la señal emitida por el sensor con la altura de agua sobre él según la relación

$$altura = a + b \cdot señal$$

Los residuos del ajuste mostraron media cero y correlación nula, lo que indica la bondad del ajuste. Como ejemplo de la magnitud de los residuos, se detallan en la Figura A.17 los obtenidos para 20 mediciones diferentes en un sensor cualquiera al azar.

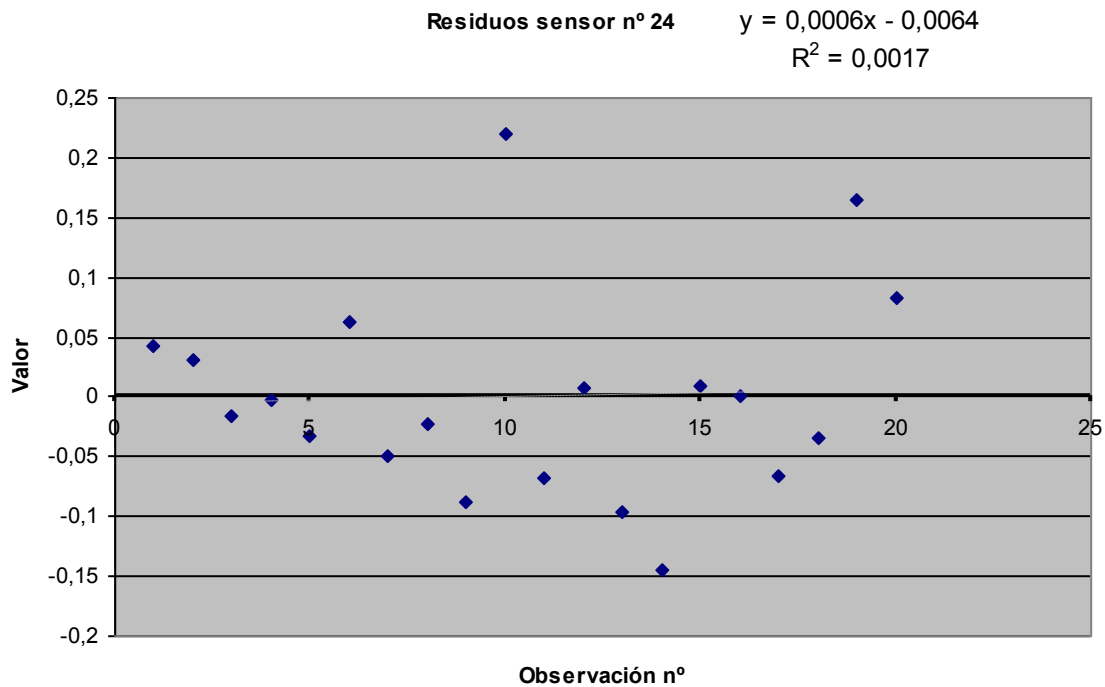


Figura A.17 – Gráfico de los residuos del sensor n° 24 y ajuste lineal

Se puede considerar, por tanto, que las medidas obtenidas a partir de estos sensores reflejan fielmente la altura piezométrica asociada a un punto del interior del medio. Una vez realizadas todas las operaciones de colocación de los sensores de presión, el tanque se rellena con un medio con las características diseñadas acorde con las experiencias que se pretenda realizar.

A.2 Características del medio poroso

A.2.1 Granulometría y conductividad

Las arenas utilizadas fueron arenas silíceas, lavadas y con un porcentaje mínimo de impurezas, según garantizado por la empresa Sibelco Minerales, S.A. Se suministraron cinco tipos de arenas, de granulometría conocida, en las que se determinó su conductividad hidráulica utilizando un permeámetro de pared flexible.

El procedimiento consiste en saturar con agua una muestra introducida en una celda de área transversal y longitud conocidas. Entre ambos extremos de la celda se establece una diferencia de potencial utilizando para ello un tanque de nivel constante conectado a la entrada. La salida queda a presión atmosférica, y se toma como origen de alturas ($z = 0$). Midiendo el volumen de agua de salida en un tiempo determinado se llega a la expresión que nos indica la conductividad hidráulica de la arena de la celda:

$$K = \frac{Vol. \cdot long_{celda}}{A_{celda} \cdot H_{tanque} \cdot t} \quad (A.1)$$

De los ensayos realizados, los resultados de conductividad fueron (tabla A.1):

Arena	Tamaño medio de grano (mm)	Conductividad hidráulica (cm/s)
Tipo 1	0,078	0,0055
Tipo 2	0,2	0,0212
Tipo 3	0,7	0,1032
Tipo 4	0,8	0,3941
Tipo 5	0,85	0,6934

Tabla A.1

Estos resultados son introducidos en un modelo numérico que simule la configuración del medio. De ese modo, sirven como datos de partida para calibrar la conductividad real en las condiciones del tanque, enfrentándolos a las observaciones reales de los piezómetros.

A.2.2 Llenado del tanque

Puesto que nuestro objetivo a la hora de construir el medio heterogéneo donde se llevarán a cabo los experimentos de flujo y transporte es crear zonas separadas con conductividades de diferente magnitud, es necesario evitar la mezcla de estas arenas, introduciéndolas en zonas separadas. Para ello, se utilizó una plantilla cuadrículada y, mediante un tubo de plástico conectado a un embudo, se rellenaron los distintos elementos mediante la técnica de relleno húmedo.

La longitud y anchura de la plantilla ajustan perfectamente con el espacio interior del tanque, dejando una serie de huecos de 25 mm de longitud, 50 mm de anchura y 20 mm de espesor. Estos huecos quedan separados del resto del medio, pudiendo rellenarse con la arena de la conductividad deseada.

El procedimiento del relleno del tanque fue el siguiente (figura A.18):

1.- Mediante los tanques de nivel constante se elevó el nivel piezométrico 10 mm. por encima del fondo del tanque

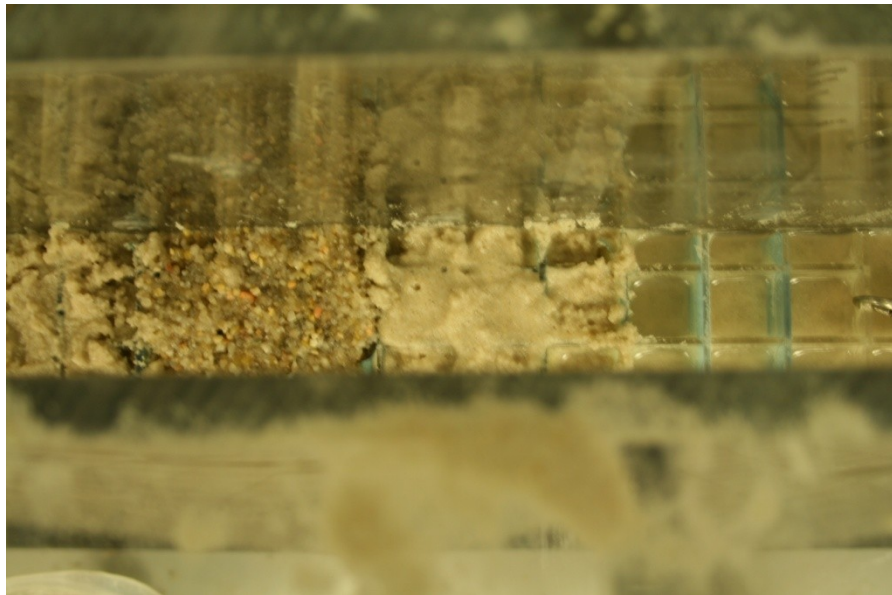
2.- Se vertió la arena deseada en cada hueco. De ese modo, cada hueco define un elemento separado del resto con características de conductividad y dispersividad

homogéneas, puesto que la lámina de agua evita la segregación de los granos por tamaño.

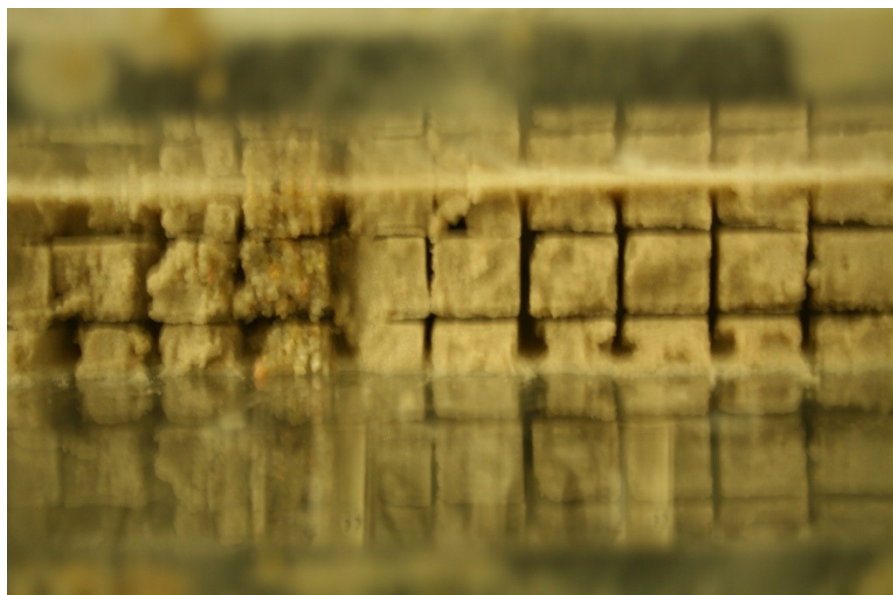
3.- Se esperó a la sedimentación de la arena para proceder a extraer la plantilla y se comenzó con la fila superior de elementos.

