



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA CIVIL

VISUALIZACIÓN EXPERIMENTAL DE PROCESOS DE TRANSPORTE DE SOLUTOS
EN MEDIOS PERMEABLES SATURADOS BIDIMENSIONALES

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA
INGENIERÍA, MENCIÓN RECURSOS Y MEDIO AMBIENTE HÍDRICO

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL

EDINSSON VÍCTOR MUÑOZ VEGA

PROFESOR GUÍA:
PAULO HERRERA RICCI

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
ALBERTO DE LA FUENTE STRANGER
FRANCISCO SUÁREZ POCH

SANTIAGO DE CHILE
2016

**Resumen de la tesis para optar al
Título de Ingeniero Civil y Grado de Magíster
en Ciencias de la Ingeniería, Mención Recursos
y Medio Ambiente Hídrico
Por: Edinsson Víctor Muñoz Vega
Fecha: Mayo 2016
Prof. Guía: Paulo Herrera Ricci**

**VISUALIZACIÓN EXPERIMENTAL DE PROCESOS DE TRANSPORTE DE SOLUTOS EN MEDIOS
PERMEABLES SATURADOS BIDIMENSIONALES**

Los procesos de transporte de masa en flujos de agua subterránea han sido estudiados ampliamente en la literatura, debido a que gobiernan el transporte de contaminantes u otras sustancias disueltas. Una buena caracterización de los procesos de transporte ha de permitir por ejemplo, la optimización de sistemas de remediación o la predicción de las trayectorias y tiempos de viaje de contaminantes en acuíferos, lo que podría tener importancia en el análisis de la contaminación de pozos y aguas superficiales, entre otros.

Diversos estudios coinciden en el importante rol que cumple la heterogeneidad en los procesos de mezcla transversal, dado que las líneas de corriente tienden a converger o divergir dependiendo de la distribución de permeabilidades. La convergencia de las líneas de corriente en zonas de mayor conductividad hidráulica aumenta los gradientes de concentración en la dirección transversal al flujo, lo que tiene como efecto una mayor mezcla transversal y dilución natural, procesos responsables de permitir las reacciones químicas entre especies en el agua subterránea. Una aplicación importante de este fenómeno es la remediación de sitios contaminados a través del uso de barreras reactivas permeables, donde se dirige el flujo a una zona de mayor permeabilidad, en la cual se llevan a cabo procesos químicos o físicos que permiten tratar agua contaminada.

El uso de técnicas de análisis de imágenes para el estudio de los procesos de transporte en medios permeables se ha vuelto más común en los últimos 20 años, pues permite caracterizar campos de concentraciones de un soluto mediante el estudio de fotografías. Este trabajo desarrolló un montaje experimental que busca emular el transporte de un trazador conservativo en dos tipos de medios permeables saturados bidimensionales (uno homogéneo y otro heterogéneo). Se realizaron diferentes ensayos para caracterizar las propiedades hidráulicas de los medios utilizados (microesferas de vidrio) y las características ópticas del trazador (Blue Brilliant). A través de análisis de imágenes se logró calcular el campo de concentraciones de ambos experimentos, resultados que fueron comparados a soluciones teóricas y modelos numéricos.

Los resultados de ambos experimentos fueron comparados entre sí, cuantitativamente, a través del índice de dilución relacionado al flujo (Rolle *et al.*, 2009). Se obtuvo que en el caso heterogéneo el índice de dilución es 1,51 veces mayor al del caso homogéneo, similar a resultados de estudios anteriores que postulan que la heterogeneidad aumenta la mezcla transversal de un trazador conservativo.

A Óscar, por todo lo que he aprendido de ti a lo largo de una vida juntos.

Agradecimientos

A mi familia. A mi padre Edinsson y a mi madre Gladys, porque son lo mejor que existe en este mundo. Si es que algo soy en la vida se lo debo a ustedes. Agradezco todo lo que se han esforzado por entregarme valores, afecto, risas, llantos, retos y enseñanzas. Agradezco la lucha que dan día tras día por mi hermano. Agradezco que se amen tanto entre ustedes y que puedan inundar a mi hermano y a mí con ese sentimiento. Le doy gracias también a mi abuelo Pedro, por transmitirme que con esfuerzo todo se puede y a mi abuelita por su ternura. A mi tío Óscar, porque gracias a ti el mundo de las matemáticas empezó a ser más ameno en mi vida cuando era un niño.

A la vida por haberme permitido estudiar en un lugar increíble. Pasé más de 8 años de mi vida aquí. Conocí infinita gente, de las realidades más diversas. Pude asistir a cátedras de tremendos profesores, ir a charlas magistrales, salir a buenos terrenos, convivir con la ciencia chilena, sentirme parte de un lugar histórico. Pude entender que lo que este país necesita es más lugares como este.

A toda la gente de Hidráulica que me ayudó en este proceso. A la Jacque por ser como la mamá Rumpy del tercer piso y porque siempre que le pedí un favor me ayudó con buena onda y una talla. A la Vivi, por haberme abierto las puertas del laboratorio de Calidad de Aguas y porque siempre la vi con una sonrisa y fe en Dios, a pesar de la vida. A JD, por ser un viejo crack, mi amigo y por todas esas cazuelas que nos mandamos. Al Sensei, porque gracias a ti había parrilla, disco, cuchillos y de todo en el Laboratorio. Además de todas las veces que me prestaste herramientas te agradezco todas esas conversas y tus ganas de siempre andar echando la talla. También agradezco a Manuel, porque siempre me ayudó cuando se lo solicité.

A Paulo. Aprendí mucho de usted y creo ser hoy mejor ingeniero que antes gracias a la exigencia de su trabajo. Le deseo mucha suerte en sus proyectos futuros. A los otros profesores de Hidráulica también les agradezco mucho, en especial a Beto y a Marcelo por haberme permitido ser su auxiliar. Al profe Yarko por ser un crack y por siempre haberme ayudado en todos los favores burocráticos que le pedí.

A todos los amigos de la Universidad que hice en este largo camino. A la gente de plan común: Bambino, Mono, Barbieri, Richi, Pelao Contreras, Seba Rojas (mención aparte a ti y tus locuras, te quiero amigo). A los aldeanos: Ramiro, Saintard, Abuelo, Marin, Fran, Richard. A Nacho Cartes y Miguel Sáez por ser los pequeños gigantes. A la gente de Hidráulica: Jano Aguado, Balbo, Fepo, Tario, Dany H, Vicky, Pauli.

A los que dieron cara conmigo en el mítico Pancho J: Williño y Choro Peter, cuánto aguante cabros.

A los que hoy por hoy son mis más grandes amigos. Rolo: jamás tendré palabras para agradecerte tanto. Eres un pedazo de ser humano y nunca cambies por favor. OSS: Eres un grande wn, no por eso menos rata, pero grande. El destino ya nos encontrará por ahí, como siempre, con una buena pilsen y un buen bajón. Soto: Qué personaje. Gracias porque de ti aprendí que al mal tiempo buena cara. Por todos los sunos y por esas buenas pedaleadas que me ayudaron a terminar la tesis. GZ, Pino y Alex: Simplemente porque juntos son dinamita y cada uno es una persona maravillosa. Jamás olvidaré ese viaje juntos y me alegro que el Magister me haya permitido coincidir con ustedes. Un color especial: Ese grupo algún día será famoso. Los quiero mucho a todos cabros.

A mis amigos del colegio, porque a lo largo de los años no cambian y siempre es un agrado compartir y conversar sanamente (sí hombre) con ustedes. A Mauri, Manzana, Lara, Kalamar, Pipo, Piter, Pato, Guti, Gus, Nacho y Tata. Aprovecho este párrafo para mis amigos de la pensión: Pelao Malo, Taira, las gemelas Campos, Ramwell, Jorge, Potón y Schencke. Un abrazo a todos y siempre podrán contar conmigo.

A mi hermano Óscar por ser el guerrero más grande de este mundo. Sigue luchando hermano. Te amo como nunca un hermano amó a otro.

A Karina, porque en la época más difícil de mi vida llegó a apoyarme con su amor. Te amo con todo el corazón y no hay nada que no te haya dicho. En tus brazos encuentro paz y no quiero soltarlos nunca más.

Tabla de contenido

1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Objetivos	2
2. Marco Teórico	3
2.1. Conceptos generales	3
2.1.1. Flujo de agua subterránea	3
2.1.2. Procesos de transporte de solutos en agua subterránea	5
2.2. Estado del arte y revisión bibliográfica	9
2.3. Problema en estudio y modelo conceptual	14
3. Metodología	16
3.1. Descripción del montaje experimental	16
3.2. Elección medio permeable y determinación de sus propiedades	18
3.2.1. Granulometría	19
3.2.2. Conductividad hidráulica	19
3.2.3. Dispersividad longitudinal	19
3.3. Propiedades del trazador Blue Brilliant	20
3.4. Toma y procesamiento de imágenes	22
3.5. Análisis de la fuente de iluminación	25
4. Resultados	29
4.1. Experimento homogéneo	29
4.1.1. Descripción del experimento	29
4.1.2. Análisis de imágenes	29
4.1.3. Modelación numérica del experimento	32
4.1.4. Comparación a solución teórica	34
4.2. Experimento heterogéneo	36
4.2.1. Descripción del experimento	36
4.2.2. Análisis de imágenes	38
4.2.3. Modelación numérica del experimento	41
4.2.4. Comparación a solución teórica del experimento homogéneo	43
4.3. Comparación entre experimento homogéneo y heterogéneo	44
4.3.1. Concentraciones obtenidas mediante análisis de imágenes	44
4.3.2. Cálculo índice de dilución relacionado al flujo	45
5. Conclusiones	51
5.1. Montaje experimental	51
5.2. Análisis de imágenes	51
5.3. Índice de dilución relacionado al flujo	52

Bibliografía	54
Anexos	58
Anexo A. Fotografías del montaje experimental	59
Anexo B. Determinación propiedades de los medios permeables utilizados	61
B.1. Granulometría	61
B.2. Conductividad hidráulica	62
B.3. Dispersividad longitudinal	63
Anexo C. Fotografías de la calibración del experimento homogéneo	68
Anexo D. Fotografías de la calibración del experimento heterogéneo	69
Anexo E. Cálculo del índice de dilución relacionado al flujo para distintos largos de inclusión mediante modelo numérico	70
Anexo F. Discusión solución de Domenico	72
Anexo G. Cálculo de los momentos espaciales del experimento homogéneo	75

Índice de figuras

2.1.	Esquema de experimento de Darcy. En los puntos 1 y 2 se tienen medidas de la carga hidráulica h . La coordenada s es paralela a la columna	3
2.2.	Variaciones de velocidad a la escala de poros. La mayor velocidad se alcanza en la lejanía de las paredes del suelo, mientras que la menor velocidad es en la región cercana a la pared, debido a la condición de no deslizamiento.	6
2.3.	Coefficientes de dispersión longitudinal (a) y de dispersión transversal (b) versus el número de Péclet para diferentes experimentos reportados en la literatura. Fuente: Delgado, 2007.	11
2.4.	Efecto de la heterogeneidad en el transporte de un trazador conservativo. Fuente: Rolle <i>et al.</i> (2009)	14
2.5.	Esquema problema teórico de un acuífero semi infinito, con campo de velocidad unidireccional	14
3.1.	Esquema vista frontal montaje experimental.	17
3.2.	Esquema vista lateral del montaje experimental.	18
3.3.	Absorbancia v/s longitud de onda, para diversas concentraciones.	20
3.4.	Relación absorbancia v/s concentración de BB.	22
3.5.	Experimento preliminar. La Figura A muestra una fotografía del estado inicial, es decir del tanque relleno con microesferas de vidrio saturadas con agua clara. La Figura B muestra un estado intermedio y la Figura C es una fotografía del estado final, es decir de las microesferas saturadas con BB.	23
3.6.	Variación de intensidades del modelo de color RGB en un pixel representativo del experimento, sin uso de filtro en el lente de la cámara.	24
3.7.	Variación de intensidades del modelo de color RGB en un pixel representativo del experimento, con uso de filtro en el lente de la cámara.	24
3.8.	Intensidades de luz en una franja transversal representativa del tanque para el estado saturado con agua (azul), estado mitad derecha del tanque con BB (rojo) y estado saturado de BB (verde).	25
3.9.	Análisis de iluminación por parte trasera. A) Tanque saturado con agua. B) Franja de celofán en parte posterior del tanque. C) Franja de celofán en parte delantera del tanque.	26
3.10.	Intensidad de luz para la situación con franja de papel celofán por detrás, por delante y sin celofán en el tanque. Iluminación por detrás del tanque.	27
3.11.	Análisis de iluminación por parte delantera. A) Tanque saturado con agua. B) Franja de celofán en parte delantera del tanque.	28
3.12.	Intensidad de luz para la situación con franja de papel celofán por delante y sin celofán en el tanque. Iluminación por delante del tanque.	28
4.1.	Imagen estado permanente experimento homogéneo. Se muestra el área de estudio analizada.	30

4.2.	Relación concentración de trazador versus absorción de luz para 18.899 pixeles (1 % área de estudio). Calibración experimento homogéneo.	31
4.3.	Mapa de concentraciones del área de análisis del experimento homogéneo, obtenido mediante análisis de imágenes.	32
4.4.	Resultados modelo numérico en GMS del experimento homogéneo. A la izquierda se muestran las líneas de corriente y a la derecha las concentraciones modeladas.	33
4.5.	Concentraciones obtenidas para el área de análisis mediante el modelo numérico en el experimento homogéneo.	34
4.6.	Dispersividad transversal para cada franja del dominio. Experimento homogéneo.	35
4.7.	Solución teórica para el área de estudio. Experimento homogéneo.	36
4.8.	Resultados obtenidos mediante imágenes, modelo numérico y solución teórica para el experimento homogéneo, en $x = 55 [cm]$	37
4.9.	Estado permanente del experimento heterogéneo. Se muestra el área de estudio analizada.	38
4.10.	Relación concentración de trazador versus absorción de luz para 18.850 pixeles, equivalente al 1 % área de estudio). Calibración experimento heterogéneo. . .	39
4.11.	Imagen estado permanente experimento heterogéneo. Se muestra el área de estudio analizada.	40
4.12.	Mapa de concentraciones del área de análisis del experimento heterogéneo, obtenido mediante análisis de imágenes.	40
4.13.	Resultados modelo numérico en GMS del experimento heterogéneo. A la izquierda se muestran las líneas de corriente y a la derecha las concentraciones modeladas.	41
4.14.	A) Concentraciones obtenidas para el área de análisis mediante el modelo numérico en el experimento homogéneo. B) Concentraciones obtenidas para el área de análisis mediante el modelo numérico en el experimento heterogéneo.	42
4.15.	Dispersividad transversal para cada franja del dominio. Experimento heterogéneo.	43
4.16.	Resultados obtenidos mediante imágenes, modelo numérico y solución teórica para el experimento heterogéneo en $x = 55 [cm]$	44
4.17.	Mapas de concentraciones obtenidos mediante imágenes. A la izquierda el experimento homogéneo y a la derecha los resultados del experimento heterogéneo.	45
4.18.	Concentraciones obtenidas mediante imágenes para $x = 55 [cm]$ en ambos experimentos.	46
4.19.	Campos de velocidad simulados en GMS para ambos experimentos.	49
A.1.	Vista frontal montaje experimental.	59
A.2.	Cámara fotográfica en su estructura de soporte.	60
A.3.	Una de las dos bombas peristálticas.	60
B.1.	Curva granulométrica microesferas de vidrio $d_{50} = 0,52 [mm]$	61
B.2.	Esquema permeámetro.	62
B.3.	Esquema montaje experimental ensayos de dispersividad.	65
B.4.	Concentraciones de BB medidas junto a solución analítica, $d_{50} = 0,52 [mm]$.	66
B.5.	Concentraciones de BB medidas junto a solución analítica, $d_{50} = 1 [mm]$. . .	66