4.- Cuando el nivel de la arena alcanzaba una de las hileras de sensores, se colocaron las agujas y sensores necesarios para taponar los agujeros de la pared del tanque.

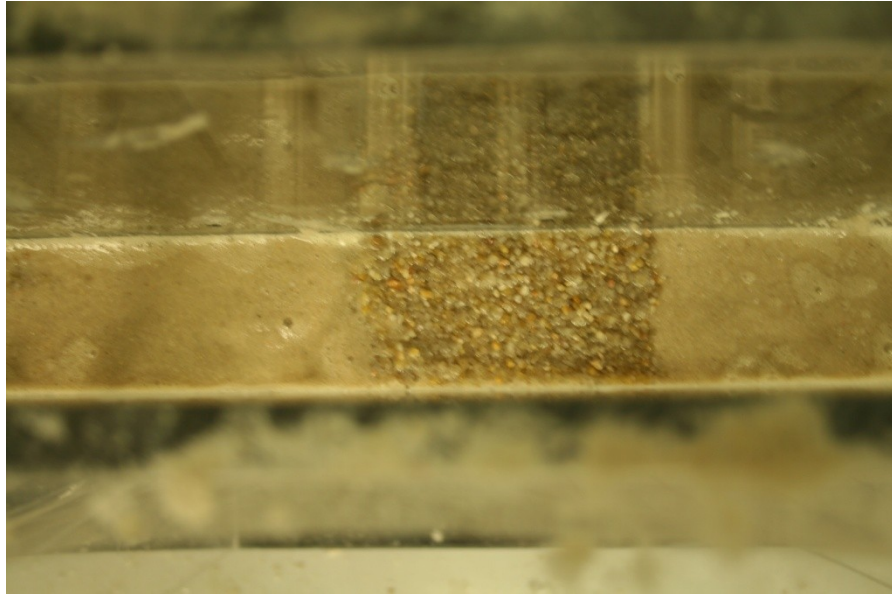
5.- Una vez terminada la última hilera de elementos, se dejó sin extraer la plantilla para evitar que debido a la sedimentación de la arena se crease una zona vacía en la parte superior, por la que el flujo pudiese puentear el medio poroso.



a)



b)



c)

Figura A.18 - Diferentes operaciones de llenado del tanque: a) colocación de la arena en la plantilla; b) retirada de la plantilla; c) elevación de la lámina de agua

El diseño final de zonas de alta y baja permeabilidad en el medio, se ilustra en la figura siguiente (Figura A.19)



Figura A.19 - Diseño de zonas de alta (oscura) y baja permeabilidad (clara)

Se buscó simular una formación heterogénea con zonas de mayor conductividad que pudieran crear zonas con flujo preferente.

Existen laminaciones de finos que afectan al color de fondo, y de esa forma a la señal obtenida a la hora de estimar las concentraciones de trazador, lo que será tratado en el apartado correspondiente sobre “corrección de color de fondo”. Por el momento, baste decir que estas formaciones impiden considerar el color del medio como homogéneo, lo que obliga a realizar una serie de correcciones en la fotografía digital

que serán tratadas más adelante. Las correcciones realizadas y el tratamiento de imagen digital se trata en el anexo correspondiente

Anexo B. Instrumentación de las medidas de concentración

B.1 Introducción

En la presente sección se detalla un sistema para la estimación de concentraciones y el efecto de la heterogeneidad basado en la toma de fotografías digitales. El objetivo es estimar la concentración de un trazador coloreado a partir de la intensidad de color emitida. Para asegurar que la medida de color es debida únicamente al tinte, además de la fotografía digital del medio con el tinte utilizado como trazador, son necesarias una fotografía del medio completamente libre de trazador (imagen “blanco”) y otra de una superficie de color homogéneo para valorar el efecto de la iluminación no homogénea.

Para explicar correctamente la estrategia seguida para la estimación de concentraciones, es necesario introducirse en la teoría del color y la ley de Beer, así como hacer un repaso de las características de la fotografía digital y su procesado.

B.1.1 Teoría del color

En los compuestos coloreados, las moléculas del compuesto están formadas por átomos unidos entre sí por enlaces covalentes. Los electrones de estos átomos quedan confinados en varios niveles de energía. Los electrones pueden ocupar estos niveles determinados, pero ningún otro. De ese modo, cuando los electrones están compartidos entre varios átomos, estos niveles de energía quedan muy próximos unos de otros. Un electrón puede saltar de un nivel a otro si se le proporciona la cantidad correcta de energía, que viene proporcionada por la luz incidente, que es en sí una forma de radiación electromagnética. Las moléculas pequeñas, en las que los electrones están poco compartidos, tienen saltos energéticos muy grandes, por lo que necesitan una energía incidente que queda más allá del espectro de la luz visible. De tal modo, este tipo de moléculas parecen transparentes bajo la luz normal. Para moléculas de mayor tamaño, donde los electrones están compartidos entre un número mayor de átomos, los saltos entre los distintos niveles energéticos en que puede encontrarse un electrón son menores. En tal caso, la luz visible tiene la suficiente energía como para que un electrón

incidido por un fotón adquiera suficiente energía para saltar a un nivel superior. (Figura B.1)

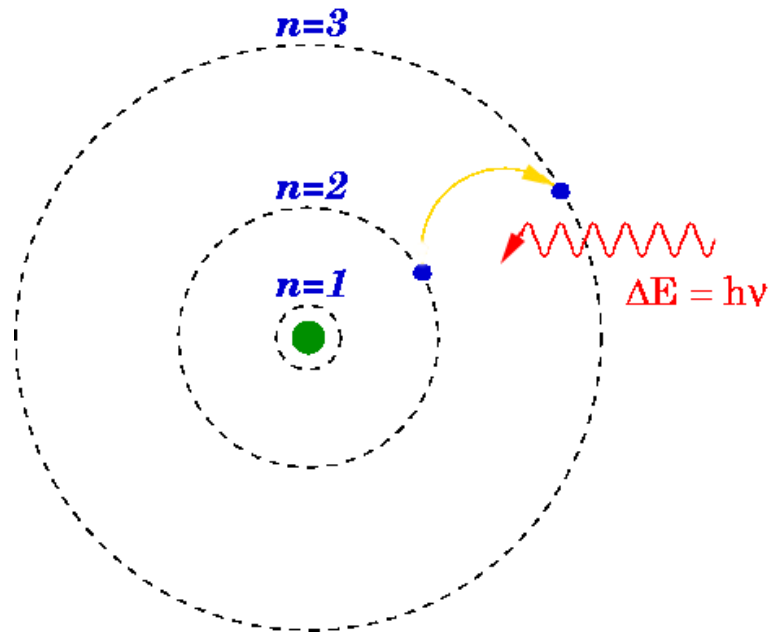


Figura B. 1 - Absorción de un fotón de longitud de onda γ

Cuando esto sucede, ese nivel de energía concreto para lograr el salto, el cual corresponde a una longitud de onda concreta en el espectro visible, es absorbida y desaparece. El conjunto de aquellas longitudes de onda que “desaparecen” del espectro visible son lo que se conoce como “espectro de absorción” de una sustancia (Figura B.2)

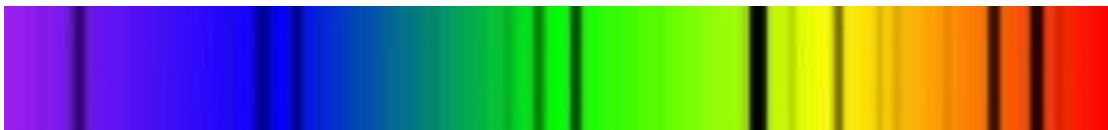
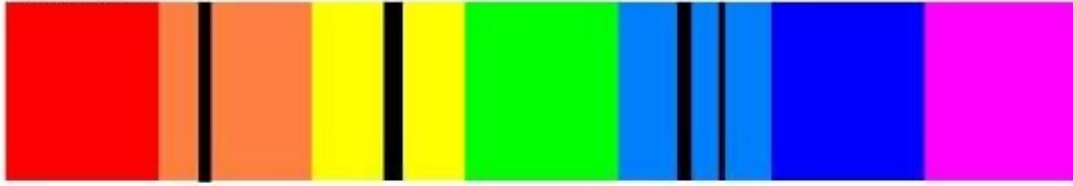


Figura B.2- Espectro de absorción típico. Las bandas negras muestran las longitudes de onda no absorbidas

La luz no absorbida es entonces reflejada, habiendo dejado en el proceso de ser blanca. Será, en cambio, un conjunto pequeño de longitudes de onda no absorbidas (en concreto, las correspondientes a las bandas negras del espectro de emisión). La suma de estas bandas son lo que “dotan” de color a un objeto. (Figura B.3).

Espectro de emisión y de absorción de un mismo elemento

Absorción:



Emisión:



Figura B.3 - Espectros de emisión y absorción de un mismo elemento

Para que una molécula tenga un grado de compartición de electrones lo bastante elevado como para mostrar color, la molécula debe contener un número elevado de enlaces dobles alternando con enlaces simples, como se muestra en el diagrama de la molécula de Brilliant Blue FCF de la figura B.4. El máximo de energía luminosa absorbida por este colorante corresponde a una longitud de onda de 630 nms.

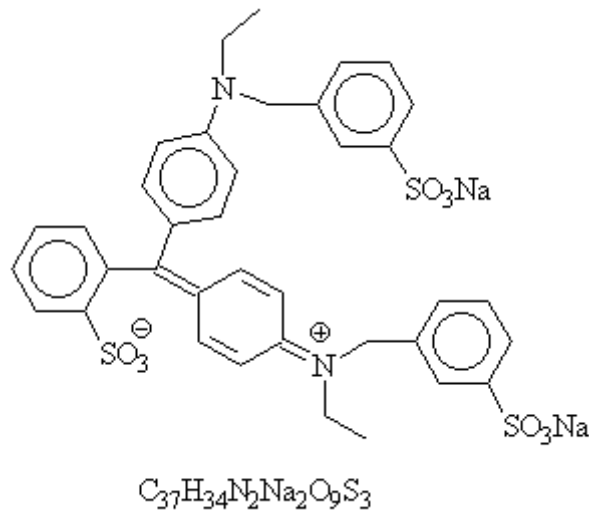


Figura B.4 - Diagrama de la molécula de Brilliant Blue FCF

Este colorante ha sido utilizado como trazador en numerosos estudios de infiltración en suelos y flujo subterráneo, debido a su estabilidad y facilidad de detección. Flury y Flühler (1994) demuestran que debido a su carácter neutro, no tiende a ser adsorbido por los constituyentes del suelo, aunque su uso en suelos naturales puede

plantear problemas al interaccionar con la materia orgánica (Germán-Heis y Fluir [2000]). El protocolo para relacionar la intensidad de color con la concentración de trazador está bien establecido en la bibliografía y se ha utilizado en numerosas ocasiones en suelos de campo (Forrer [2000], Kaastel y Vogel [2002]).

El Brilliant Blue FCF es un colorante alimentario derivado del trifenilmetano y es el que se utilizó como trazador para observar la evolución del flujo y transporte en el interior del tanque de experimentación. El producto comercial está compuesto por una disolución de 200 gr de colorante de pureza 85% por litro. Por tanto, la concentración inicial es de 170 gr/l. Forrer (2000) establece el límite de detección de este trazador a una concentración de 0,00032 gr/l, de modo que esta disolución inicial puede diluirse hasta 5000 veces y seguir siendo detectable por análisis multiespectral.

Color	BRILLIANT BLUE FCF	E-133
Descripción	Líquido de color azul oscuro. Solución de Brilliant Blue FCF en agua con estabilizadores y conservantes.	
Contenido total de colorante % peso	20 ± 1	
Disolvente	Agua	
Cloruro de sodio / sulfatos (%)	Max. 3	
Impurezas de color (%)	Max. 1	
Compuestos intermedios (%)	Max. 0.5	
Aminas primarias aromáticas no sulfonadas (%)	Max. 0.003	
Arsénico ppm	Max. 1.0	
Plomo ppm	Max. 10.00	
Metales pesados ppm	Max. 20.00	
Solubilidad	320 gr/litro	

Tabla B.1– Análisis químico de la forma comercial del colorante Brilliant Blue FCF

B.1.2 Relación entre intensidad de color y concentración. Ley de Beer

La ley de Beer establece que, cuando un haz de radiación monocromática (es decir, coloreada) con intensidad I_0 , atraviesa un medio, varios fenómenos pueden ocurrir. El efecto más significativo ocurre cuando parte de la radiación es absorbida por el medio atravesado. Sin embargo, este no es el único efecto que puede ser observado. Parte de la radiación incidente puede ser reflejada o dispersada. En consecuencia, la intensidad del haz que es medida después de atravesar o ser reflejada por la muestra

(intensidad transmitida, I_t) será menor que la intensidad inicial, I_0 . Ambas intensidades están relacionadas entre sí por una expresión lineal descrita por la ecuación:

$$I_0 = I_r + I_t \quad (\text{B.1})$$

donde I_0 es la intensidad de la radiación incidente, I_r la intensidad del haz reflejado como resultado de las diferencias del índice de refracción entre la especie absorbente y el ambiente, e I_t la intensidad de la radiación transmitida.

Si aseguramos que la intensidad de la radiación incidente sea constante, la intensidad reflejada es proporcional a la transmitida, de modo que cualquier cambio en esta última tendrá su efecto en la intensidad reflejada.

Entre las primeras investigaciones sobre la relación existente entre las intensidades de radiación incidente y transmitida, se destacan los experimentos de Pierre Bouguer (1729) y de Johann Heindrich Lambert (1760). Estos dos científicos efectuaron observaciones independientes y verificaron que las propiedades asociadas al proceso de absorción de luz pueden ser enunciadas en términos de dos leyes fundamentales:

- La intensidad de luz (monocromática) transmitida por un cuerpo homogéneo es proporcional a la intensidad de luz incidente. Es decir: $I_t = k I_0$.
- La intensidad de luz (monocromática) transmitida disminuye exponencialmente con el aumento de la espesura de la capa del cuerpo homogéneo

La Figura B.5 muestra claramente la existencia de este fenómeno, en laboratorio, con el uso de luz solar. Nótese que la solución parece ser más clara en la región del ajuste del menisco, debido a que el diámetro del tubo (espesor de la especie absorbente) es mucho menor que en la parte inferior de la probeta.



Figura B.5– Solución de Brilliant Blue en agua, contenida en una probeta

Esta ley es representada por la ecuación (B.3) y puede ser deducida matemáticamente de varias formas, siendo la más común:

$$I_t = I_0 \cdot 10^{-ac} \quad (\text{B.3})$$

Donde c es la concentración en el medio y a una constante llamada “absortividad”, que es independiente de la concentración. De ese modo, si lo que realmente se mide no es la intensidad absorbida, sino la reflejada, la Ley de Beer se mantiene como:

$$I_r = I_0(1 - 10^{-ca}) \quad (\text{B.4})$$

Por lo que la medida de la intensidad reflejada por la solución de trazador es proporcional a la concentración de trazador cuando la radiación incidente es monocromática. Esta es la característica que se aprovecha para estimar localmente la concentración del trazador coloreado, puesto que la intensidad del color emitido es proporcional a la concentración del trazador.

Sin embargo, esta ley rige exclusivamente sólo cuando la luz incidente es monocromática. En el caso de que la luz incidente no sea monocromática (es decir, de una única longitud de onda), la relación entre la concentración del trazador y la radiación emitida no es clara. Esto es debido a que al ser iluminado por luz no monocromática, los objetos reflejan un conjunto diverso de longitudes de onda que, combinadas, forman el color captado. A este tipo de colores se los conoce como colores *no-espectrales*. La relación entre el color y la concentración del trazador en este caso no es una relación sencilla. Sin embargo, sigue siendo proporcional y susceptible de ser modelada.

Esta relación ha intentado modelarse en varias ocasiones a través de herramientas estadísticas. Forrer (2000) utiliza 155 muestras de trazador para lograr una relación polinomial de segundo orden entre los valores medios de los canales R, G y B y el logaritmo de la concentración. Pese a que su experiencia se realizó en suelos naturales, el coeficiente de correlación logrado fue de $r^2 = 0,90$. Fluhler y Flurry utilizan otro polinomio de ajuste utilizando los datos de color para conseguir, en suelos naturales, un coeficiente de correlación de $r^2 = 0,94$. Persson (2005) utilizó una red neuronal para lograr una mayor precisión, logrando de ese modo errores medios cuadráticos de 0,0747 a 0,0944 gr/l. Stadler (2000) utilizó también un polinomio de ajuste de segundo grado para lograr coeficientes de correlación de hasta 0,997 utilizando Brilliant Blue como trazador.

La cámara fotográfica se colocó centrada frente a la pared lateral del tanque y a una distancia de aproximada de 2 metros, de forma que la fotografía abarcara toda la longitud del tanque desde una posición fija. Tanto el trípode de la cámara como los focos de iluminación se colocaron en posiciones fijas utilizando para ello una serie de marcas en el suelo para evitar cambios en la intensidad de iluminación o el enfoque.

Para asegurar la reproducibilidad, se colocaron dos referencias en los extremos del tanque:

- Una escala de grises Kodak para calibrar la deriva de la iluminación. Este tipo de escalas contiene doce recuadros de tonos de gris, variando desde el blanco puro al negro puro. En condiciones standard, la diferencia en la intensidad de color entre cuadros sucesivos es siempre la misma. Puede utilizarse esta característica para corregir condiciones de iluminación insuficiente o excesiva.
- Una plantilla Esilor para calibrar la deriva geométrica. La cámara fotográfica está expuesta a vibraciones y movimientos, tanto por el paso de personas y material cercano como por el cierre y apertura del obturador. Las plantillas Esilor contienen una serie de marcas calibradas que sirven para posicionar la imagen y la inclinación global de la imagen.