B.6.	Concentraciones de BB medidas junto a solución analítica, $d_{50} = 2$ [mm]. . .	67
C.1.	Imágenes de la calibración del experimento homogéneo. En orden alfabético las concentraciones son $C = [0; 0.58; 1.00; 4.89; 9.9; 14.15; 19.02; 23.81; 28.30]$ [mg/L].	68
D.1.	Imágenes de la calibración del experimento heterogéneo. En orden alfabético las concentraciones son $C = [0; 0.59; 1.26; 5.34; 10.90; 16.98; 22.04; 25.45; 29.01]$ [mg/L].	69
E.1.	Concentraciones obtenidas de las simulaciones numéricas a la salida de la grilla, para distintos largos de inclusión.	70
F.1.	Esquema problema teórico de un acuífero en dominio acotado, con campo de velocidad unidireccional.	73
F.2.	Utilización del método de las imágenes.	73
F.3.	Solución de Domenico en dominio infinito versus la de dominio acotado, evaluada mediante el método de las imágenes.	74
G.1.	Porosidad estimada para cada franja del dominio. Experimento homogéneo. .	76
G.2.	Momento de orden uno normalizado. Experimento homogéneo.	76
G.3.	Variación espacial segundo momento transversal centralizado y normalizado. Experimento homogéneo.	77

Índice de tablas

3.1. Valores de conductividad hidráulica obtenidos.	19
3.2. Valores de dispersividad longitudinal obtenidos.	19
3.3. Valores de absorbancia obtenidos para cada muestra de BB.	21
4.1. Parámetros para el cálculo del índice de dilución	48
4.2. Índice de dilución relacionado al flujo para ambos experimentos, en franja $x = 55 [cm]$, obtenidos del análisis de imágenes.	50
4.3. Índice de dilución relacionado al flujo para ambos experimentos, en franja $x = 55 [cm]$, obtenidos de las simulaciones numéricas.	50
B.1. Valores de Q y ΔH medidos.	63
B.2. Valores de conductividad hidráulica obtenidos.	63
B.3. Valores de dispersividad longitudinal obtenidos.	65
E.1. Índice de dilución relacionado al flujo para distintos largos de inclusión. Se obtienen en base a las concentraciones calculadas en GMS, para la sección de salida del tanque.	71

1. Introducción

1.1. Motivación

Los procesos de transporte de masa en flujos de agua subterránea han sido estudiados ampliamente en la literatura, debido a que gobiernan el transporte de contaminantes u otras sustancias disueltas. Estos procesos comenzaron a ser estudiados hace más de un siglo, desde el trabajo experimental de Slichter (1905) con mediciones de campo para estudiar el flujo de agua subterránea, teniendo un mayor desarrollo en las décadas de 1960 y 1970. Una buena caracterización de los procesos de transporte ha de permitir, por ejemplo, la optimización de sistemas de remediación, predicción de las trayectorias y tiempos de viaje de contaminantes en acuíferos; lo que tiene importancia en el análisis de la contaminación de pozos y aguas superficiales, entre otros.

Un trazador no reactivo moviéndose a través de un medio permeable saturado está sujeto a dos procesos de transporte fundamentales, advección y dispersión. La dispersión es la causa de que el trazador se extienda sobre un área mayor que la que ocuparía sólo debido al transporte advectivo (Bear, 1972), producto de diferencias en la velocidad. La dispersión longitudinal extiende la pluma en la dirección del flujo, mientras que la transversal es la responsable de la extensión de la pluma de trazador en la dirección perpendicular al flujo. Si bien es cierto que la dispersión transversal es menor a la longitudinal, ésta determina los procesos de mezcla transversal, los cuales controlan las reacciones de plumas de contaminantes en el agua subterránea (Cirpka *et al.*, 1999; Liedl *et al.*, 2005; Rolle *et al.*, 2009). Debido a esto en los últimos años se han realizado una gran cantidad de estudios numéricos y/o experimentales que buscan cuantificar los fenómenos de dispersión transversal (Werth *et al.*, 2006; Acharya *et al.*, 2007; Olsson & Grathwohl, 2007; Rolle *et al.*, 2009; Chiogna *et al.*, 2009; Ballarini *et al.*, 2012; Ballarini *et al.*, 2014; Ye *et al.*, 2015). Dichos estudios coinciden en el importante rol que cumple la heterogeneidad del campo de permeabilidades en los procesos de mezcla transversal, dado que las líneas de corriente tienden a converger o divergir dependiendo de la distribución de permeabilidades. La convergencia de las líneas de corriente en zonas de mayor conductividad hidráulica aumenta los gradientes de concentración en la dirección transversal al flujo, lo que tiene como efecto una mayor mezcla transversal (Werth *et al.*, 2006; Willingham *et al.*, 2008; Chiogna *et al.*, 2011; Cirpka *et al.*, 2011).

Esta tesis busca ser una contribución más en este tema, a través de la cuantificación de como la heterogeneidad aumenta la mezcla de un compuesto. Para ello se realizan dos experimentos de laboratorio (uno homogéneo y otro heterogéneo), donde se busca describir los campos de concentraciones de un trazador conservativo, a través de análisis de imágenes. Dicha técnica tiene la ventaja de ser no intrusiva (no altera el flujo) y de bajo costo (no requiere sensores sofisticados). Se realiza la modelación numérica de los experimentos en el software *Groundwater Modelling System* (GMS), para comparar a los resultados experimentales. En base a los campos de concentraciones obtenidos experimentalmente se busca demostrar que

la heterogeneidad aumenta los procesos de mezcla.

1.2. Objetivos

El objetivo general de este estudio es realizar experimentos de laboratorio que emulen el transporte de un soluto conservativo en medio homogéneos y heterogéneos y comparar los resultados con un modelo numérico. Se busca en base a los resultados obtenidos estimar parámetros de dilución.

Los objetivos específicos son:

1. Construcción de tanques de acrílico en laboratorio que permitan emular medios permeables y las condiciones de flujo y transporte que éstos presentan.
2. Caracterizar el transporte en medios permeables, mediante el uso de técnicas de análisis de imágenes.
3. Realizar mediciones experimentales de la concentración de un trazador conservativo, para la estimación de parámetros de dilución.
4. Comparar resultados de las mediciones con los del modelo numérico.

2. Marco Teórico

2.1. Conceptos generales

2.1.1. Flujo de agua subterránea

Es importante entender los procesos físicos que definen el transporte de solutos en medios porosos. Para ello lo primero que se debe tener en cuenta es lograr una buena caracterización del flujo de agua subterránea, la cual dependerá de la escala a la cual se defina el flujo. Si se trabaja a escala de poros, $O(10^{-4} [m])$, se debe resolver la ecuación de Stokes, la cual se obtiene de suponer flujo estacionario e incompresible en la ecuación de Navier-Stokes, sujeta a la geometría definida por la estructura de poros.

Dado que los flujos de agua subterránea se definen en escalas de metros a kilómetros, es necesario alejarse de la escala de poros y definir ecuaciones de flujo en base a propiedades promediadas, a escalas mayores. En 1856, Henry Darcy, a través de experiencias de laboratorio establece una ley empírica que define las características del movimiento de agua a través de un medio poroso. Dicha ley surge de las observaciones del flujo a través de una columna de arena, la cual se esquematiza en la Figura 2.1.

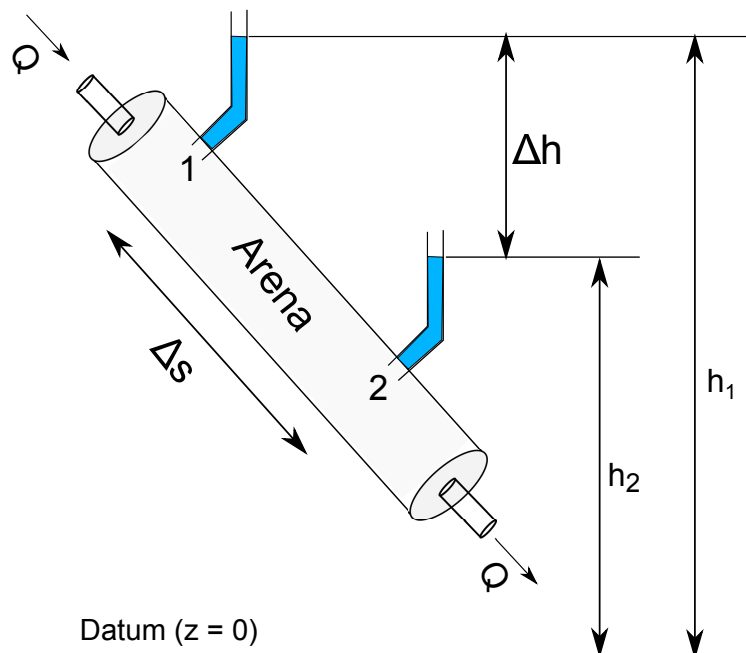


Figura 2.1: Esquema de experimento de Darcy. En los puntos 1 y 2 se tienen medidas de la carga hidráulica h . La coordenada s es paralela a la columna

Darcy encontró, a través de repetidas experiencias, que el caudal Q_s [L^3T^{-1}] que atravesaba la columna, en régimen permanente, era proporcional a la diferencia de carga Δh [L] entre dos piezómetros e inversamente proporcional a la distancia entre ellos Δs [L]. Evidentemente, Q_s es proporcional al área de la columna A [L^2]. Así, la ley de Darcy, en términos diferenciales, para un flujo unidimensional se define como:

$$Q_s = -K_s \frac{dh}{ds} A \quad (2.1)$$

La constante de proporcionalidad K_s [LT^{-1}] es la conductividad hidráulica, propiedad que depende tanto del suelo como del fluido circulante. La conductividad hidráulica se puede entender como una medida de la capacidad del medio para transmitir un flujo. El signo menos en la ecuación 2.1 se debe a que el flujo ocurre desde zonas de mayor a menor carga hidráulica. La expresión $\frac{dh}{ds}$ se conoce como gradiente hidráulico J . En otra forma la ley de Darcy se puede expresar como el caudal por sección transversal al flujo:

$$q_s = -K_s \frac{dh}{ds} = \frac{Q_s}{A} \quad (2.2)$$

donde q_s [LT^{-1}] se define como la descarga específica o velocidad de Darcy. Se tiende a pensar que q_s es la velocidad promedio a la cual circula el flujo de agua subterránea, pero esto no es cierto, dado que el flujo no circula por toda la sección transversal, sino sólo por una fracción de ésta. La velocidad lineal promedio \bar{v}_s [LT^{-1}] es proporcional a la descarga específica e inversamente proporcional a la porosidad η :

$$\bar{v}_s = \frac{q_s}{\eta} \quad (2.3)$$

La generalización de la ley de Darcy a tres dimensiones se escribe como:

$$q = -K \nabla(h(x, y, z)) \quad (2.4)$$

donde K representa el tensor de conductividad hidráulica.

Si bien es cierto que la ley de Darcy nace desde un desarrollo experimental, en el siglo posterior se realizaron trabajos teóricos que a partir de la ecuación de Stokes y la técnica de volúmenes promediados demuestran la validez de la ley de Darcy en escalas mayores a la de poros (Gray & O'Neill, 1976; Whitaker, 1985). En inglés se define REV (*representative elementary volume*) como el volumen mínimo al cual un parámetro dado se vuelve independiente del tamaño de la muestra (Bear & Bachmat, 1990). En general, para suelos granulares se define la escala de Darcy o también llamada escala de laboratorio para un REV de $O(10^{-2} [m])$.

A partir de la ley de Darcy se deriva la ecuación tridimensional de flujo saturado, la cual se obtiene de la conservación de masa de agua en un elemento infinitesimal de suelo saturado y la ley de Darcy:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.5)$$

donde K_x , K_y y K_z representan las conductividades hidráulicas en cada dirección. S_s es el coeficiente de almacenamiento, el cual se define como la cantidad de agua expulsada desde un volumen unitario de material saturado, cuando es sometido a un cambio unitario en la carga hidráulica. La ecuación 2.5 comúnmente se resuelve numéricamente, previo conocimiento de los flujos de agua presentes y la condición inicial de niveles piezométricos.

2.1.2. Procesos de transporte de solutos en agua subterránea

Definido el flujo de agua en medios porosos, se pueden estudiar los procesos que gobiernan el movimiento de sustancias disueltas en el agua subterránea. A continuación se da una breve descripción de los procesos más importantes.

2.1.2.1. Advección y dispersión mecánica

El transporte por advección se define como el movimiento de masa transportada por el flujo de agua subterránea. Las partículas de soluto recorren la dirección definida por las líneas de corriente, independiente de la complejidad de éstas. El flujo de masa por advección de un soluto viene dado por la siguiente expresión:

$$F_{ax} = q_x c \quad (2.6)$$

donde F_{ax} [$MT^{-1}L^{-2}$] es el flujo advectivo de masa de soluto en la dirección x , por unidad de área normal a la dirección x . q_x [LT^{-1}] es la descarga específica en la dirección x , y c [ML^{-3}] es la concentración de soluto. La tasa promedio de movimiento de soluto viene dada por la velocidad promedio lineal \bar{v}_s , definida en (2.3).

La advección no sólo transporta masa desde un lugar a otro, sino que también tiende a esparcir o dispersar soluto en el proceso. Esto es debido a que la distribución de velocidad no es uniforme y se tienen variaciones desde la velocidad promedio lineal \bar{v}_s . Las variaciones de velocidad ocurren espacialmente, desde la escala de poros $O(10^{-4} [m])$ hasta la escala de campo $O(10^2 [m])$, y también ocurren temporalmente.

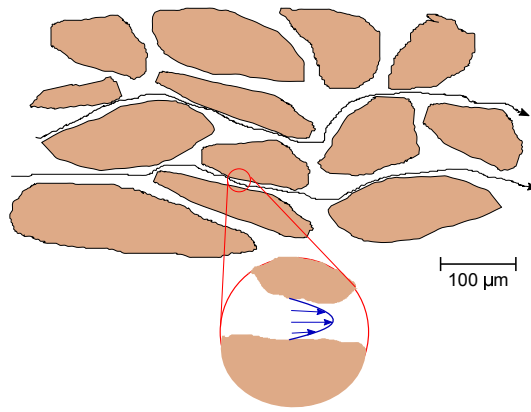


Figura 2.2: Variaciones de velocidad a la escala de poros. La mayor velocidad se alcanza en la lejanía de las paredes del suelo, mientras que la menor velocidad es en la región cercana a la pared, debido a la condición de no deslizamiento.

En la escala de campo, la mayoría de los medios geológicos son heterogéneos, lo que hace que los campos de velocidad sean muy irregulares, debido a los contrastes de permeabilidades, las que pueden variar en órdenes de magnitud. Es importante tener en cuenta que en zonas de menor permeabilidad, los gradientes hidráulicos son mayores debido a la mayor pérdida de carga, por lo que la velocidad promedio es menor. En zonas de mayor permeabilidad los gradientes son menores, pues se tiene menor pérdida de carga, por lo que la velocidad es mayor.

El proceso de dispersión y esparcimiento de masa debido a las variaciones de la velocidad promedio del flujo, recibe el nombre de dispersión mecánica. La dispersión en la dirección del flujo recibe el nombre de dispersión mecánica longitudinal y la que ocurre en la dirección perpendicular al flujo se conoce como dispersión mecánica transversal. La teoría clásica de transporte de solutos en medios permeables cuantifica la dispersión mecánica a través de los coeficientes de dispersión mecánica longitudinal y transversal, los cuales se asume tienen una relación lineal con la velocidad promedio \bar{v} . La constante de proporcionalidad se denomina dispersividad y es considerada una propiedad del medio. Los coeficientes de dispersión mecánica, para el caso de un campo de velocidad unidireccional vienen dados por:

$$D_{ML} = \alpha_L \bar{v} \quad (2.7)$$

$$D_{MT} = \alpha_T \bar{v} \quad (2.8)$$

donde:

D_{ML} : Coeficiente de dispersión mecánica longitudinal [L^2T^{-1}].

D_{MT} : Coeficiente de dispersión mecánica transversal [L^2T^{-1}].

α_L : Dispersividad longitudinal [L].

α_T : Dispersividad transversal [L].