B.2 Cámara fotográfica y formato gráfico

Para asegurar la mayor fidelidad a la toma de imágenes, se escogió con gran atención el dispositivo fotográfico. Se escogió una cámara digital Canon 350D con una resolución espacial de 9 Mbs y capacidad para almacenar datos en formato RAW. El formato RAW (crudo) es un formato de archivo que recoge la señal tal y como ésta es tomada por el sensor CMOS. Un CMOS está formado por un soporte plano sobre el que se han formado, por técnicas análogas a las que permiten fabricar los circuitos

integrados, una serie de varios millones de elementos sensibles a la luz, denominados fotodiodos, ordenados en filas y columnas. Cuando el objetivo proyecta sobre estos elementos una imagen, la luz que cae sobre cada uno de estos elementos produce una carga eléctrica proporcional a la intensidad de luz recibida, por efecto fotoeléctrico. El dispositivo lee por tanto la intensidad de luz que corresponde a cada píxel, y los valores de esas lecturas constituyen una imagen digital. Un primer dato importante es la sensibilidad de esa lectura, denominada normalmente rango dinámico. Representa la diferencia entre el valor mas bajo que el elemento sensible puede leer (el valor más bajo de intensidad de luz que se distingue de cero) y el valor más alto que el elemento puede leer (el valor por encima del cual, no aumenta la medida de la luz aunque la intensidad de luz aumente). Los valores comprendidos entre ese máximo y ese mínimo, convertidos a formato digital se pueden expresar como un número de 8 bits (lo que dará valores entre 0 y 255) o con un mayor número de bits con el correspondiente aumento de valores posibles. La imagen digital tendrá por tanto una profundidad de color mayor o menor según sea el número de bits con que representemos los valores de luz leídos por el CMOS

Lo primero que llama la atención es que estamos hablando de la medida de **un valor** por píxel, mientras que para definir correctamente un color son necesarios los valores de sus tres componentes principales, Roja Verde y Azul. En efecto, cada elemento del CMOS es un elemento sensible a la intensidad de luz pero no al color, por lo que sólo se produce un valor. La forma de conseguir que el CMOS pueda leer el color, es la siguiente.

Supongamos que la imagen proyectada sobre el CMOS, tiene unos colores que representamos por un trío de valores, que corresponden a las tres componentes RGB. Estamos suponiendo una profundidad de color de 24 bits. Como ejemplo vamos a representar tres filas de cuatro píxeles cada uno. Cada píxel lo representamos por un paréntesis dentro del cual ponemos tres números, de los colores rojo verde y azul que representarían los valores respectivos de las tres componentes de color **de la luz que llega** a cada píxel, Tendremos algo así como:

(068 123 076) (069 123 075) (070 123 074) (071 123 073)

(070 123 076) (070 123 075) (070 123 074) (073 123 073)

(072 123 076) (073 123 075) (074 123 074) (075 123 073)

Intencionadamente hemos puesto unos valores próximos en los valores de los colores de unos a otros píxeles. En realidad las variaciones de un píxel a otro contiguo en una imagen fotográfica son muy leves ya que los objetos reproducidos en la fotografía son continuos y en ese sentido no presentan variaciones bruscas de color. Si tuviésemos un

dispositivo perfecto, que leyese los tres valores de color para cada píxel, tendríamos un archivo con esos valores y leeríamos tres bytes por cada píxel.

En lugar de eso, lo que se hace es cubrir el CMOS con una máscara, de modo que cada píxel queda cubierto por un filtro de color como en la imagen adjunta, conocido como Filtro de Bayer (figura B.6). Así, aquellos píxeles cubiertos por el filtro rojo, leen solamente la intensidad de la luz roja, que es la única que reciben. Análogamente los píxeles cubiertos por el filtro verde leen la intensidad de luz verde y los cubiertos de azul, leen la intensidad de la componente azul. Nótese que hay el doble de píxeles que leen la luz verde respecto de los que leen el color rojo o el azul. Esto es debido a la mayor sensibilidad del ojo humano a la componente verde del espectro.

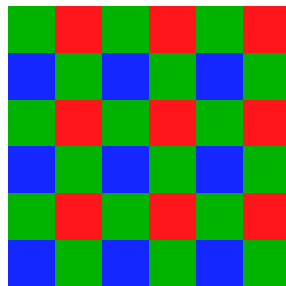


Figura B.6 - Máscara de color del CMOS (Filtro de Bayer)

Cuando el CMOS lee la luz de la imagen proyectada sobre su superficie, cada píxel mide la luz de su color, con lo cual tendremos algo así como:

(123) (069) (123) (071)
 (076) (123) (074) (123)
 (123) (073) (123) (075)

Si guardamos estos valores, es decir, tal cual los lee el CMOS tendremos una imagen en formato RAW. Obsérvese que es un formato muy compacto ya que ocupa la tercera parte de lo que correspondería a la imagen completa de la misma profundidad de color. En general todas las cámaras de calidad permiten almacenar la imagen en este formato RAW, que es, como su nombre indica, la imagen en bruto, tal como se lee por el CMOS. Sin embargo esta imagen no es representable directamente por un monitor o por una impresora. Es necesario **calcular** las dos componentes de color que nos faltan para cada píxel mediante un algoritmo denominado "demosaicing". Lo que hacemos es interpolar los valores que nos faltan de la forma siguiente: Fijémonos en la primera fila. En el primer píxel, el verde tiene valor 123, en el segundo no hay valor pero en el tercero vuelve a valer 123. Lo lógico es asignar también el valor 123 al segundo. Para el color

rojo, en el segundo tenemos 069, falta el tercero, pero el cuarto vale 071. Asignando el valor medio, al tercero le correspondería 070. Actuando de esta forma, por filas y columnas, se interpolan todos los valores que faltan.

Aplicando este algoritmo, reconstruiríamos los valores de esta forma:

(068 123 076) (069 123 075) (070 123 074) (071 123 073)
(070 123 076) (071 123 075) (072 123 074) (073 123 073)
(072 123 076) (073 123 075) (074 123 074) (075 123 073)

Cuando queramos ver la imagen daremos ese trío de valores a cada píxel y tendremos una imagen que debería ser igual a la que teníamos con el "dispositivo perfecto"

Obsérvese que hay un ligero error: los dos valores marcados con amarillo eran, en la imagen proyectada sobre el CMOS, 070 y 070 y en su lugar el algoritmo ha calculado 071 y 072. Tenemos una imagen "casi" perfecta a costa de haber leído y guardado sólo un byte por píxel. Nuestros ojos son mucho menos sensibles al color que a la intensidad luminosa, luego de alguna forma estamos imitando al ojo con esta técnica que recoge sólo un color en cada píxel.

Otra cuestión curiosa la podemos deducir de nuestro ejemplo. Si leemos los valores de rojo de la segunda fila tenemos, en la imagen original: 070 070 070 073 o sea hay un salto brusco entre el tercer y el cuarto valor. Por el contrario, el algoritmo de interpolación ha calculado 070 071 072 073. Es decir que el "escalón" del original entre el píxel tercero y el cuarto, se ha suavizado repartiéndolo entre los cuatro píxeles considerados. Esto quiere decir que la imagen es más suave, y por lo tanto con aspecto de menor nitidez. La mayoría de las cámaras aplican una corrección adicional cuando convierten la imagen RAW tomada por el CMOS al formato usado para su almacenamiento, para compensar este efecto, pero no deja de ser un artificio.

En realidad el CMOS de la cámara lee efectivamente un valor para cada píxel, pero ordinariamente ese valor leído tiene un rango dinámico mayor de 8 bits. Esto quiere decir que el valor de intensidad de luz leído para cada píxel, en lugar de variar entre 0 y 255 variará entre 0 y 512 (9 bits) o entre cero y 1024 (10 bits) o entre cero y 4096 (12 bits). Es decir la lectura es más precisa de lo que se necesita para formar una imagen de color de 24 bits (3 colores de 8 bits). Por lo tanto cuando pasamos de formato RAW a una imagen de 24 bits de profundidad de color, antes incluso de que la intentemos comprimir para su almacenamiento, hemos realmente perdido una parte de información ya que cada componente de color de un píxel no pasa de 8 bits. Pero esto no es todo: la imagen captada inicialmente por el CMOS no sólo debe convertirse a una imagen con tres componentes de

color, sino que en este proceso se realizan una serie de ajustes y modificaciones. Ya hemos hablado de que para evitar el aspecto de suavizado que tiene la imagen RAW se aplica una corrección que aumenta el contraste. Normalmente este aumento de contraste se exagera para dar un aspecto más nítido a la fotografía. Además se aplica la corrección de colores por la temperatura de color, contraste, brillantez, saturación, balance de blancos, supresión de ruido.... etc. En definitiva la imagen es elaborada completamente para entregar una fotografía "atractiva" pero que sólo tiene una profundidad de color de 8 bits. Además se comprime para generar una imagen en formato JPG que ocupa muy poco espacio pero a costa, como sabemos, de pérdidas importantes de información de color, y después de todo eso, queda almacenada en la tarjeta de memoria de la cámara, en formato JPG. En muchas cámaras todo este proceso es automático, y el usuario puede ajustar sólo determinados parámetros (tamaño y finura del archivo final, temperatura de color....) En definitiva obtenemos una imagen que es el resultado de la imagen inicial una vez procesada por el software de la cámara.

Por el contrario un archivo RAW, contiene la imagen original tal como fue captada por el sensor, con toda su profundidad de color y sin ninguna elaboración. Lo que sí contiene es una cabecera de datos donde figuran todos los ajustes que tenía la cámara cuando se tomó la fotografía. La idea es que mediante un proceso posterior, se pueda elaborar la imagen y obtener la fotografía final en función de esos ajustes que tenía la cámara. Lo interesante es que esta conversión en una imagen final, la podemos hacer fuera de la cámara, en un ordenador, de modo que como disponemos de un procesador mucho más potente y un software más sofisticado se podrá realizar la con mayor precisión, y lo que es mucho más importante, como el archivo RAW lo conservamos indefinidamente, esta conversión se puede realizar muchas veces, con ajustes diversos y con software que incluso aparezca en el futuro. Además como al trabajar en el ordenador, ya no es tan importante el problema del tamaño de los archivos de imagen que generemos, todos estos programas de tratamiento permiten generar no solamente archivos JPG sino también archivos cuya compresión no supongan pérdida de información, como el TIFF. Incluso una imagen TIFF puede guardarse con 16 bits por color de profundidad, por lo tanto aprovechando mejor las características de la imagen original. Todo lo dicho nos lleva a dos conclusiones muy importantes:

La primera es que resulta fundamental guardar la imagen RAW ya que **cualquier otro formato** que utilicemos supone una degradación de la información. La segunda es que no todos los RAW's son iguales ya que dependen de la profundidad de color que sea capaz de captar el CMOS, y de los ajustes que la cámara permita. En principio la "descompresión" ("demosaijing") la efectuamos con el software del propio fabricante de la cámara, ya que sólo éste sabe como interpretar cada archivo RAW generado por su cámara. Como ejemplo, la Figura B.7 muestra la pantalla de ajustes que emplea el programa de conversión de archivos RAW que la marca Canon proporciona para las imágenes captadas por la cámara Canon 350D. Sin entrar en detalles, vemos la cantidad de ajustes sobre los que el usuario puede actuar, para interpretar una imagen RAW producida por esta cámara. Cuando el usuario va a convertir una imagen RAW, los diversos

parámetros aparecen con el valor por defecto que tenían en la cámara cuando se tomó la fotografía, de modo que si no se modifica ninguno, el resultado será aproximadamente igual al que habría obtenido la cámara. Sin embargo, al efectuar el proceso en el ordenador, el usuario puede optar por mantener o modificar estos valores, obteniendo las consiguientes diferencias en el resultado final.



Figura B.7 - Software de procesado de archivos RAW de Canon

Aunque realmente un imagen RAW no es un negativo, tal como lo entendemos en fotografía química, podemos utilizar ésta expresión en el sentido de que la imagen RAW es como el negativo a la fotografía tradicional, es decir, es exactamente lo que captó la cámara pero sin ninguna elaboración posterior. Para obtener la imagen final, hay que hacer un proceso en el cual se pueden ajustar una serie de parámetros para obtener la imagen que se aproxime más a los deseos del fotógrafo, pero este proceso supone una serie de decisiones que llevan a seleccionar y enfatizar una parte de la información captada a costa de perder otra parte de la información. Desde este punto de vista, algunos autores comparan el formato RAW, no con el negativo, sino con la imagen latente en la película sin revelar, en el sentido de que contiene TODA la información captada por la película sin elaboración alguna, mientras que una vez revelada la película para obtener el negativo ya hemos pasado por el proceso de revelado, que, según el su tipo y la forma en que se haga, puede enfatizar determinadas características de la imagen y atenuar o incluso eliminar

otras. Así que un archivo RAW se puede comparar a una película expuesta pero sin revelar con la ventaja de que podemos "revelarla" una y otra vez con procesos que pueden ser diferentes en cada ocasión.

B.3 Corrección de la influencia de otros factores en la imagen digital

A fin de determinar la concentración de trazador en un punto del medio, se acepta que la emisión de color depende exclusivamente de la concentración de trazador. Para poder aceptar este extremo, es por tanto necesario eliminar o al menos calibrar la influencia del resto de efectos en la imagen final obtenida.

Al ser iluminado cualquier objeto por luz no monocromática, los objetos reflejan un conjunto diverso de longitudes de onda que, combinadas, forman el color captado. A este tipo de colores se los conoce como colores *no-espectrales*. La relación entre el color y la concentración del trazador en este caso no es una relación sencilla que puede tratarse mediante herramientas estadísticas. Sin embargo, antes de poder utilizar estas herramientas, deben eliminarse o minimizarse el resto de factores que tengan influencia. Estos son:

- Temperatura de color
- Iluminación no homogénea
- Color de fondo no homogéneo

B.3.1 Temperatura de color

La Temperatura de color de una fuente de luz se define comparando su color dentro del espectro luminoso con el de la luz que emitiría un Cuerpo Negro calentado a una temperatura determinada. Por este motivo esta temperatura de color generalmente se expresa en grados Kelvin, a pesar de no reflejar directamente una medida de temperatura.

Generalmente no es perceptible a simple vista, sino mediante la comparación directa entre dos luces como podría ser la observación de una hoja de papel normal bajo una luz de tungsteno (lámpara incandescente) y a otra bajo la de un tubo fluorescente (luz de día) simultáneamente.

La temperatura de color produce "dominantes de color". El efecto cromático que emite la luz a través de fuente luminosa depende de su temperatura. Si la temperatura es

baja, se intensifica la cantidad de amarillo y rojo contenida en la luz, pero si la temperatura de color se mantiene alta habrá mayor número de radiaciones azules (Figura B.8)



Figura B.8 – Dominantes en la temperatura de color

Bajo condiciones normales tiene lugar un ajuste de la percepción humana llamado “consistencia aproximada de color” que hace que se ajusten las distintas fuentes de luz que el ojo asume como blancas. Sin embargo, la cámara fotográfica no se comporta de la misma manera. Aquel papel que aparece blanco bajo la luz de sol, se ve rojizo en la grabación cuando se ilumina con una bombilla (en caso de no haber hecho anteriormente las correcciones pertinentes como “el balance de blancos” –white balance-).

Normalmente, las cámaras digitales tienen una opción de configuración que permite indicar distintos modos de balance de blancos, que varían la manera por la cual se percibe la temperatura del color, ajustando los niveles de los colores básicos (RGB - Red, Green, Blue), en función de distintas situaciones como pueden ser fotografías a la luz del día con días soleados, días nublados, iluminación artificial por bombillas incandescentes (tungsteno), o luz fluorescente.

Una de las ventajas de utilizar el formato RAW es que los programas de postprocesado como Camera RAW o RawShooter permiten ajustar la temperatura del color de una manera directa, cambiando los grados Kelvin de una foto. En este caso hemos utilizado bombillas de alta frecuencia y una temperatura de color standard de 5500 K, para obtener una representación del color lo más fiel posible.

B.3.2 Corrección por iluminación no homogénea

Puesto que la fuente de iluminación se coloca cercana a las muestras, es inevitable que la parte central de la imagen reciba mayor intensidad de iluminación que las partes exteriores. También la distancia a los focos determina la intensidad de iluminación recibida. De forma preliminar a la toma de muestras de color se obtuvo la distribución de intensidad de iluminación $I(x,y)$. Para ello se fijaron las posiciones de los focos de iluminación y de la propia cámara, dibujando marcas en el suelo de forma que las condiciones de iluminación fuesen reproducibles en cualquier momento. (Fig. B.9).

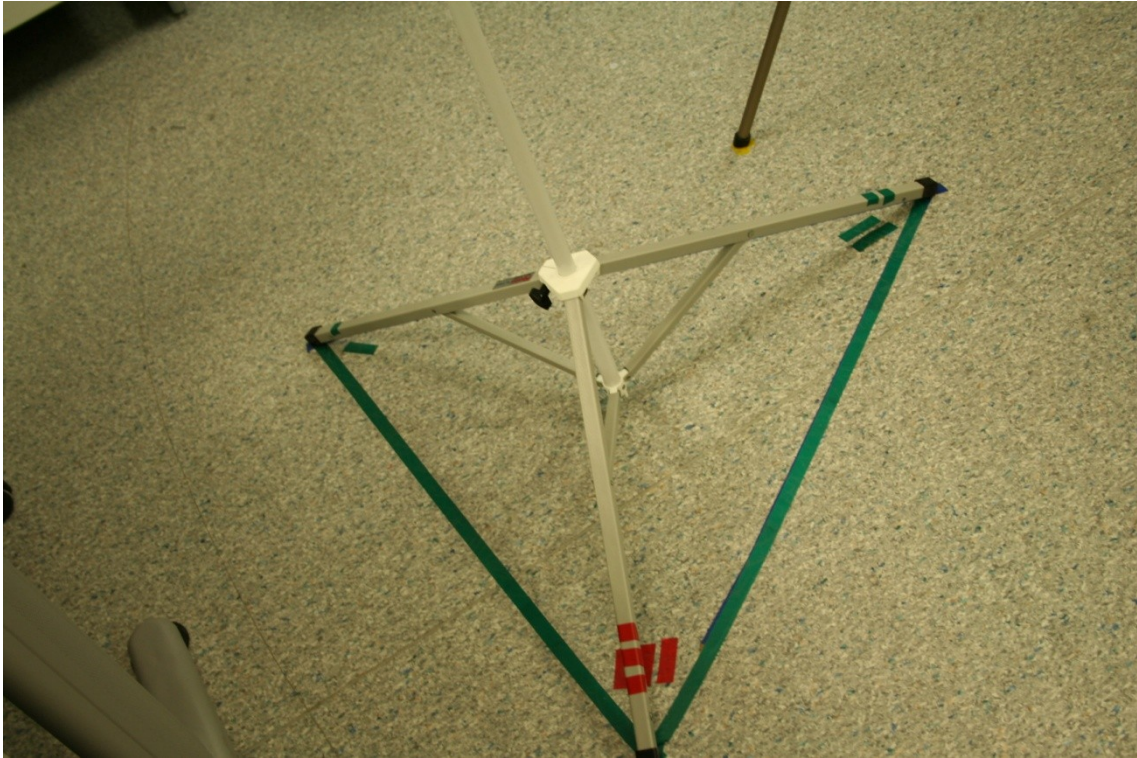


Figura B.9 - Marcas de posición de los focos de iluminación y la cámara fotográfica (arriba)

A fin de calibrar el efecto de la iluminación no homogénea sobre la imagen final, se fotografió un panel de aglomerado pintado de color gris medio. Este panel proporciona una superficie lambertiana casi perfecta y constituye una alternativa muy ventajosa frente a las superficies lambertianas convencionales (fabricadas en Spectralon o similar). (Fig. B.10)



Figura B.10 – Montaje del panel de color gris medio

La imagen obtenida se procesó con las herramientas de análisis de imagen del paquete informático Matlab 7.1