2.1.2.2. Difusión molecular

La difusión molecular es la mezcla que ocurre debido al movimiento aleatorio de moléculas en un fluido (movimiento browniano). Los choques e interacciones de dichas moléculas tienden a dispersar el soluto, haciendo que las concentraciones de éste sean más distribuidas en el espacio. Este proceso, en la escala continua, ocurre incluso en fluidos sin movimiento.

El flujo de masa difusivo en un medio poroso es gobernado por la ley de Fick (1855), la cual establece que el flujo difusivo es proporcional al gradiente de concentraciones en una dirección:

$$F_{dx} = -D_p \frac{\partial c}{\partial x} \quad (2.9)$$

donde:

F_{dx} : Flujo de masa difusivo en la dirección x [$ML^{-2}T^{-1}$].

D_p : Coeficiente de difusión efectivo en un medio poroso [L^2T^{-1}].

$\frac{\partial c}{\partial x}$: Gradiente de concentraciones en la dirección x [ML^{-4}].

El signo negativo en (2.9) indica que el flujo va desde zonas de mayor a menor concentración. La tasa de difusión en un medio poroso es menor que la tasa de difusión en agua, debido a la colisión de partículas de solutos con los sólidos del medio. Así el coeficiente D_p es menor que el coeficiente de difusión en el agua. En la literatura se propone modelar D_p como $D_p = \eta D_{aq}$ (Grathwohl, 2001), donde η es la porosidad y D_{aq} [L^2T^{-1}] es el coeficiente de difusión del soluto en el agua.

2.1.2.3. Dispersión hidrodinámica y ecuación de advección - dispersión

La suma de los procesos de difusión molecular y de dispersión mecánica recibe el nombre de dispersión hidrodinámica o simplemente dispersión. La representación de transporte dispersivo en términos de movimiento aleatorio es análoga a la forma en la cual el transporte difusivo es modelado. Lo anterior significa que el flujo de masa asociado al proceso de dispersión hidrodinámica es proporcional al gradiente de concentraciones. Así el flujo de masa dispersivo viene dado por:

$$F_{x_i} = -\eta D_i \frac{\partial c}{\partial x_i} \quad (2.10)$$

donde:

F_{x_i} : Flujo dispersivo de masa de soluto en la dirección x_i [$ML^{-2}T^{-1}$].

η : Porosidad.

D_i : Coeficiente de dispersión hidrodinámica [L^2T^{-1}].

$\frac{\partial c}{\partial x_i}$: Gradiente de concentraciones en la dirección x_i [ML^{-4}].

Los coeficientes de dispersión hidrodinámica vienen dados por la suma de coeficientes de dispersión mecánica y de difusión molecular. Se define el tensor de coeficientes de dispersión hidrodinámica como:

$$D_{ij} = \frac{v_i v_j}{\bar{v}} (\alpha_l - \alpha_t) + \delta_{ij} (\alpha_t \bar{v} + D_p) \quad (2.11)$$

donde:

D_p : Coeficiente de difusión molecular en medio poroso [L^2T^{-1}].

D_{ij} : Tensor de coeficientes de dispersión hidrodinámica [L^2T^{-1}].

α_l, α_t : Dispersividad longitudinal y transversal, respectivamente [L].

\bar{v} : Velocidad de poros o velocidad promedio lineal [LT^{-1}].

δ_{ij} : Delta de Kronecker (igual a uno para $i = j$, cero en otro caso).

A partir de la definición del tensor de coeficientes de dispersión y el flujo dispersivo de masa, se define la ecuación de advección dispersión, la cual determina la evolución temporal de la concentración de soluto en un medio permeable. Considerando que los procesos de interés son el transporte advectivo y el transporte dispersivo, aplicando conservación de masa, se tiene:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) \quad (2.12)$$

donde se utiliza la notación de Einstein, que indica suma en cualquier índice que aparezca dos veces en un término. En la ecuación anterior $c(x, t)$ es la concentración (masa por volumen de solución [ML^{-3}]), $[u_i]$ es la velocidad (vectorial) y $[D_{ij}]$ es el tensor de coeficientes de dispersión hidrodinámica. La ecuación 2.12 se presenta en su forma más general, donde la velocidad y los coeficientes de dispersión pueden variar en el espacio. Existen soluciones analíticas para casos muy simplificados de transporte. Comúnmente la ecuación de advección dispersión se resuelve con métodos numéricos usando programas computacionales.

La ecuación de advección dispersión es válida a la escala de Darcy, pues se define en base a propiedades promediadas en un REV. Para resolver el problema de transporte a escala de poros se debe resolver la ecuación de advección difusión.

Existen otros procesos físicos y/o químicos que intervienen en el transporte de solutos,

tales como la adsorción (adhesión a la matriz sólida de suelo), reacciones químicas, transporte de sustancias disueltas en múltiples fases (NAPLs), entre otros, los cuales no son relevantes para los propósitos de este trabajo.

2.2. Estado del arte y revisión bibliográfica

La modelación de los procesos de transporte en medios permeables a escala de laboratorio comúnmente se lleva a cabo en tanques de arena, técnica conocida como Experimentos a Escala Intermedia o ISE (Intermediate Scale Experiments, en inglés). Las características más generales de estos tipos de experimentos se enuncian a continuación (Sánchez *et al.*, 2008):

- Comúnmente se usan materiales como el vidrio o acrílico para la construcción de los tanques. Por la facilidad para trabajarlo, se prefiere usar acrílico la mayoría de las veces, sobre todo para tanques más grandes.
- En su mayoría los experimentos realizados con tanques de arena han sido bidimensionales (2D), debido a que se necesitan tanques muy grandes para poder emular flujos de tres dimensiones en medios porosos heterogéneos.
- Dentro de los materiales usados para llenar los tanques se cuentan en la mayoría de los experimentos esferas de vidrio y criolita, debido a que sus índices de refracción son similares al del acrílico, lo que los hace materiales prácticamente transparentes, permitiendo la iluminación del tanque por la parte trasera.
- Para poder medir tanto el avance del flujo como las concentraciones de los solutos conservativos y/o reactivos es necesario el uso de trazadores, los cuales son compuestos no reactivos insertados en concentraciones controladas dentro del tanque. Por ejemplo como trazadores se ha usado sal, rodamina, FD& C Blue (blue brilliant), fluoresceína, oxígeno, entre otros.
- Otra dificultad de los montajes experimentales de los ISE es como se rellena el tanque, sobre todo en los casos que se buscan medios porosos heterogéneos y/o saturados, llegándose incluso a utilizar técnicas de congelamiento para una buena construcción del medio. Comúnmente el llenado se realiza en pequeñas capas de suelo (0,5 [cm] de espesor), teniendo cuidado en mantener un nivel de agua siempre superior, para así lograr la saturación del suelo.
- Para emular flujos de agua subterránea comúnmente se usan bombas peristálticas, las cuales son capaces de entregar caudales muy pequeños (del orden de litros por día). También hay experimentos donde se hace circular flujo mediante el uso de vertederos de carga constante, generando gradientes de carga hidráulica.

Un objetivo importante de la experimentación en laboratorio de flujos de agua en medios porosos es lograr la caracterización de campos de concentraciones, para estudiar los procesos de transporte. Para ello se han usado variadas técnicas.

- Técnicas de visualización: Son técnicas no invasivas, las cuales tratan de no alterar el medio poroso. Entre las más utilizadas está el análisis de imágenes, el cual trata de relacionar la concentración de un trazador a cambios de intensidad de luz en una serie de fotografías. El uso de esta técnica tiene problemas asociados a fluctuaciones de la fuente de luz, refracción por parte de las partículas de suelo y no uniformidad en el brillo del experimento (Castro Alcalá *et al.*, 2012; Zinn *et al.*, 2004). Técnicas más sofisticadas de visualización implican el uso de Rayos X, Radiación Gamma e Imágenes por resonancia magnética (Werth *et al.*, 2010).
- Recolección de micro muestras: Se retiran muestras del fluido de volumen muy pequeño para analizar *ex situ*. Esta técnica comúnmente termina alterando el campo de flujo, debido a que los volúmenes de agua en los experimentos son pequeños. Cuantificar dichas alteraciones no siempre es posible (Silliman *et al.*, 1998).
- Medidas *in situ*: Se refiere al uso de sensores dentro del medio. Se tratan de usar cables lo más pequeño posible (por ejemplo 0,1 [mm]). Debido al pequeño tamaño de las celdas y cables se pueden tener un gran número de mediciones de concentración de soluto. La desventaja de este método es su alto costo económico.

En la sección anterior se presentó la teoría clásica del estudio de procesos de transporte de masa en medios permeables, los que quedan caracterizados por la ecuación de advección dispersión (2.12) y por los coeficientes de dispersión hidrodinámica (2.11). Diversos son los estudios que han analizado los rangos de validez de dicho modelo para la escala de Darcy. Los datos de experimentos de dispersión comúnmente son presentados en función del número de Péclet, el cual es un número adimensional que relaciona la escala de tiempo advectiva con la difusiva. El número de Péclet (Pe) se define según la siguiente relación:

$$Pe = \frac{\bar{v}d}{D_{aq}} \quad (2.13)$$

donde:

\bar{v} : Velocidad promedio de poros [LT^{-1}].

d: Tamaño promedio de los granos de suelo [L].

D_{aq} : Coeficiente de difusión en el agua [L^2T^{-1}].

Delgado (2007) resume en su trabajo un gran número de experimentos de dispersión, mostrando como varían los coeficientes de dispersión longitudinal D_L y de dispersión transversal D_T en función del número de Péclet de cada experimento (Figura 2.3). Se presentan para diferentes coeficientes de difusión molecular, es decir para diferentes números de Schmidt (Sc). Se entiende que para velocidades bajas, es decir Pe bajos, la dispersión de solutos es controlada por la difusión molecular, mientras que para velocidades altas, es decir Pe altos, la dispersión es controlada por la dispersión mecánica (Han *et al.*, 1985; Delgado, 2007; Olsson & Grathwohl, 2007).

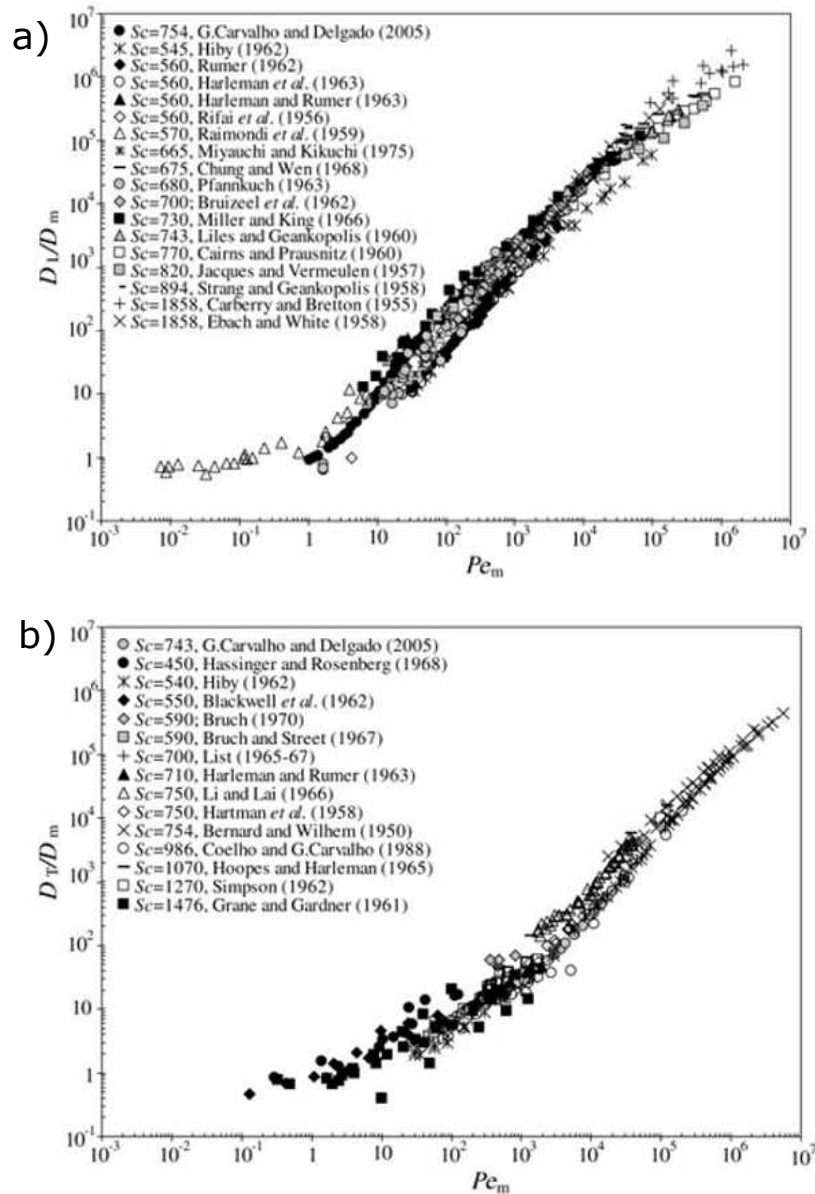


Figura 2.3: Coeficientes de dispersión longitudinal (a) y de dispersión transversal (b) versus el número de Péclet para diferentes experimentos reportados en la literatura. Fuente: Delgado, 2007.

La Figura 2.3 también muestra que los coeficientes de dispersión transversal son un orden de magnitud menor que los coeficientes de dispersión longitudinal, para un mismo número de Péclet. Para números de Péclet bajos ($Pe < 1$) los coeficientes de dispersión son cercanos al coeficiente de difusión molecular. A medida que los números de Péclet aumentan, los coeficientes de dispersión empiezan a ser mayores que la difusión molecular. Si bien es cierto que esos resultados son para experimentos en la escala de Darcy, también se obtienen resultados similares en experimentos y/o simulaciones numéricas a la escala de poros (Acharya *et al.*, 2007; van Milligen & Bons, 2012).

La validez del modelo de advección dispersión ha sido comprobada para números de Péclet bajos. En el caso de Pe altos, diversos estudios cuestionan la validez del modelo de dispersión advección, pues éste sobreestima la mezcla de solutos (Kitanidis, 1994; Tartakovsky *et al.*, 2009; Olsson & Grathwohl, 2007; Ye *et al.*, 2015). Este hecho se traduce en una dependencia no lineal del coeficiente de dispersión transversal con la velocidad. Diversas relaciones han sido propuestas para calcular el coeficiente de dispersión transversal, basadas en experiencias de laboratorio (Olsson & Grathwohl, 2007; Chiogna *et al.*, 2010; Delgado, 2007; van Milligen & Bons, 2012; Klenk & Grathwohl, 2002), dejando en claro que la caracterización del coeficiente de dispersión transversal es un hecho sujeto a discusión hasta hoy en día.

Kitanidis (1994) hace la distinción entre dispersión (*spreading*, en inglés) y dilución. Mientras la dispersión da cuenta del cambio de forma de la pluma de soluto, la dilución da cuenta del cambio de volumen ocupado por el soluto. Kitanidis demuestra mediante ejemplos que la dilución no es lo mismo que la dispersión, pudiendo tenerse plumas con igual dispersión, pero con distinto grado de dilución. Es importante entender que la dilución controla los procesos de mezcla (Cirpka & Kitanidis, 2000), pues es el aumento del volumen ocupado por un soluto el que hace posible la superposición de éste con otras especies. Si se tienen dos plumas de solutos y sólo se considera el spreading, estos compuestos pudiesen no superponerse y no reaccionar entre sí. El proceso que permite que dos o más compuestos ocupen el mismo volumen, es conocido como mezcla.

Ante la importancia de poder cuantificar el grado de dilución de un soluto y la imposibilidad de hacerlo mediante los coeficientes de dispersión, Kitanidis (1994) propone el índice de dilución como una medida del desorden en la distribución espacial de la concentración de un soluto, en forma análoga a la definición de entropía. El índice de dilución (E), se define como:

$$E(t) = \exp \left[- \int_V p(\mathbf{x}, t) \ln(p(\mathbf{x}, t)) dV \right] \quad (2.14)$$

donde:

$E(t)$: Índice de dilución [L^3].