La estructura básica de datos en MATLAB es la matriz de valores, entendida como un conjunto de valores reales o complejos de color o intensidad. MATLAB almacena las imágenes monocromáticas como matrices bidimensionales, donde cada elemento de la matriz corresponde al valor de intensidad de cada píxel de la imagen representada. Es decir, que una imagen de 200 por 300 píxel, quedaría almacenada como una matriz de 200 por 300 elementos. Las imágenes en color requieren, sin embargo, una matriz tridimensional, donde el primer plano representa las intensidades de cada píxel en el canal rojo, el segundo plano en el canal verde y el tercer plano los valores en el canal azul. (Figura B.11)

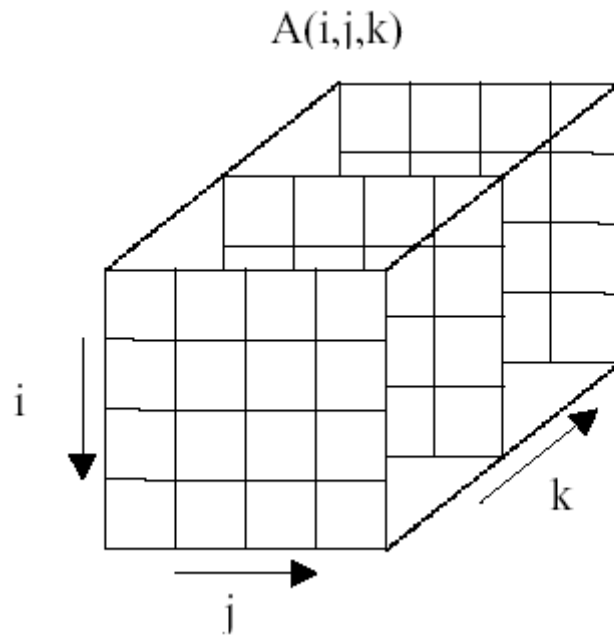


Figura B.11 - Matriz tridimensional en Matlab. Cada uno de los planos informa del valor del píxel en los distintos canales de color

De este modo, en Matlab el trabajo con imágenes es similar al trabajo con cualquier otro tipo de datos, aprovechándose de ese modo toda la potencia de cálculo de la computadora.

Para calibrar el efecto de la iluminación no uniforme se procesó la imagen tomada de una superficie gris utilizando para ello la herramienta de imagen integrada, imtool. (Figura B.12)

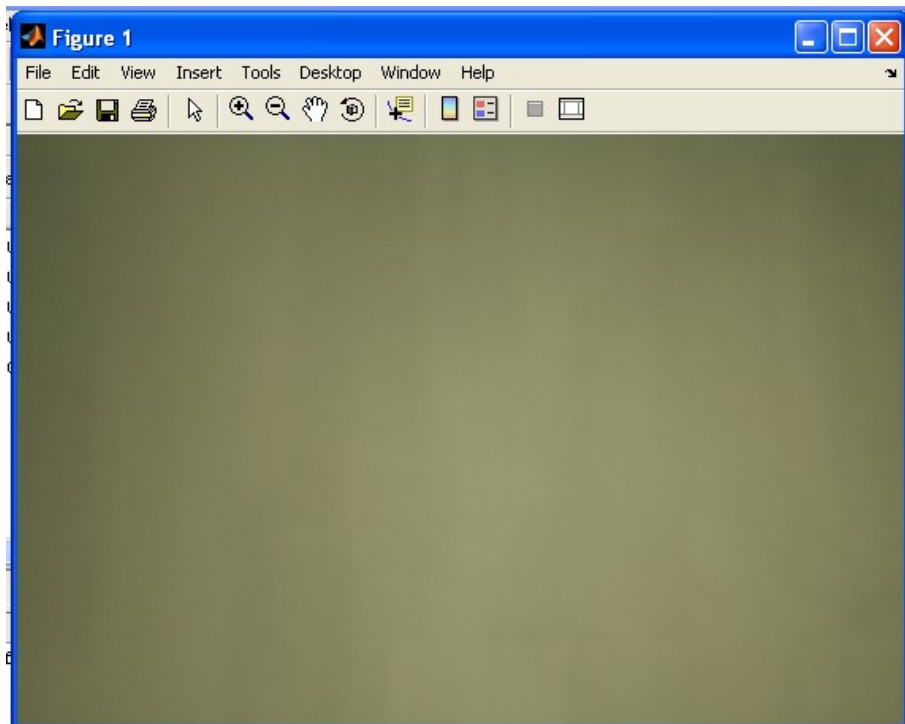


Figura B.12 - Herramienta de imagen imtool

Las porciones exteriores de la superficie gris quedaron menos iluminadas que las porciones del centro, lo que resulta inevitable debido a la existencia de focos de iluminación. Por tanto, hay que compensar la iluminación irregular. Se utilizó, asimismo el marco gris para compensar esta iluminación no homogénea utilizando la técnica de corrección de “campo plano”. Esta corrección consta de cinco pasos:

- 1.- Las imágenes fueron transformadas desde el sistema de coordenadas de color RGB al sistema de coordenadas HVS, tono (H), saturación (S) y valor (V). La variable V representa el brillo de un píxel. Si la iluminación fuese uniforme, el valor de V sería constante a lo largo del marco gris. Como se aprecia en la Figura B.13, este valor de iluminación es superior en la parte central e inferior en la exterior. Por tanto, estos datos de brillo a lo largo del panel pueden ser utilizados para corregir las diferencias de iluminación en la fotografía digital

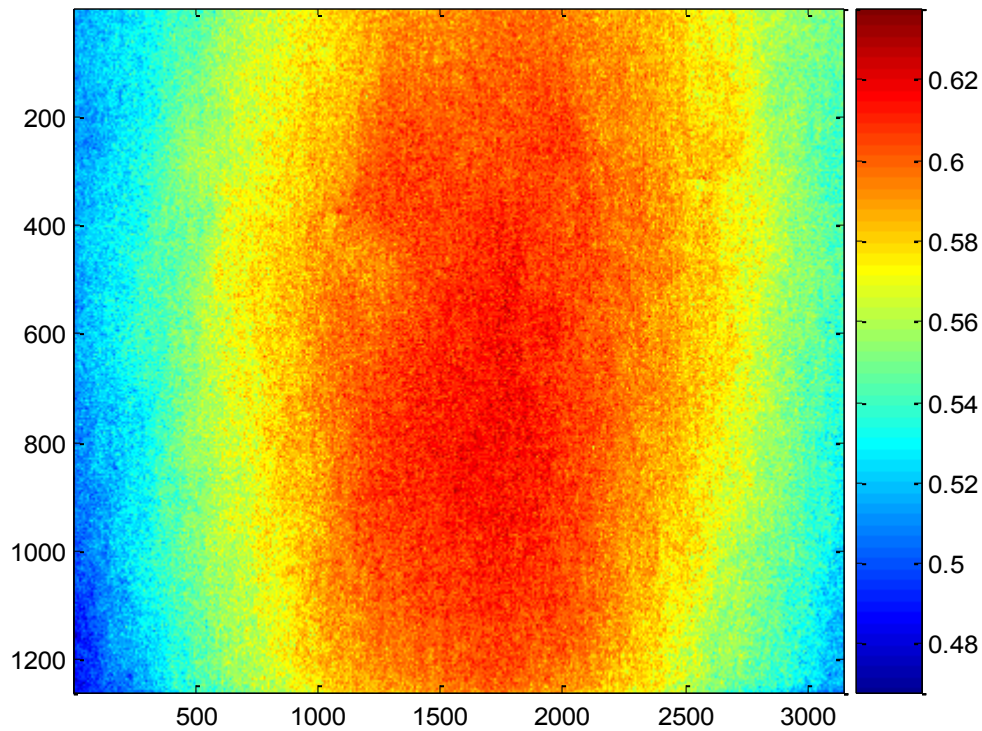


Figura B.13 - Aspecto gráfico del campo de Valor (V)

2.- Con los datos de valor obtenidos, se muestrea el $V(x,y)$ en los píxeles del panel y se calcula su media \bar{V} .

3.- El inverso escalado de V , $\bar{V} / V(x,y)$ se modela como una función cuadrática de coordenadas (x,y) y el modelo se ajusta por mínimos cuadrados. Estos valores modelados $V_{\text{mod}}(x,y)$ interpolan el inverso del valor del brillo a través de la imagen total. A pesar de que se podría utilizar un polinomio de grado mayor, se escoge una función cuadrática puesto que los resultados preliminares muestran un aspecto elíptico (Figura B.14). El modelo responde a la ecuación:

$$V_{\text{mod}} = 1.1476 - 2.215 \cdot 10^{-4} \cdot x - 7.008 \cdot 10^{-5} \cdot y + 6.495 \cdot 10^{-8} \cdot x^2 + 6.2732 \cdot 10^{-8} \cdot y^2$$

cuyo error medio cuadrático fue de $\text{RMSE} = 0,0105$ y su valor de R^2 fue de 0,96. (Figura B.14)