$p(\mathbf{x}, t)$: Concentración normalizada por la masa total de soluto, en la posición \mathbf{x} [L^{-3}].

V : Volumen total del dominio [L^3].

Se define la concentración normalizada, $p(\mathbf{x}, t)$, como

$$p(\mathbf{x}, t) = \frac{c(\mathbf{x}, t)}{\int_V c(\mathbf{x}, t) dV} \quad (2.15)$$

donde:

$c(\mathbf{x}, t)$: Concentración de soluto en \mathbf{x} [ML^{-3}].

$\int_V c(\mathbf{x}, t) dV$: Masa total de soluto, dividida por la porosidad [M].

Notar que el índice de dilución tiene unidades de volumen. Según Kitanidis, el índice de dilución significa el volumen del medio ocupado por el soluto, cuando el soluto es introducido en forma de pulso o cuando existe una pluma inicial.

Rolle *et al.* (2009) dan cuenta de que el índice de dilución definido por Kitanidis cuantifica la dilución en el caso de un pulso, pero no de una inyección continua. Así ellos en su trabajo definen una variación del índice de dilución, el índice de dilución relacionado al flujo (E_Q [L^3T^{-1}]). Mientras que el índice de dilución E da cuenta de cómo un volumen de masa es diluido en un volumen de agua, el índice de dilución relacionado al flujo cuantifica como un flujo de masa de soluto es distribuido en un mayor flujo de agua. Se define el índice de dilución relacionado al flujo como,

$$E_Q(x) = \exp \left[- \int_{\Omega} p_Q(x, y, z) \ln(p_Q(x, y, z)) q_x(x, y, z) dA \right] \quad (2.16)$$

donde:

Ω : Sección perpendicular al flujo [L^2].

$q_x(x, y, z)$: Componente longitudinal de la descarga específica [LT^{-1}].

$p_Q(x, y, z)$: Proporción entre la concentración y el flujo de masa [$L^{-3}T$].

$p_Q(x, y, z)$ también es conocida como la función de densidad de probabilidad relacionada al flujo de la masa de soluto. Se define como,

$$p_Q(x, y, z) = \frac{c(x, y, z)}{\int_{\Omega} c(x, y, z) q_x(x, y, z) dA} \quad (2.17)$$

Otro hecho que ha recibido especial atención en los últimos diez años, es el rol que cumple la heterogeneidad en la mezcla transversal de solutos (Werth *et al.*, 2006; Rolle *et al.*, 2009; Willingham *et al.*, 2010; Ballarini *et al.*, 2012; Ballarini *et al.*, 2014; Ye *et al.*, 2015), dado que a menudo el transporte de contaminantes en el agua subterránea es controlado por la dispersión transversal. El hecho que el flujo de agua subterránea se enfoque en zonas de mayor conductividad hidráulica puede aumentar la mezcla transversal, pues la distancia entre líneas de corriente disminuye y un soluto puede cruzar más líneas de corriente a la vez. Un ejemplo de esto se puede apreciar en la Figura 2.4 que muestra los resultados de un experimento donde se tiene flujo de izquierda a derecha y dos zonas de mayor permeabilidad (Rolle *et al.*, 2009). Las líneas de corriente (color negro) convergen en las zonas de mayor conductividad hidráulica y el trazador, en este caso fluoresceína, sufre mayor dilución.

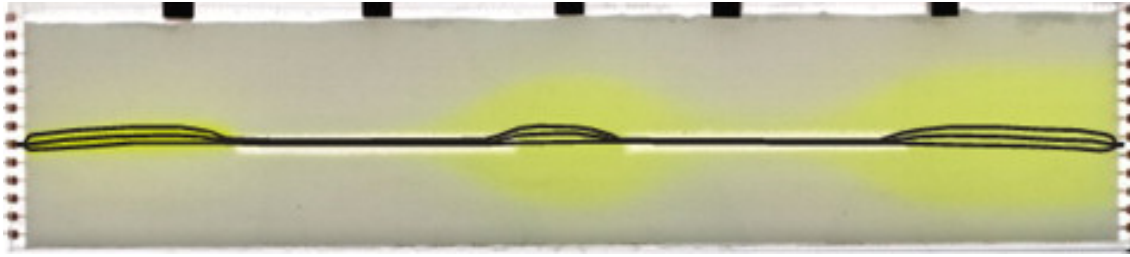


Figura 2.4: Efecto de la heterogeneidad en el transporte de un trazador conservativo.
Fuente: Rolle *et al.* (2009)

2.3. Problema en estudio y modelo conceptual

A lo largo de este informe se estudiará el problema de la inyección continua de un trazador a través de una fuente lineal, en dos medios permeables bidimensionales, homogéneo y heterogéneo. Para el caso homogéneo existen soluciones analíticas para un problema simplificado, las cuales se presentan a continuación.

Considérese un acuífero bidimensional, que se extiende infinitamente en la dirección perpendicular al flujo (eje y , Figura 2.5). La velocidad del flujo es uniforme en la dirección $+x$. Existe una fuente continua de contaminante, de extensión finita, centrada en el origen desde $-\frac{Y}{2}$ a $+\frac{Y}{2}$ en la dirección y . La concentración de la fuente es constante e igual a C_0 . El soluto es conservativo, es decir no presenta adsorción ni reacciones químicas.

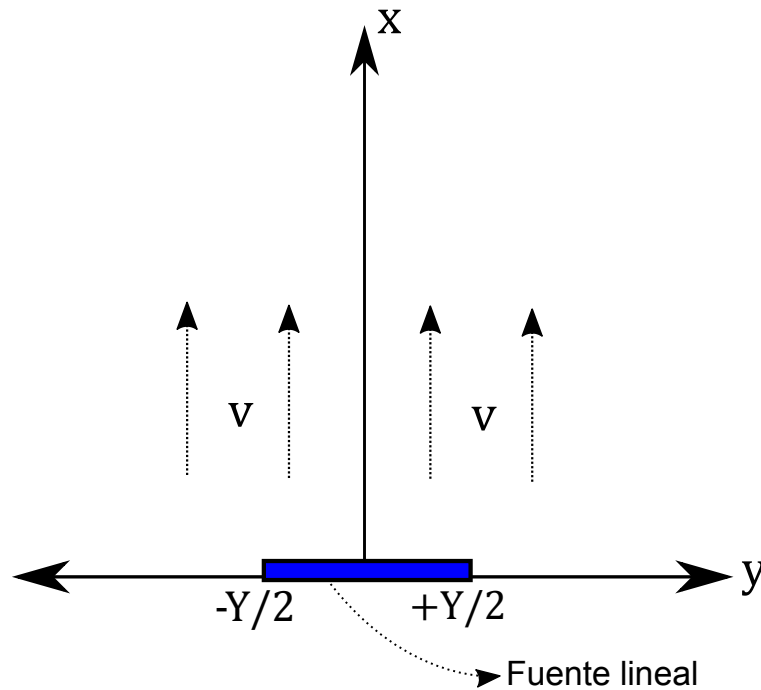


Figura 2.5: Esquema problema teórico de un acuífero semi infinito, con campo de velocidad unidireccional

La ecuación que gobierna el problema es la siguiente:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (2.18)$$

donde:

v : Velocidad de poros [LT^{-1}].

D_x : Coeficiente de dispersión hidrodinámica en la dirección x [L^2T^{-1}].

D_y : Coeficiente de dispersión hidrodinámica en la dirección y [L^2T^{-1}].

Como condición inicial se asume que no hay soluto presente en el acuífero. Las condiciones de borde son:

$$\begin{cases} c = C_0 & x = 0 \wedge -\frac{Y}{2} < y < \frac{Y}{2} \\ c = 0 & x = 0; y < -\frac{Y}{2} \vee y > \frac{Y}{2} \\ c, \frac{\partial c}{\partial x} = 0 & x \rightarrow \infty; y \rightarrow \pm\infty \end{cases} \quad (2.19)$$

Si se considera régimen permanente en el problema de (2.18) y (2.19), la solución es (Domenico & Palciauskas, 1982):

$$C(x, y) = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\frac{D_y x}{v}}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\frac{D_y x}{v}}} \right] \right\} \quad (2.20)$$

La solución presentada en (2.20) es para el caso de un dominio infinito. En la sección Anexos de este informe se realiza el análisis para un dominio acotado. Es importante mencionar que la solución de (2.20) ha sido anteriormente utilizada para montajes experimentales similares al de este trabajo (Chiogna *et al.*, 2009; Ballarini *et al.*, 2012; Olsson & Grathwohl, 2007; Rolle *et al.*, 2009).

3. Metodología

Para el estudio experimental se construyeron e instalaron todos los equipos necesarios para poder emular y medir un problema de inyección de un trazador conservativo mediante una fuente lineal, en medios permeables de dos dimensiones (un medio homogéneo y otro heterogéneo), en la presencia de un campo de velocidades unidireccional. En esta sección se describe el montaje experimental; se dan a conocer las propiedades del medio permeable y del trazador escogido; además de describir la puesta en marcha del experimento, la metodología experimental y el sistema de adquisición de datos.

3.1. Descripción del montaje experimental

Se diseñó un tanque de acrílico de dimensiones 85 [cm] x 16 [cm] x 1 [cm] (largo x ancho x espesor). Se eligió el acrílico por su facilidad de trabajar en laboratorio, además de sus propiedades ópticas. El tanque es desarmable, siendo sus partes unidas mediante el uso de pernos. El hecho de que el espesor sea muy pequeño en comparación a las otras dimensiones, permite que el tanque, relleno con microesferas de vidrio que forman un medio permeable, emule una geometría bidimensional (2D). El acrílico utilizado tiene un espesor de 1,5 [cm], el cual fue seleccionado de tal forma de asegurar suficiente resistencia y evitar deformaciones.

El tanque cuenta con ocho puertos de entrada y ocho puertos de salida para el flujo, distanciados 2 [cm] entre sí. Dichos puertos son montados con coplas para microtubos de riego de 4 [mm] de diámetro. El flujo a través del medio permeable es regulado gracias al uso de dos bombas peristálticas Masterflex Standard a la entrada del tanque, cada una conectada a 4 puertos. Las bombas están sincronizadas entre sí para entregar el mismo caudal en cada puerto. Cada bomba peristáltica usa mangueras Masterflex en Tygon E-Lab L/S 14 de 1,6 [mm] de diámetro.

A la salida del tanque se cuenta con un vertedero de carga constante, el cual permite la toma de muestras promediadas de concentración. En el experimento, ya sea el caso homogéneo o el heterogéneo, se hace pasar un trazador por los dos puertos centrales y agua por los demás, aunque es posible trabajar con otras configuraciones de inyección, esto debido a que cada manguera a la entrada del tanque va conectada a un estanque con agua y a otro con trazador, mediante el uso de conectores para microtubo y válvulas que regulen que estanque alimenta cada puerto. La Figura 3.1 muestra un esquema de la configuración experimental.

El tanque se encuentra montado sobre una estructura de acero, la cual está empotrada al suelo del laboratorio. Dicha estructura entrega verticalidad, dado que es nivelable en sus tres planos, además de firmeza a la instalación experimental.

El fin del experimento es poder caracterizar el campo de concentraciones del trazador mediante imágenes, por ende se deben capturar fotografías del experimento. Para ello se ilumina el tanque por la parte delantera, mediante el uso de dos focos LED, los cuales van sobre una estructura unida al marco del tanque. Se usa luz LED debido a que la intensidad de luz entregada prácticamente no fluctúa en el tiempo. La cámara que permite la toma de fotografías se encuentra a 1 [m] de la cara frontal del experimento. Para asegurar que se encuentre frente a frente y no oblicua al experimento, la estructura de soporte de la cámara se encuentra soldada a la estructura de soporte del tanque (Figura 3.2). Cabe mencionar que para aislar el experimento de variaciones externas de luz, todo el montaje experimental se encuentra dentro de una cámara oscura.

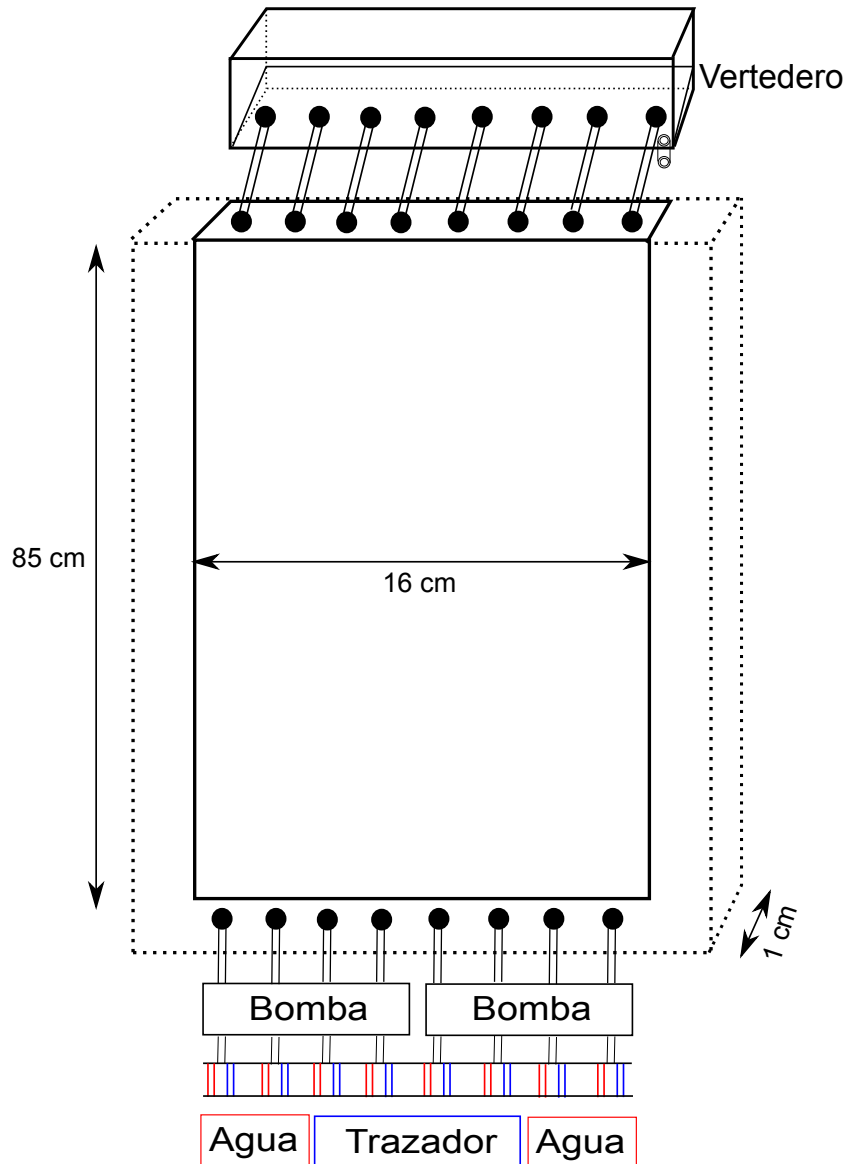


Figura 3.1: Esquema vista frontal montaje experimental.