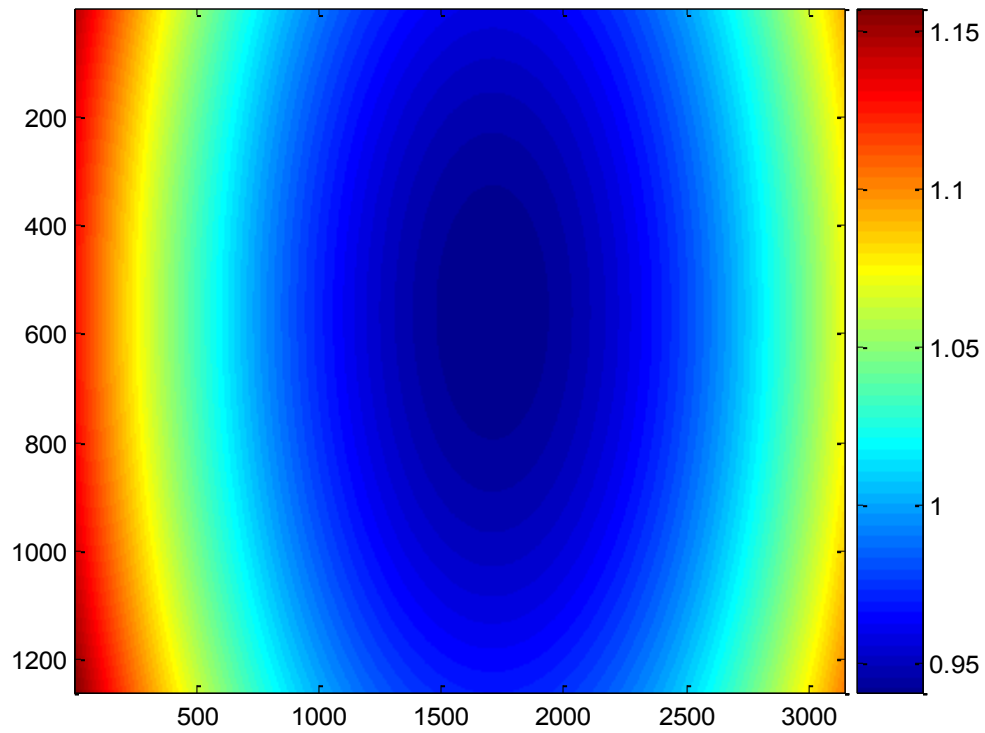


Figura B.14 – Modelo del inverso de la variable “valor”, $V_{\text{mod}(x,y)}$

4.- El brillo de la imagen se corrige multiplicando el valor $V(x,y)$ por el valor de $V_{\text{mod}}(x,y)$ en cada píxel.

5.- Los valores ajustados de V se recombinan con los valores originales de H y S y la imagen resultante se vuelve a trasladar al espacio RGB. El resultado corregido de la Figura B.13 se observa en la Figura B.15

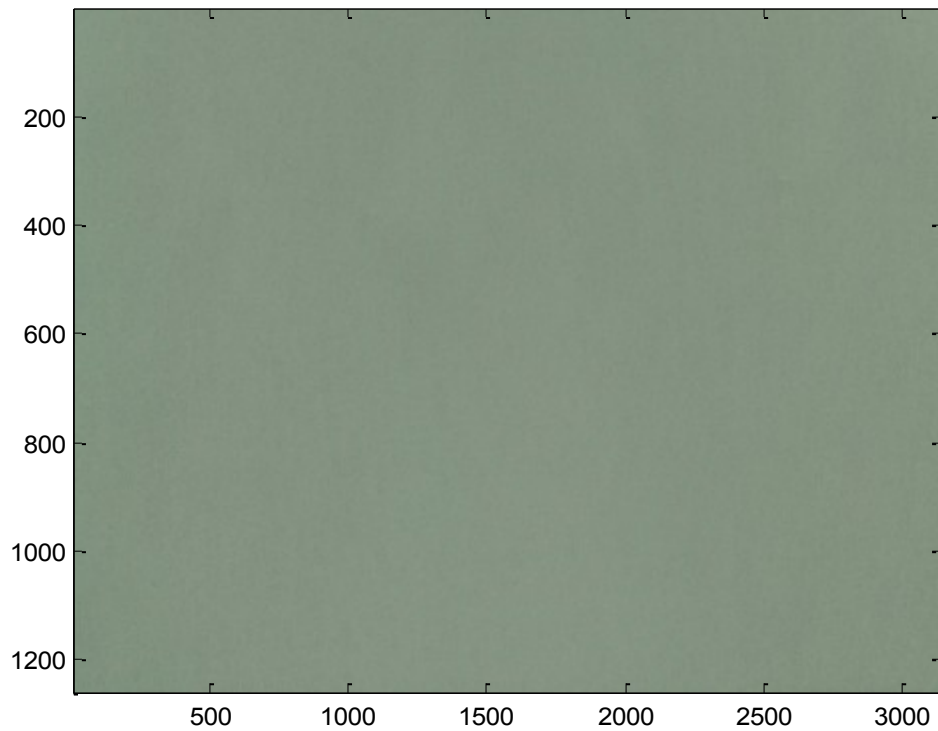


Figura B.15 - Campo de iluminación corregido

El campo $V_{\text{mod}}(x,y)$ indica cómo hay que modificar el valor de los canales RGB de la imagen para obtener una fotografía donde no existan efectos de iluminación no homogénea.

B.3.3 Corrección de color de fondo no homogéneo y cálculo de concentraciones

El valor del color obtenido mediante fotografía digital en la zona en que se encuentra el trazador es la suma del debido al trazador y el debido al propio medio. Como se explicó anteriormente, el color debido al medio no es homogéneo, debido a estratificaciones horizontales y diagonales.

Puesto que lo que se desea es obtener la señal de color debida exclusivamente al trazador para poder calibrar la relación intensidad de color – concentración, hay que restar de la imagen obtenida, la componente debida al color del medio.

Para ello, se realizaron 40 disoluciones de trazador Brilliant Blue variando su concentración desde 11,86 gr/l hasta 0,002679 gr/l. Todas ellas se introdujeron en tubos de ensayo llenos de la misma arena utilizada en el tanque. Uno de los problemas importantes en esta aplicación corresponde a que si bien se puede considerar el color de una disolución homogéneo, no es posible decir lo mismo del sustrato que satura. El color de cada grano de arena individual es diferente de los vecinos, por lo que existirá una componente de ruido inevitable.

De todas estas disoluciones se tomaron imágenes digitales y, tras ser corregidos los efectos de iluminación no homogénea de la forma explicada en el punto anterior, se aisló de la imagen la parte correspondiente a la solución coloreada. Se fotografió asimismo un tubo de ensayo con arena saturada con agua destilada. Este tubo se utilizó como blanco, cuyos valores promedio en los tres canales de color R_0 , G_0 y B_0 , fueron restados a los valores del promedio de los tres canales de color de los tubos con disoluciones de trazador. De ese modo, los datos restantes son achacables únicamente a la concentración del trazador. (Figura B.16)

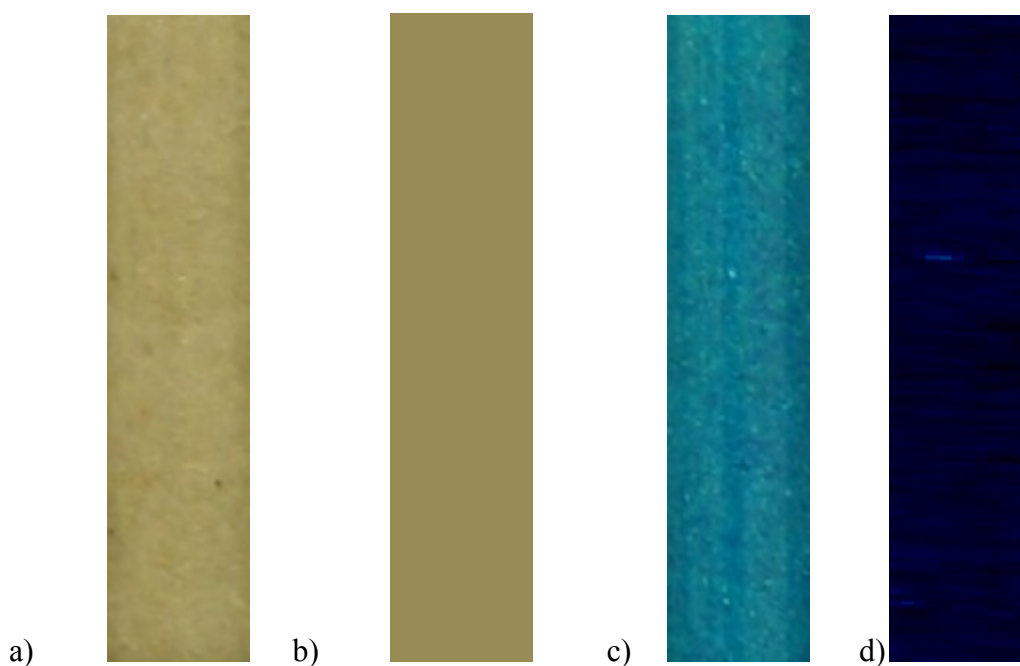


Figura B.16 - Imágenes del medio, a) sin trazador , b) del valor promedio del blanco , c) del medio con una concentración de trazador 0,354 gr/l, y d) parte de la imagen anterior debida únicamente a la concentración de trazador

Para cada muestra, se tomó una media de los canales R , G , y B en un área aproximada de 100 x 400 píxeles, valores que se denominan R_s , G_s y B_s . Para calcular esta media, se obtuvo la función de densidad de probabilidad de estos valores y se modelaron según una distribución normal, de la que se obtuvo su media y su desviación típica. (Figura B.17)