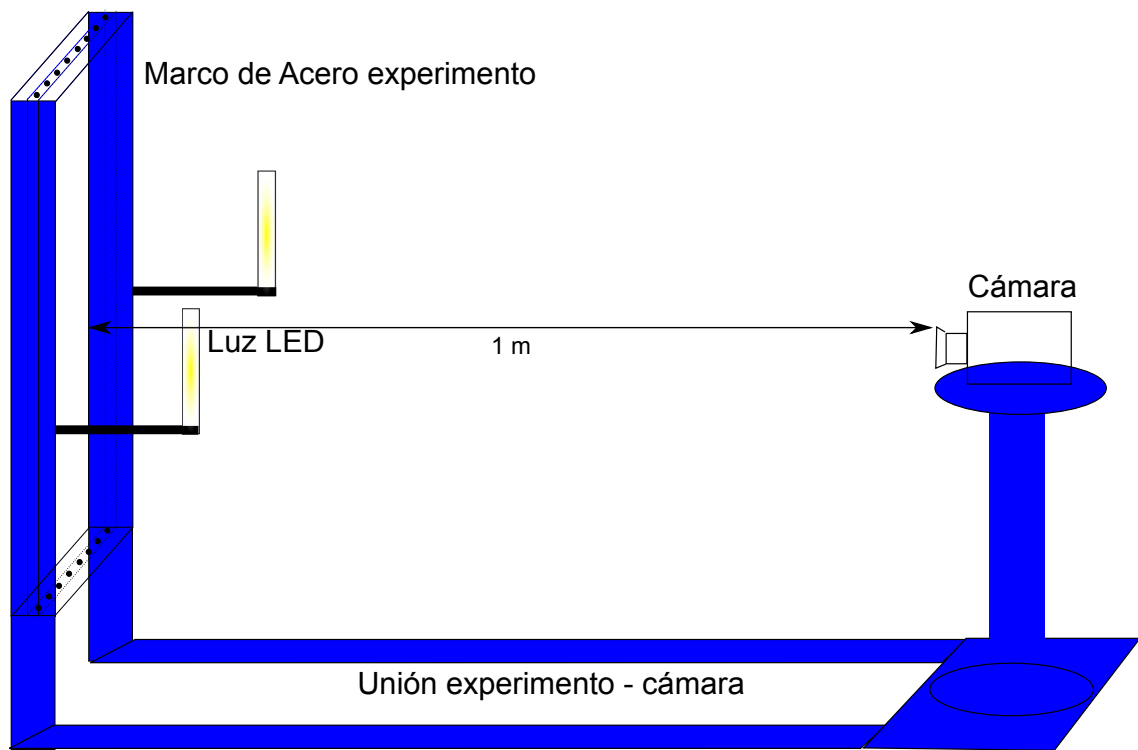


Figura 3.2: Esquema vista lateral del montaje experimental.

En los Anexos de este informe se pueden encontrar fotografías de cada uno de los componentes del montaje experimental.

3.2. Elección medio permeable y determinación de sus propiedades

Como medio permeable se escogió trabajar con microesferas de vidrio, debido a que en el mercado se pueden encontrar diversas granulometrías y así, previo estudio de sus propiedades físicas, se podía discriminar cuales serían más pertinentes para el desarrollo de esta tesis. Las microesferas de vidrio poseen la característica de ser transparentes a una fuente de luz, lo que sumado al hecho de que el acrílico también tiene esa propiedad, permitiría iluminar el tanque tanto por la parte trasera como por la parte delantera del mismo.

A continuación se presenta el resumen de las granulometrías, conductividades hidráulicas y dispersividades de las microesferas de vidrio utilizadas. En los Anexos de este informe se puede encontrar el detalle de los ensayos realizados para la determinación de dichas propiedades.

3.2.1. Granulometría

Los tres tipos de microesferas de vidrio utilizadas fueron las siguientes:

- Microesferas de diámetro medio de 0,52 [mm], con granulometría extendida.
- Microesferas de diámetro uniforme de 1 [mm].
- Microesferas de diámetro uniforme de 2 [mm].

3.2.2. Conductividad hidráulica

A continuación se presenta el resumen de las conductividades hidráulicas (K) obtenidas para cada granulometría de microesferas:

Tabla 3.1: Valores de conductividad hidráulica obtenidos.

d_{50} [mm]	K [cm/s]
0,5	0,1
1,0	1,2
2,0	4,8

Los valores de conductividad hidráulica obtenidos corresponden a una arena fina en el caso de $d_{50} = 0,5$ [mm] y a una arena gruesa para los otros diámetros (Bear, 1972).

3.2.3. Dispersividad longitudinal

Para determinar la dispersividad longitudinal se realizaron ensayos de columna (flujo unidimensional), para los cuales se ajustó el valor de α_L a partir de soluciones teóricas. En el caso de la dispersividad transversal α_T , actualmente no existe consenso en la comunidad científica para su determinación. En el caso de este trabajo α_T se calibra en base a los resultados obtenidos del análisis de imágenes de las concentraciones en el montaje experimental. En la Tabla 3.2 se presenta el resumen de las dispersividades longitudinales (α_L) obtenidas para cada granulometría de microesferas.

Tabla 3.2: Valores de dispersividad longitudinal obtenidos.

d_{50} [mm]	α_L [cm]
0,5	0,12
1,0	0,05
2,0	0,08

3.3. Propiedades del trazador Blue Brilliant

Como trazador en los experimentos se utilizó Blue Brilliant (BB), el cual no presenta adsorción en microesferas de vidrio (Zinn *et al.*, 2004). Se utilizó un espectrofotómetro (HACH DR 5000) para calibrar una curva de absorbancia de luz versus concentración de BB. Dicha curva se logra insertando tubos de ensayo con concentraciones conocidas en el espectrofotómetro, midiéndose la absorbancia de cada una de las muestras.

Un aspecto importante a definir fue a qué longitud de onda incidente se tiene la mayor absorbancia para el BB, pues eso se utilizó para definir a qué longitud de onda se emitiría la luz para calibrar la relación entre absorbancia y concentración. Para ello el espectrofotómetro tiene la opción de pasar un haz de luz en un rango de longitudes de onda y medir la absorbancia para una concentración dada. En el rango de concentraciones de 0 a 30 [mg/L], el peak de absorbancia se presenta en una longitud de onda de 629 [nm] (Figura 3.3), por lo que la relación absorbancia versus concentración se calibró usando un haz de luz definido por esa longitud de onda. También se tiene un peak de absorción a 420 [nm], pero es menos claro que el de 629 [nm].

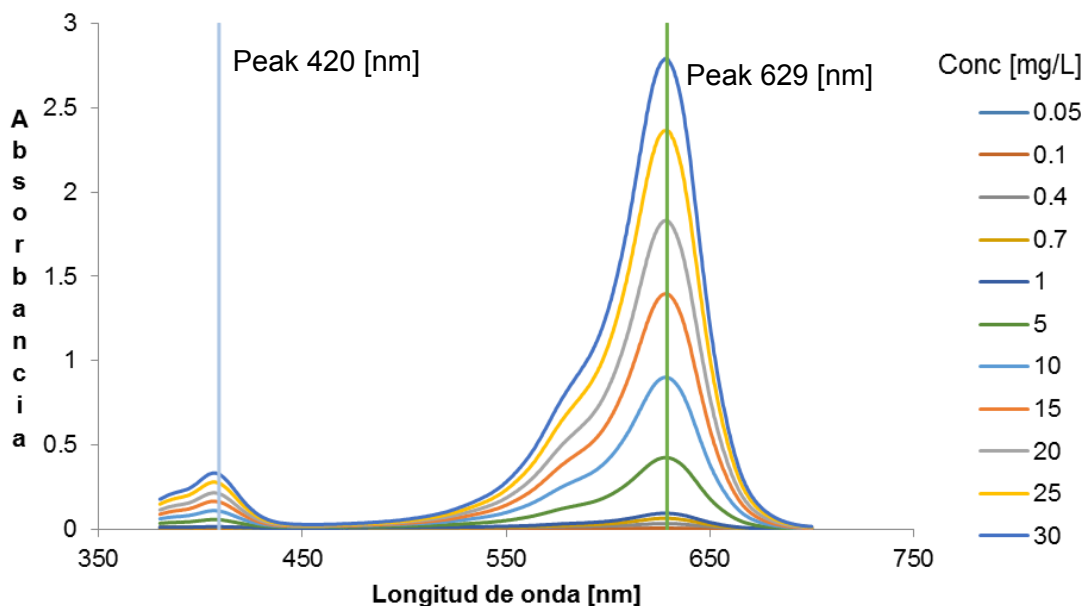


Figura 3.3: Absorbancia v/s longitud de onda, para diversas concentraciones.

La ley de Beer Lambert (1856) plantea que la absorbancia de luz es proporcional a la concentración de trazador presente en una muestra de agua y a la longitud de la misma. La absorbancia (A) se define como:

$$A = -\ln\left(\frac{I}{I_0}\right) \quad (3.1)$$

donde:

I_0 : Intensidad de luz incidente a la muestra.

I : Intensidad de luz a la salida de la muestra.

Así la ley de Beer Lambert se expresa como:

$$A = \alpha l C \tag{3.2}$$

donde:

A : Absorbancia de luz de la muestra.

l : Longitud atravesada por la luz en el medio [L].

α : Constante de proporcionalidad conocida como coeficiente de absorción [$M^{-1}L^2$].

C : Concentración de trazador [ML^{-3}].

La curva de calibración mostró una relación fuertemente lineal entre la absorbancia de luz y la concentración de BB, tal como lo enuncia la ley de Beer Lambert. La Tabla 3.3 muestra los valores de concentración de BB utilizados en la calibración y la absorbancia medida por el espectrofotómetro, para cada muestra.

Tabla 3.3: Valores de absorbancia obtenidos para cada muestra de BB.

C [mg/L]	A
0	0
0,05	0,002
0,1	0,005
0,4	0,031
0,7	0,065
1	0,094
5	0,424
10	0,896
15	1,394
20	1,829
25	2,353
30	2,776

La Figura 3.4 muestra un ajuste lineal de los valores de la Tabla 3.3. Se obtiene un coeficiente de determinación $R^2 = 0,99$. De este modo se tiene una curva de calibración que permite tomar mediciones controladas de BB a inyectar en el experimento, la cual queda guardada en la memoria del espectrofotómetro.

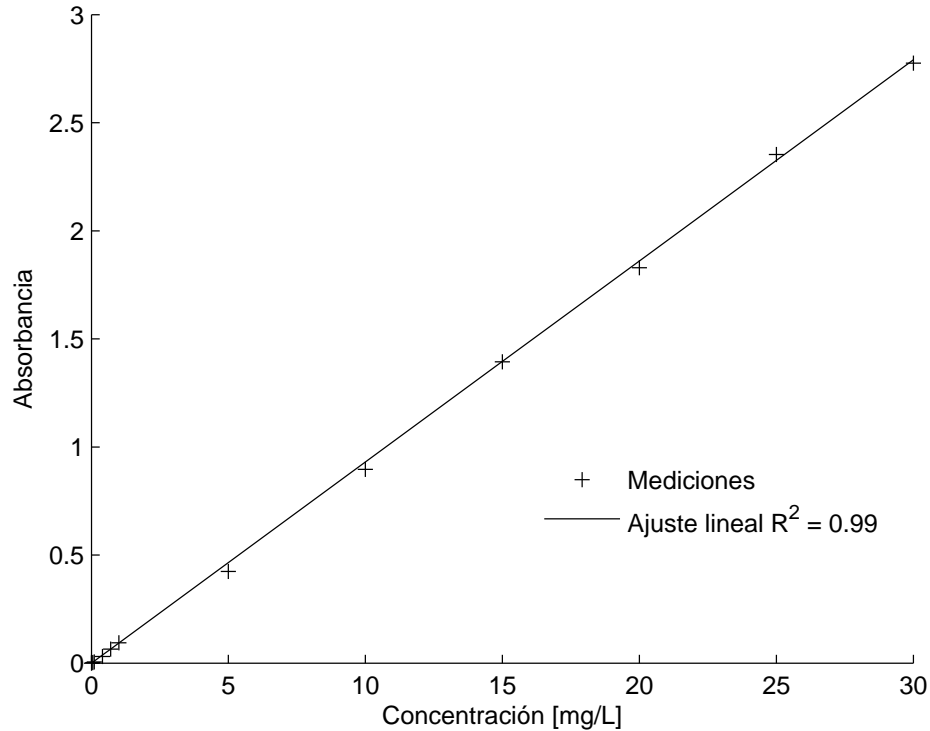


Figura 3.4: Relación absorbancia v/s concentración de BB.

3.4. Toma y procesamiento de imágenes

La toma de fotografías se realizó con una cámara Canon, modelo EOS Rebel T3i, sensor CMOS, con una resolución de 18 megapíxeles. Las primeras pruebas consistieron en hacer pasar un frente continuo de BB por todo el tanque relleno con microesferas de vidrio saturadas con agua clara (se utilizan microesferas de $d_{50} = 0,52 [mm]$ debido a su menor valor comercial), y tomar una serie de fotografías de ese proceso para poder ver como variaba la intensidad de los tres componentes del modelo de color RGB (Red Green Blue) en el tanque, hasta que éste se encontrara saturado con BB (Figura 3.5). La toma de fotografías se realiza cada 5 segundos, mediante el software de control de la cámara EOS Utility, elaborado por Canon. Dichas fotografías se tomaron iluminando el tanque por la parte trasera. Posteriormente se descartó ese tipo de iluminación debido a que tiene mayor refracción de luz que la iluminación por la parte delantera, hecho que será discutido más adelante en este informe.

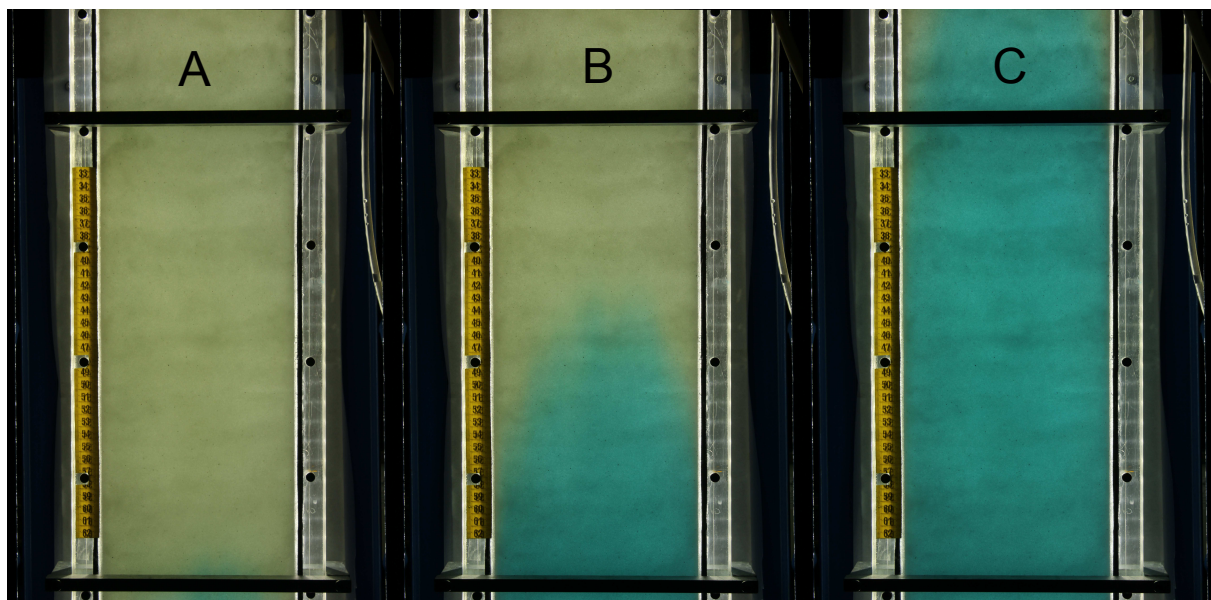


Figura 3.5: Experimento preliminar. La Figura A muestra una fotografía del estado inicial, es decir del tanque relleno con microesferas de vidrio saturadas con agua clara. La Figura B muestra un estado intermedio y la Figura C es una fotografía del estado final, es decir de las microesferas saturadas con BB.

Un hecho importante que se puede apreciar en la Figura 3.5 B es el avance preferencial del flujo por la zona intermedia del tanque, lo que se debe al contacto del medio permeable con las paredes de acrílico. Este es un hecho que la solución de Domenico no considera, pues ésta asume campo de velocidad uniforme, pero entendiendo que en el régimen permanente el resultado del transporte no depende de la velocidad, se usa como una aproximación al problema experimental.