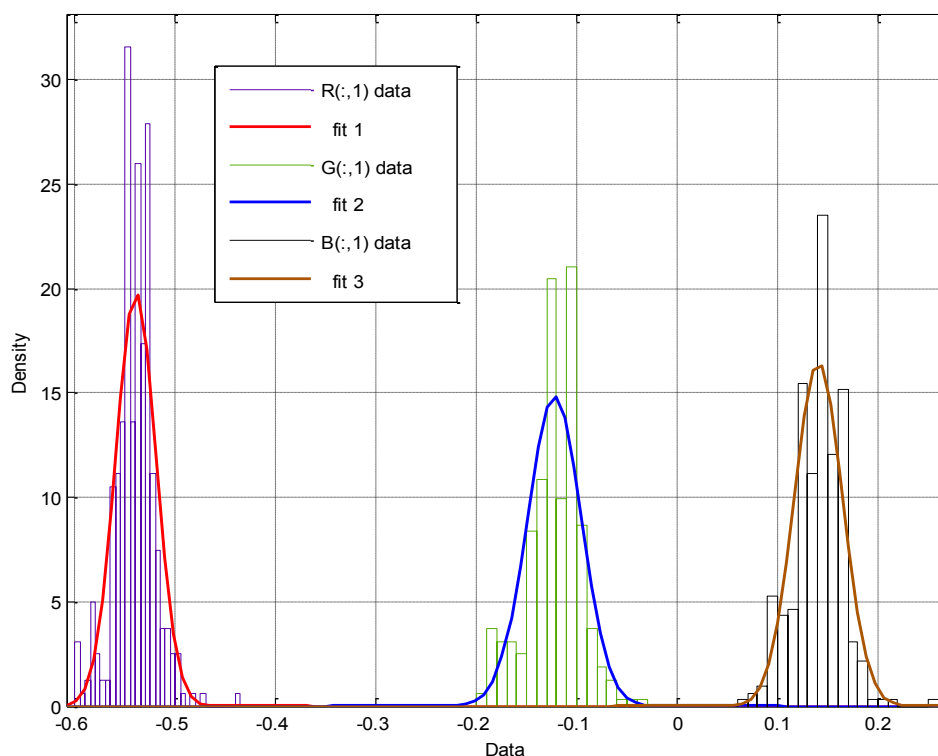


Figura B.17 - Ajuste de los valores para el canal azul de la imagen obtenida para una concentración de trazador de 0,354 gr/l

Los logaritmos de la concentración del trazador C de las muestras, en gramos/litro fueron ajustados paso a paso a través de un polinomio de segundo orden frente a los valores promedio muestrales de R_s , G_s y B_s de las distintas muestras. La expresión del polinomio de segundo orden para el logaritmo de las concentraciones de Brilliant Blue, resultó como sigue:

$$\log C(\text{gr/l}) = -3.2754 - 10.2516\bar{R} - 6.4104\bar{G} + 5.7154\bar{B} - 14.6265\bar{R}^2 - 12.6479\bar{G}^2 - 1.4025\bar{B}^2 + 8.1113\bar{R} \cdot \bar{G} - 1.4478\bar{R} \cdot \bar{B} + 21.2332\bar{G} \cdot \bar{B}$$

Las estadísticas de esta regresión pueden resumirse como:

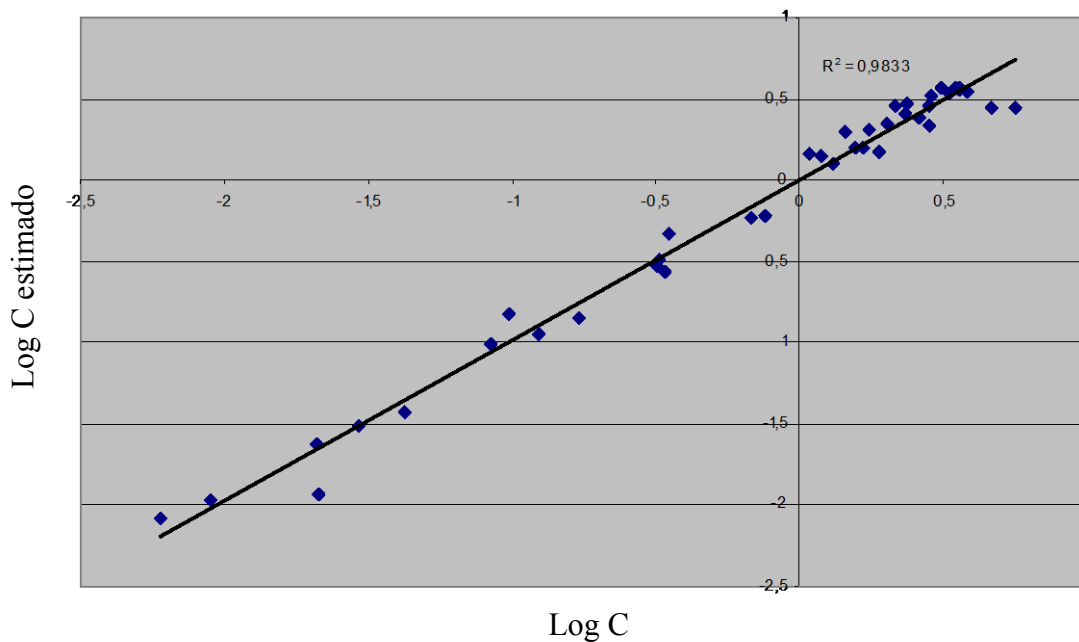
<i>Estadísticas de la regresión</i>	
Coefficiente de correlación múltiple	0,991613512
Coefficiente de determinación R ²	0,983297356
R ² ajustado	0,982857813
Error típico	0,107841402
Observaciones	40

<i>ANÁLISIS DE VARIANZA</i>	<i>Grados de libertad</i>	<i>Suma de cuadrados</i>	<i>Promedio de los cuadrados</i>	<i>F</i>	<i>Valor crítico de F</i>
					2,21607E-
Regresión	1	26,01682536	26,01682536	2237,088929	35
Residuos	38	0,441931186	0,011629768		
Total	39	26,45875655			

Tabla B.2 - Estadísticas de regresión del ajuste de color

Se observa que el ajuste de las muestras es muy bueno ($R^2 = 98,33$, Figura B.18), por lo que es realista asumir que las desviaciones se deben a la componente de ruido inevitable debido a la coloración individual de los granos de arena. Sin embargo, esta componente es muy pequeña, por lo que es posible utilizar este método de imagen digital para estimar la concentración del trazador Brilliant Blue en nuestro estudio.

Ajuste de la regresión



Se observa, además, que los residuos tienen media nula y sin correlación entre sí. (Figura B.19)

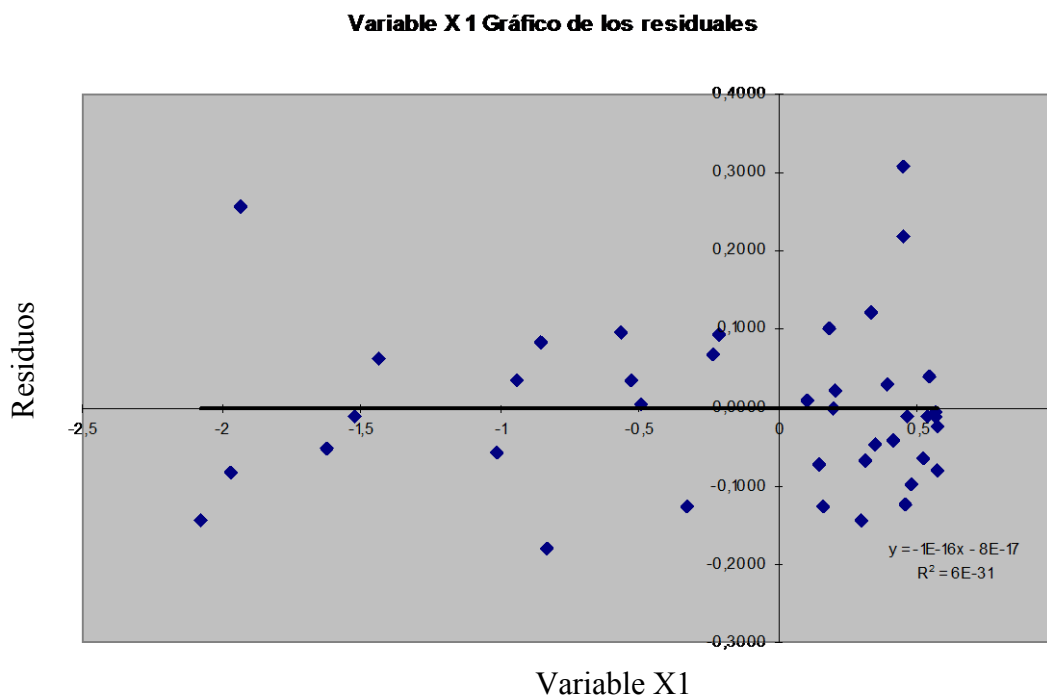


Figura B.19 - Gráfico de residuos del ajuste del color de fondo no homogéneo mostrando media nula y no correlación

La interpretación de las variables y coeficientes de estas ecuaciones no son sencillas, porque estamos utilizando un modelo de regresión con términos mixtos en lugar de un modelo físico. Al haber tratado los datos de color mediante herramientas estadísticas, éstos pierden su significado físico. Aunque el ajuste final sea muy bueno, los coeficientes de ajuste dependen enormemente de las condiciones de iluminación, la distancia la cámara o el ángulo de la imagen. Es importante mantener estas características constantes y controladas a la hora de asegurar la exactitud de los resultados. Por ello es muy importante dejar instalados todos los dispositivos de toma de datos desde el principio de un ensayo con trazadores hasta su completa finalización.

Mediante estos ajustes puede estimarse de una forma fiable la concentración de un trazador en un punto dado a lo largo del tiempo, así como su evolución.