En la Figura 3.6 se muestra como varían los tres componentes del modelo RGB para un pixel (menor unidad en color que forma parte de una imagen digital) en el experimento. De la Figura 3.6 se desprende que la mayor variación de intensidades se da para el canal rojo, lo que sugiere que los canales azul y verde no son relevantes para el análisis. Esto se explica en el hecho que la mayor absorción de luz por parte del BB se da a los 629 [nm] (Figura 3.3), longitud de onda que corresponde al canal rojo, dado que el color azul comprende longitudes de onda de 460 a 480 [nm], el verde de 490 a 530 [nm] y el rojo de 620 a 750 [nm]. En base a esto se decidió la utilización de un filtro pasa banda de color rojo (58mm RED 25 Filter, TIFFEN) en el lente de la cámara, para así filtrar los canales verde y azul de las fotografías. La Figura 3.7 muestra como varían las señales de los canales RGB para un experimento igual al de la Figura 3.5, pero con el uso del filtro en el lente de la cámara.

La Figura 3.7 demuestra que el uso del filtro hace que los canales Green y Blue pierdan intensidad. Esto es importante para el análisis de imágenes de los experimentos que dan origen a esta tesis, pues para poder caracterizar el campo de concentraciones de BB sólo se utilizará la información del canal rojo de las fotografías.

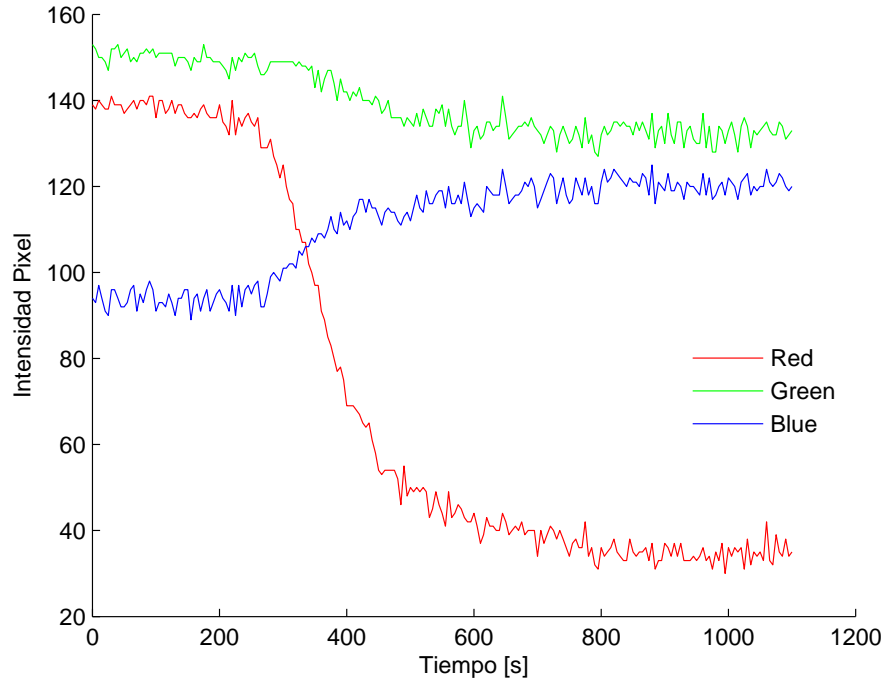


Figura 3.6: Variación de intensidades del modelo de color RGB en un pixel representativo del experimento, sin uso de filtro en el lente de la cámara.

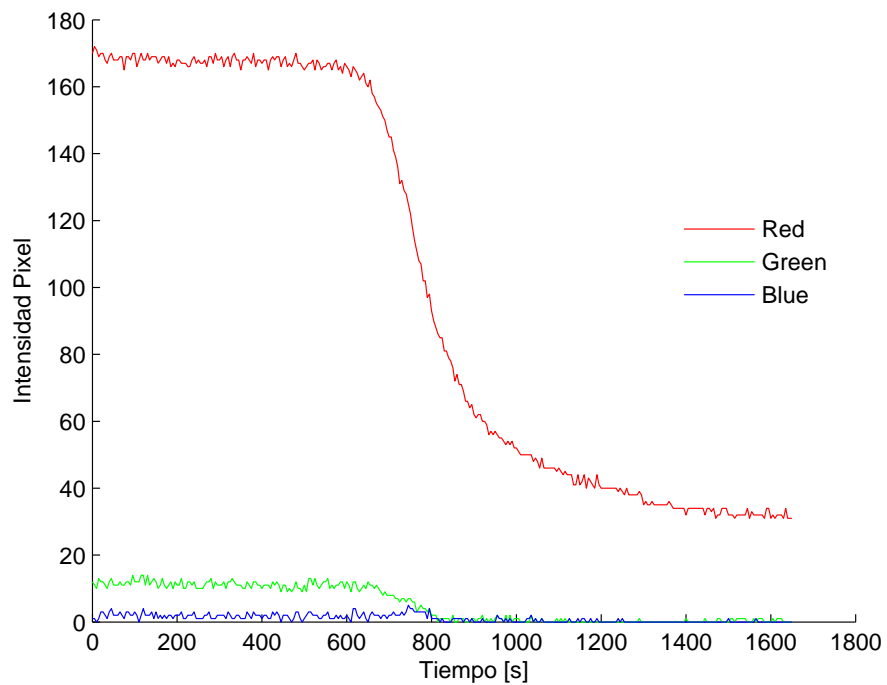


Figura 3.7: Variación de intensidades del modelo de color RGB en un pixel representativo del experimento, con uso de filtro en el lente de la cámara.

3.5. Análisis de la fuente de iluminación

En un principio el diseño del experimento se realizó pensando en que el tanque sería iluminado por su parte posterior, tal como se realizó en el montaje experimental de Zinn et al.(2004). Para ello se construyó un panel LED, que se ubicó 20 [cm] detrás del tanque. Como difusor se utilizó una placa de acrílico blanco de 5 [mm] de espesor.

Para tener un acercamiento a los experimentos definitivos de esta tesis, se realizó una experiencia previa (iluminada por detrás) que consistía en saturar el medio permeable con agua clara (estado 1), luego inyectar BB por una mitad del tanque (estado 2) para después inyectar BB por la otra mitad, teniendo así todo el tanque saturado de BB (estado 3). Se graficaron las intensidades de luz (sólo del canal rojo) a lo largo de un perfil transversal del tanque, para cada uno de los tres estados, resultado que se muestra en la Figura 3.8.

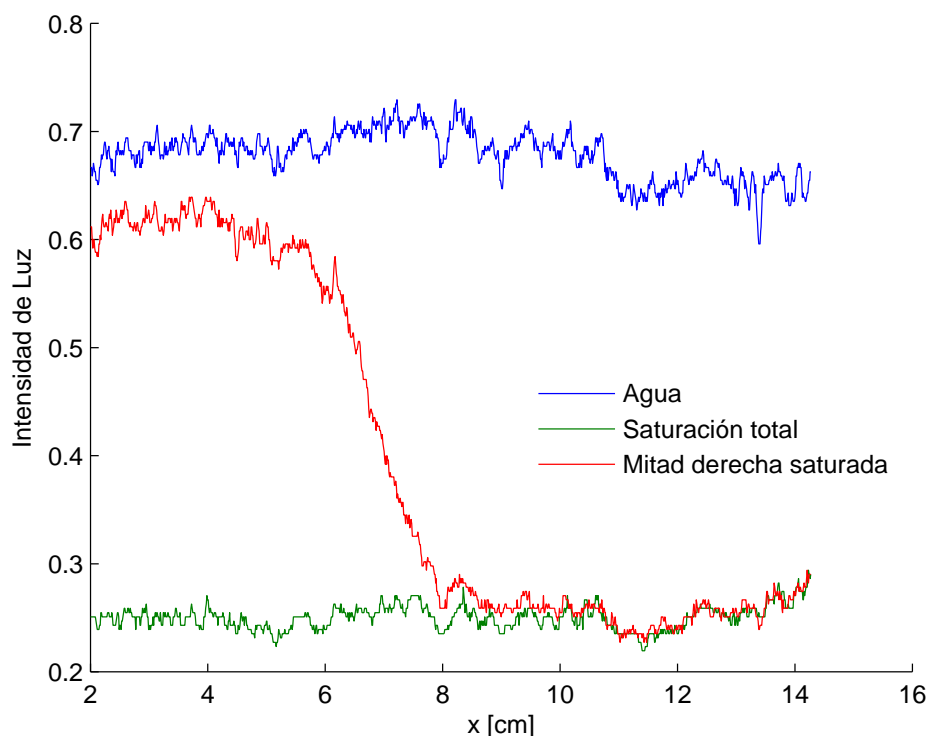


Figura 3.8: Intensidades de luz en una franja transversal representativa del tanque para el estado saturado con agua (azul), estado mitad derecha del tanque con BB (rojo) y estado saturado de BB (verde).

En ausencia de refracción de luz se esperaría que la línea roja coincidiera con la azul en la zona extrema izquierda del tanque, dado que contiene agua clara, y con la verde en la zona extrema derecha, la cual está saturada de BB. Entre medio de esas dos zonas se esperaría ver una región de transición de la intensidad de luz, región que se conoce como zona de mezcla, pues es donde actúa la dispersión transversal. En ausencia de dispersión

transversal se tendrían sólo dos zonas, una saturada con agua y la otra con BB. Se aprecia que la intensidad de luz en la zona izquierda es menor a lo esperado, lo que lleva a entender que de algún modo se está “perdiendo” luz. Este hecho podría explicarse en que parte de la luz que atraviesa la zona saturada de BB se refracte y “tiña” la zona saturada de agua clara. La refracción pudiese ocurrir pues la luz debe atravesar el espesor del tanque, de 1 [cm] de microesferas de vidrio saturadas y la luz cambia de dirección al pasar de un medio a otro.

Para comprender de mejor manera el fenómeno descrito en el párrafo anterior, se realizó un ejercicio práctico. Se saturó con agua el tanque lleno con microesferas de vidrio y se tomó una fotografía. Luego se colocó una película de papel celofán de color azul, para emular la presencia de BB en la zona central posterior del tanque, y se tomó una fotografía. Posteriormente la misma franja se puso en la zona central delantera del tanque para tomar otra fotografía. El ancho de la película de papel celofán fue de 6 [cm]. Las fotografías se muestran en la Figura 3.8. Recordar que el lente de la cámara usa un filtro de color rojo.

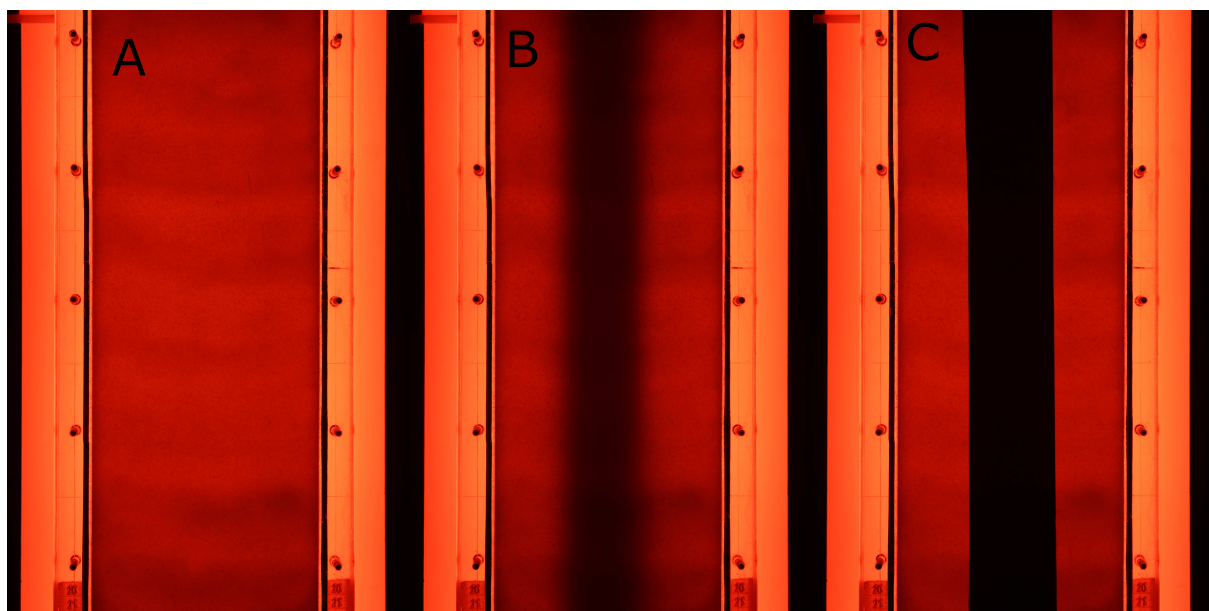


Figura 3.9: Análisis de iluminación por parte trasera. A) Tanque saturado con agua. B) Franja de celofán en parte posterior del tanque. C) Franja de celofán en parte delantera del tanque.

En la Figura 3.9 se logra apreciar claramente la diferencia entre la fotografía del tanque con la franja de papel celofán pegada en la parte trasera del tanque (B) y la fotografía con la franja pegada en la parte delantera (C). En la fotografía B, la luz primero tiene contacto con la franja de papel celofán y luego atraviesa el medio permeable, refractándose en el mismo, distorsionando la forma de la franja. En la fotografía C la luz tiene contacto al final de su trayectoria con la franja de papel, por lo que no se refracta, con lo cual no distorsiona la forma de la franja. Para ver de forma más clara este fenómeno, se graficaron las intensidades de luz en una franja transversal del tanque, para cada una de las situaciones de la Figura 3.9, resultado que se muestra en la Figura 3.10.

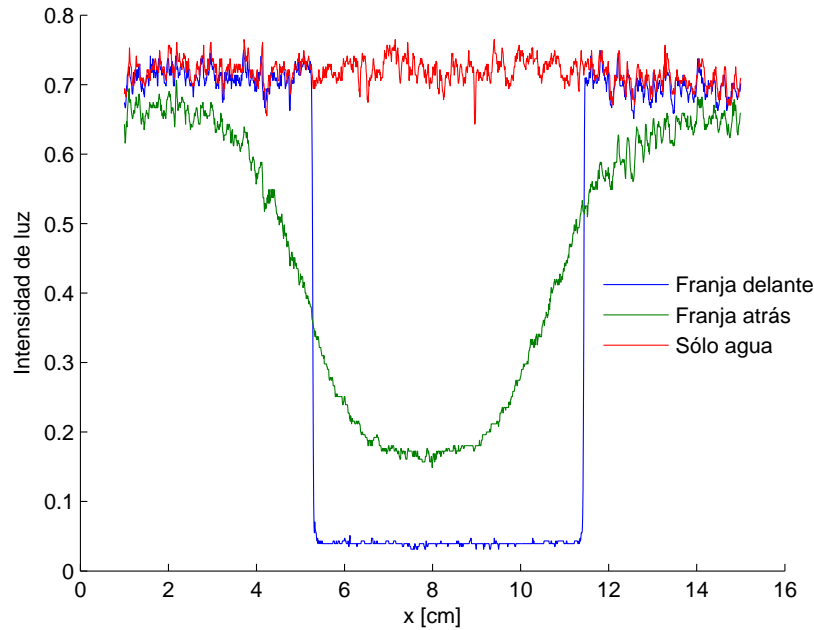


Figura 3.10: Intensidad de luz para la situación con franja de papel celofán por detrás, por delante y sin celofán en el tanque. Iluminación por detrás del tanque.

Se aprecia en la Figura 3.10 que para el caso que el papel celofán se encuentra pegado por detrás, se distorsiona la forma de la franja de papel. La luz se refracta hacia las orillas y la intensidad de luz baja, al igual que lo que ocurría en la Figura 3.8. Dado este hecho se busca como alternativa la iluminación por la parte delantera del tanque. Para estudiar la validez de esta técnica, se pega la misma franja de papel celofán en la parte delantera del tanque y se compara con la situación sin franja. Las fotografías se muestran en la Figura 3.11. No tiene sentido colocar la franja atrás del tanque, pues al iluminar por delante ésta no se ve en una fotografía tomada desde el frente del tanque. En la Figura 3.12 se presenta como varía la intensidad de luz en una franja transversal del tanque para la situación con y sin papel celofán.

De la Figura 3.12 se desprende que se soluciona el fenómeno de refracción de luz en las orillas del tanque. Si bien es cierto que la forma de la franja no se ve rectangular, esto podría explicarse en que el papel celofán genera sombra en el acrílico, lo que se aprecia en la Figura 3.11 B y he ahí la explicación del por qué la distorsión en la forma de la franja. Este hecho no debiera tenerse si la franja estuviera por dentro del tanque, lo cual es lo que ocurre en los experimentos con trazador. De este modo se elige la iluminación por la parte delantera del tanque por sobre la iluminación por la parte trasera. Así el montaje experimental queda como el mostrado en la Figura 3.2.

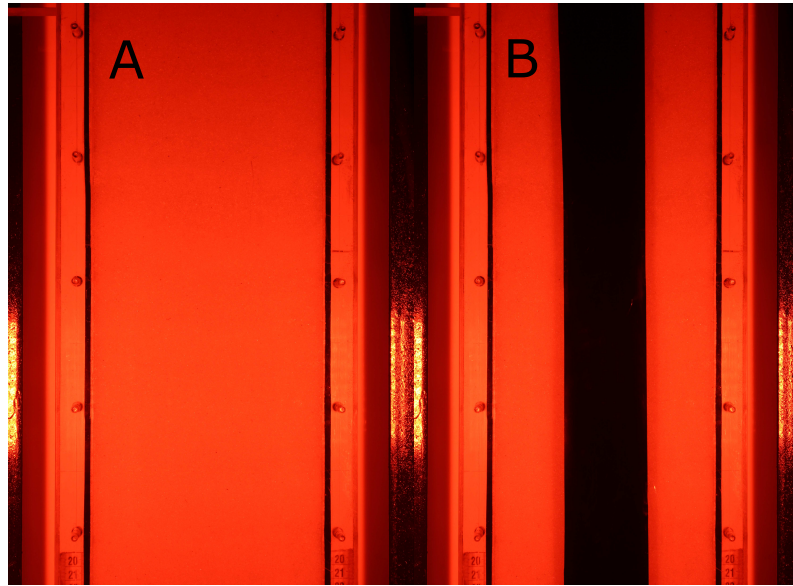


Figura 3.11: Análisis de iluminación por parte delantera. A) Tanque saturado con agua. B) Franja de celofán en parte delantera del tanque.

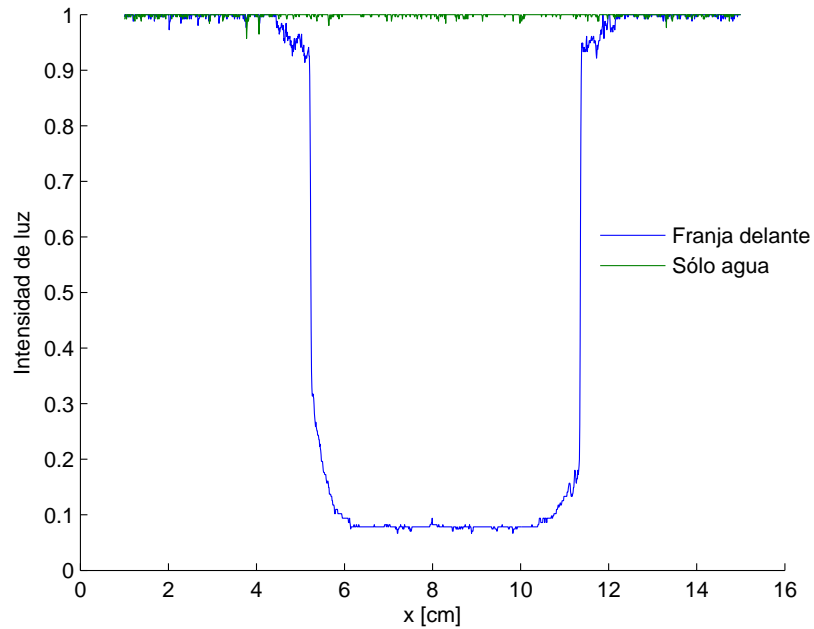


Figura 3.12: Intensidad de luz para la situación con franja de papel celofán por delante y sin celofán en el tanque. Iluminación por delante del tanque.

Definidos todos los aspectos relevantes de la metodología experimental, se da paso a la descripción de los experimentos realizados en esta tesis y al análisis de resultados.

4. Resultados

4.1. Experimento homogéneo

4.1.1. Descripción del experimento

Para lograr la construcción de un medio permeable homogéneo saturado se insertan microesferas de vidrio de $d_{50} = 0,52$ [mm] por la parte superior del tanque, siempre teniendo cuidado que haya una película de agua por sobre ellas, mediante el uso de las bombas peristálticas. Para evitar que quede aire atrapado, se hace en capas de no más de 1 [cm] y se golpea con un martillo de goma el tanque, para el asentamiento de las microesferas. Cuando el tanque se encuentra lleno, se tapa y se conecta el vertedero de carga constante. Ya con el medio saturado, se hace circular un caudal $Q = 1,26$ [mL/min] por cada puerto. Los dos puertos centrales inyectan BB con una concentración conocida, mientras que los otros puertos inyectan agua clara. De este modo se busca emular el problema descrito en la Figura 2.6. Cuando se alcanza el estado permanente, se toma una fotografía de él, con el fin de caracterizar el campo de concentraciones de este experimento.

4.1.2. Análisis de imágenes

La Figura 4.1 muestra la fotografía que describe el estado permanente del experimento homogéneo. Dada la ubicación de la cámara y la fijación del lente (máximo zoom, 55 mm) no se tiene una fotografía de todo el tanque, lo cual no es necesario pues sólo se analizará una porción de éste, la cual es mostrada dentro de la Figura 4.1. La sección a analizar corresponde a 12 [cm] de ancho por 10 [cm] de alto, la cual corresponde desde la horizontal $y = 2$ [cm] a $y = 14$ [cm] y desde la vertical $x = 45$ [cm] a $x = 55$ [cm]. La escala que se tiene es 1 [cm] = 121 pixeles, la cual se determina en base a una distancia conocida entre marcas hechas en el tanque. Así la zona de análisis corresponde a 1.760.794 pixeles.

Para lograr definir la concentración que posee cada pixel en la imagen, es necesario conocer como va variando la intensidad de luz de un pixel ante un cambio en la concentración del trazador, lo que se obtiene de la curva de calibración. Para ello, previo a la realización del experimento homogéneo como tal, se saturó el tanque con diversas concentraciones y se analizó como iba variando la intensidad del canal rojo en cada pixel de las fotografías. Se usaron 9 concentraciones distintas para poder hacer la calibración, $C = [0.00; 0.58; 1.00; 4.89; 9.9; 14.15; 19.02; 23.81; 28.30]$ [mg/L], las cuales fueron medidas en el espectrofotómetro. Para asegurarse que ni el tanque ni la cámara se moviera, se verificaban las coordenadas de marcas hechas en el tanque. Para reducir ruido en las imágenes, la intensidad de luz en cada pixel se promedió en una ventana móvil de 15 x 15 pixeles. Las imágenes del proceso de calibración

se muestran en el Anexo C.



Figura 4.1: Imagen estado permanente experimento homogéneo. Se muestra el área de estudio analizada.

La Figura 4.2 muestra la absorbancia de luz para cada fotografía de la calibración, en el 1% del área de análisis (equivalente a 18.889 píxeles). Al definirse la absorbancia (A) como una cantidad negativa, se grafica $A = \ln \left(\frac{I_0}{I} \right)$ (Ecuación 3.1). La concentración se normaliza por la máxima concentración utilizada en la calibración, $C_0 = 28,3 [mg/L]$.

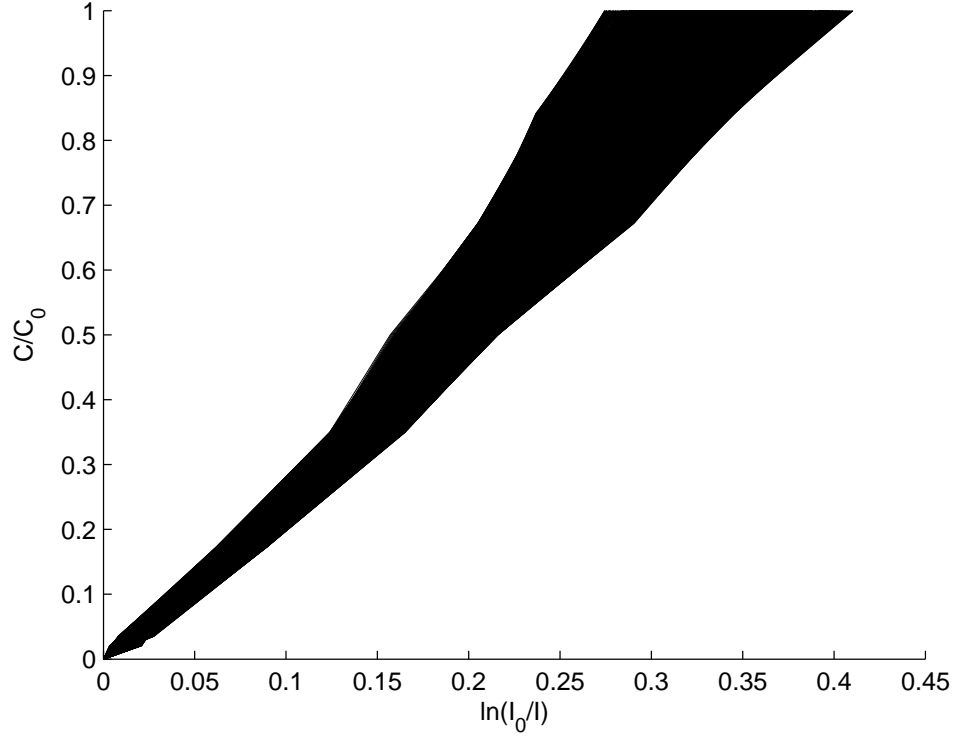


Figura 4.2: Relación concentración de trazador versus absorción de luz para 18.899 pixeles (1 % área de estudio). Calibración experimento homogéneo.

Si la ley de Beer Lambert fuera correcta para un medio poroso no se deberían ver los quiebres que se aprecian en la Figura 4.2, sino que se tendrían que tener sólo rectas de diferentes pendientes para cada pixel. Por esto se decidió hacer una relación lineal por tramos para cada pixel, calculando la pendiente entre cada tramo de concentraciones. Dicha calibración matemáticamente se expresa como:

$$C \left(\ln \left[\frac{I_0}{I} \right] \right) = C \left(\ln \left[\frac{I_0}{I^i} \right] \right) + \frac{[C \left(\ln \left[\frac{I_0}{I^{i+1}} \right] \right) - C \left(\ln \left[\frac{I_0}{I^i} \right] \right)]}{\left[\ln \left[\frac{I_0}{I^{i+1}} \right] - \ln \left[\frac{I_0}{I^i} \right] \right]} \left[\ln \left[\frac{I_0}{I} \right] - \ln \left[\frac{I_0}{I^i} \right] \right] \quad (4.1)$$

donde:

I_0 : Intensidad de luz en el estado $C = 0$, para cada pixel.

I : Intensidad de luz en el estado estacionario del experimento homogéneo.

$C \left(\ln \left[\frac{I_0}{I} \right] \right)$: Concentración normalizada para la variable $\ln \left[\frac{I_0}{I} \right]$, para cada pixel.

$C \left(\ln \left[\frac{I_0}{I^i} \right] \right)$: Concentración normalizada para la variable $\ln \left[\frac{I_0}{I^i} \right]$ (extremo inferior del intervalo donde se encuentra $\ln \left[\frac{I_0}{I} \right]$) para cada pixel, la cual es conocida por la curva de calibración.

$C \left(\ln \left[\frac{I_0}{I^{i+1}} \right] \right)$: Concentración normalizada para la variable $\ln \left[\frac{I_0}{I^{i+1}} \right]$ (extremo superior del intervalo donde se encuentra $\ln \left[\frac{I_0}{I} \right]$) para cada pixel, la cual es conocida por la curva de

calibración.

Conocida la relación $\frac{C}{C_0}$ versus $\ln \left[\frac{I_0}{I} \right]$, para cada pixel, se hizo pasar una concentración de trazador igual a C_0 a través de los dos puertos centrales y agua clara por los seis restantes. Para alcanzar el estado permanente se inyectaron dos volúmenes de poros. Luego de alcanzado el estado permanente se tomó una fotografía (Figura 4.1). Dicha imagen se analizó de acuerdo a la ecuación 4.1, de tal modo que se pudo calcular la concentración en cada pixel, resultado que se muestra en la Figura 4.3. El campo de concentraciones obtenido mediante imágenes presenta cierto ruido, el cual ocurre por la presencia del medio permeable y las impurezas del mismo.

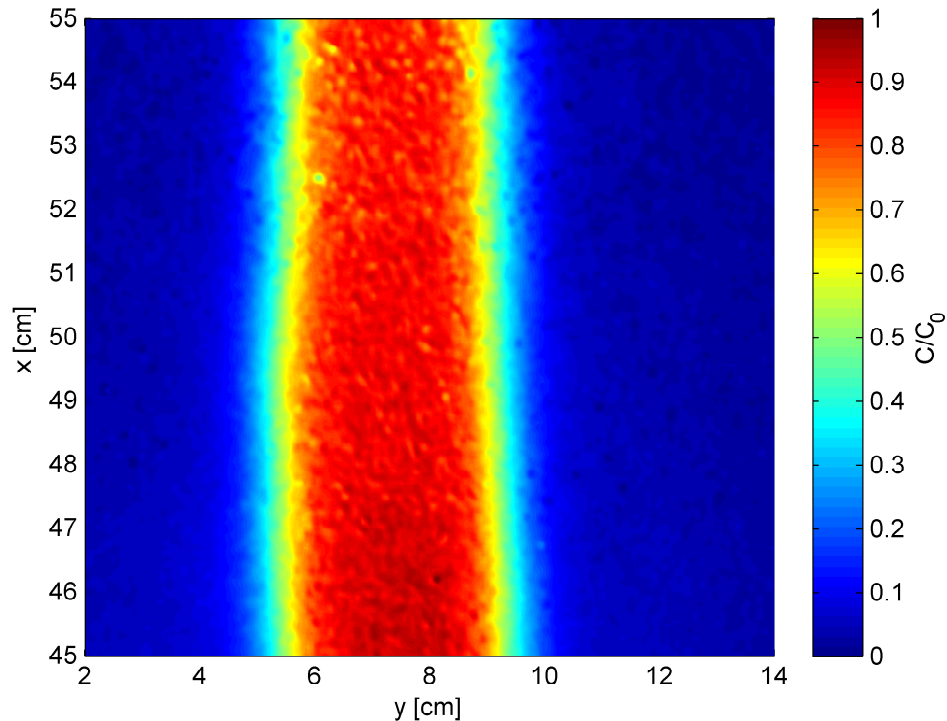


Figura 4.3: Mapa de concentraciones del área de análisis del experimento homogéneo, obtenido mediante análisis de imágenes.

4.1.3. Modelación numérica del experimento

Se realizó un modelo numérico del experimento homogéneo en el software GMS (Groundwater Modeling System). Dicho software resuelve el problema del flujo mediante MODFLOW (McDonald & Harbaugh, 1988), código del USGS que utiliza diferencias finitas, y el problema del transporte utilizando MT3DMS (Zheng & Wang, 1999). Además permite graficar líneas de corrientes utilizando el método de particle tracking, a través del módulo MODPATH (Pollock, 1989).

Para la construcción del modelo se utilizó una grilla cuadrada de $129 \times 680 = 87720$ elementos. Cada elemento cubre un área de $1,25 [mm] \times 1,25 [mm]$, la cual es equivalente al área donde se promedia cada imagen (15×15 pixeles). Se utilizó como valor de conductividad hidráulica el determinado en los ensayos de permeabilidad para las microesferas de $d_{50} = 0,52 [mm]$, es decir $K = 0,12 [cm/s]$. Se utilizó un valor de porosidad de 36% , en base al volumen de agua necesitado para saturar el tanque. Como condición de borde inferior se utilizaron 8 pozos de inyección, en la ubicación de cada uno de los puertos del montaje experimental con un caudal igual al inyectado en cada puerto por las bombas peristálticas. La condición de borde de salida se modela como carga constante. Se resolvió el flujo mediante el solver DE4 Direct. Para el problema del transporte se utiliza la dispersividad longitudinal obtenida de los ensayos de dispersividad ($\alpha_L = 0,12 [cm]$) y una dispersividad transversal igual al 13% de la longitudinal. Este resultado se obtuvo en base a la solución teórica ajustada a las concentraciones obtenidas mediante el análisis de imágenes. Como condición inicial se asume $C = 0$ en todo el dominio. Se utiliza el esquema Third Order Total Variation Diminishing (TVD) scheme para resolver el transporte advectivo. La Figura 4.4 muestra las líneas de corriente y los resultados de concentraciones modeladas por el programa.

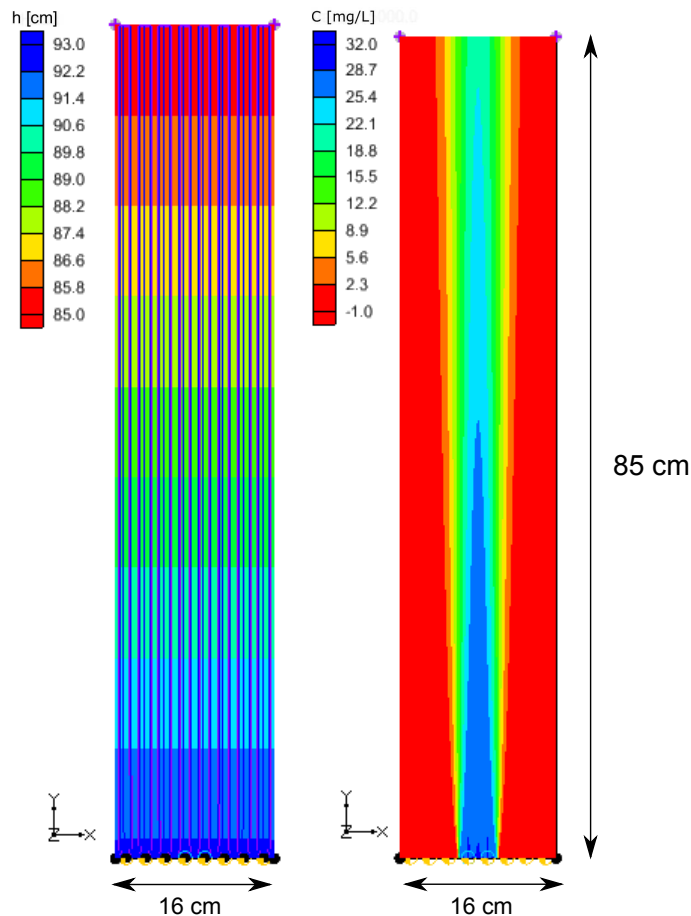


Figura 4.4: Resultados modelo numérico en GMS del experimento homogéneo. A la izquierda se muestran las líneas de corriente y a la derecha las concentraciones modeladas.

Las concentraciones obtenidas en GMS se pueden exportar, para ser trabajadas en otro programa. La Figura 4.5 muestra las concentraciones obtenidas en el área de análisis, es decir para $y = 2$ [cm] hasta $y = 14$ [cm] y desde $x = 45$ [cm] hasta $x = 55$ [cm].

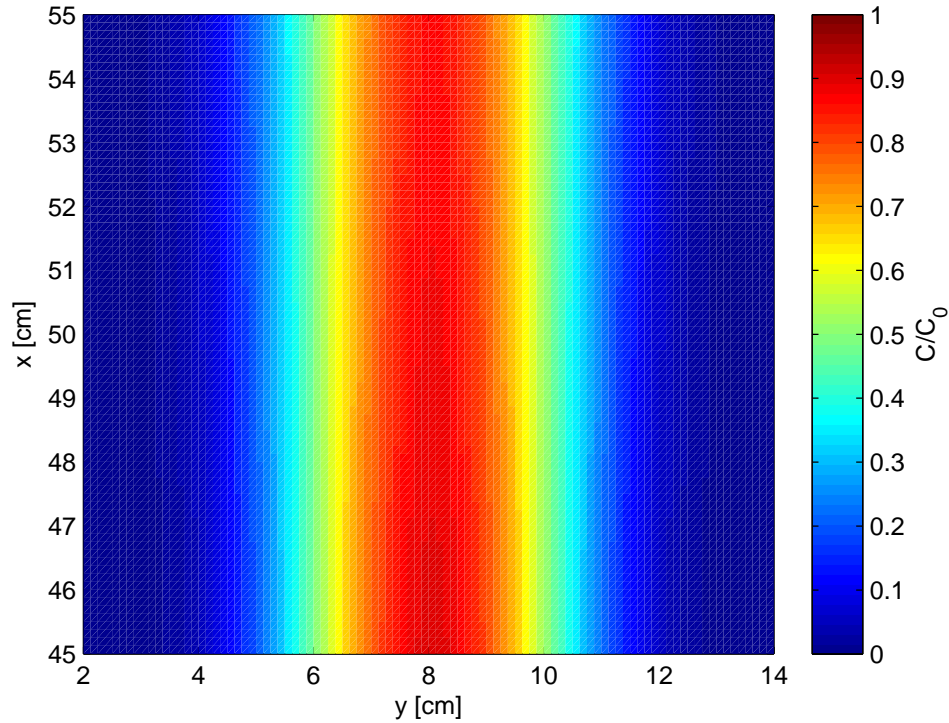


Figura 4.5: Concentraciones obtenidas para el área de análisis mediante el modelo numérico en el experimento homogéneo.

Es posible apreciar diferencias entre el campo de concentraciones obtenido mediante análisis de imágenes (Figura 4.3) y el modelado numéricamente (Figura 4.5). Es importante entender que el modelo numérico representa una situación simplificada, donde todas las celdas tienen la misma conductividad hidráulica y dispersividad. Eso no es del todo cierto, dada la construcción del medio y su granulometría extendida, lo que genera diferencias en la conductividad hidráulica local. Esto hace que la forma de la pluma se vaya contrayendo y expandiendo, hecho que sí puede ser captado por las imágenes.

4.1.4. Comparación a solución teórica

Como se mostró en el marco teórico de este informe, la solución analítica del problema en estudio puede ser estimada a partir de (2.20). En dicha ecuación los únicos parámetros desconocidos son el coeficiente de dispersión transversal y el ancho de la fuente. Estos parámetros pueden ser obtenidos mediante optimización, ajustando la solución teórica a las concentraciones obtenidas con el análisis de imágenes, para cada franja transversal analizada. Para el

caso del ancho de la fuente es importante recordar que aunque se conoce la distancia entre los dos puertos que inyectan BB (2 [cm]), éstas son fuentes puntuales y la solución teórica es para el caso de una fuente lineal, por lo que se prefiere calibrar el valor de dicho parámetro. Se obtiene que en promedio el ancho de la fuente es de $Y = 3,6$ [cm]. También es importante conocer en que coordenada del dominio se alcanza esa condición de fuente lineal, lo cual se puede obtener del modelo numérico, ajustando la solución teórica a las obtenidas en GMS. Se obtiene que a una distancia de 5 [cm] sobre las inyecciones puntuales, se puede considerar la condición de borde como una fuente lineal.

Conocido el ancho y la posición de la fuente lineal, se fija para cada franja vertical del dominio y se procede a calibrar la dispersividad transversal para cada perfil. La Figura 4.6 muestra el valor de la dispersividad transversal en relación a la dispersividad longitudinal, para cada franja del dominio. Se obtiene que en promedio, la dispersividad transversal es un 13% de la longitudinal, lo que se utilizó en el modelo numérico.

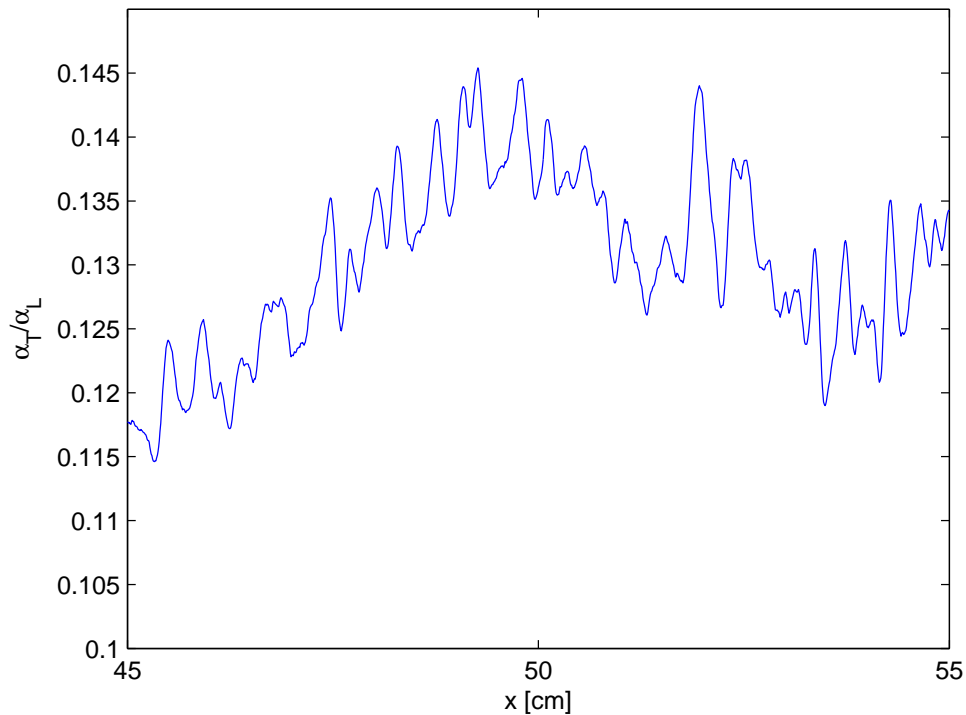


Figura 4.6: Dispersividad transversal para cada franja del dominio. Experimento homogéneo.

Conocidos todos los parámetros de la solución teórica se presentan en la Figura 4.7 las concentraciones obtenidas para el área de análisis, según la solución analítica del problema en estudio.

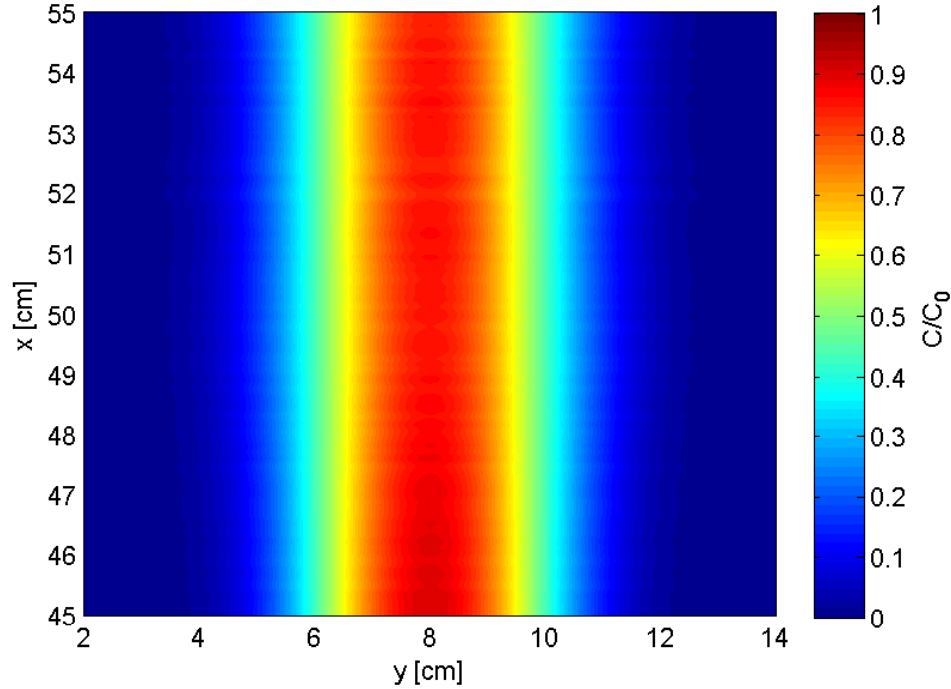


Figura 4.7: Solución teórica para el área de estudio. Experimento homogéneo.

A modo de poder comparar los resultados obtenidos mediante el análisis de imágenes, el modelo numérico y la solución teórica, se presentan en la Figura 4.8 los tres resultados para el perfil más alejado de la condición de borde, es decir para $y = 55$ [cm]. En la Figura 4.8 se aprecia la similitud entre la solución teórica y la simulación numérica del experimento, las cuales no coinciden del todo con las concentraciones obtenidas mediante el análisis de imágenes, dado que este último método representa de forma más real lo ocurrido en el experimento, mientras que la solución analítica y la simulación numérica representan una situación idealizada: campo de velocidades unidireccional y propiedades homogéneas en todo el dominio. Las concentraciones calculadas mediante el análisis de imágenes presentan discontinuidades espaciales, las que podrían tenerse debido al ruido que generan las partículas del medio permeable. Dicho ruido trató de minimizarse al promediar las imágenes, pero es imposible de eliminar completamente.

4.2. Experimento heterogéneo

4.2.1. Descripción del experimento

Para la construcción de un medio permeable heterogéneo se insertó una inclusión rectangular de material más grueso dentro de la matriz fina ($d_{50} = 0,52$ [mm]). La inclusión tenía dimensiones de 10 [cm] de largo y 1,5 [cm] de ancho y era de microesferas de vidrio de 2

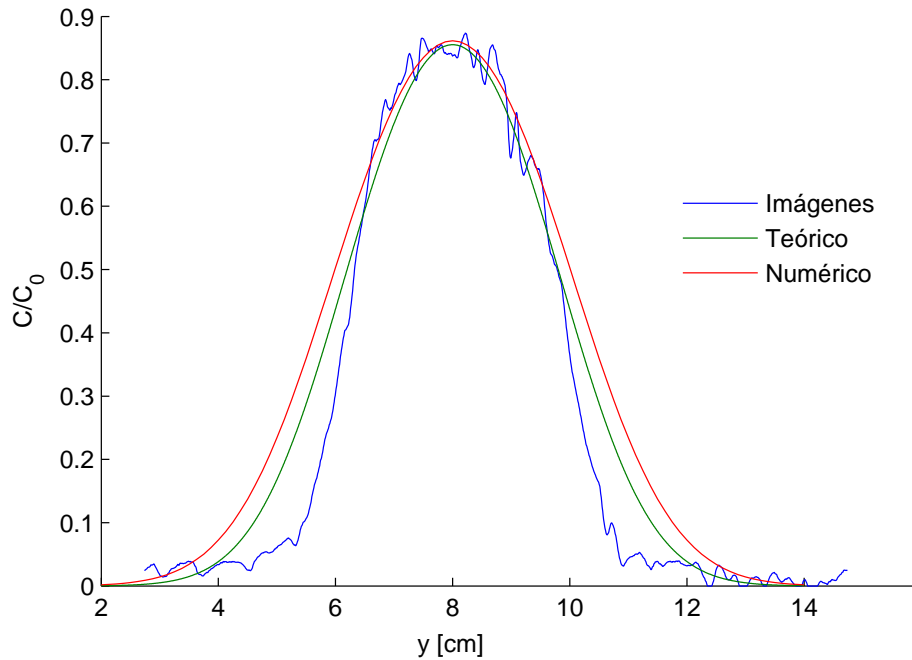


Figura 4.8: Resultados obtenidos mediante imágenes, modelo numérico y solución teórica para el experimento homogéneo, en $x = 55$ [cm].

[mm] de diámetro uniforme. La inclusión se ubicó centrada, es decir a la misma distancia de las orillas del tanque.

Lograr la construcción del medio heterogéneo no fue tarea fácil dada la forma del tanque, pues éste era muy largo, lo que impedía insertar las microesferas en una forma rectangular determinada sin que se desarmara dicha estructura. Se debió recurrir al congelamiento de la inclusión, para lo cual se construyó un molde de acrílico, desarmable, en el cual se armaba la inclusión y luego se llevaba a un congelador a $-20^\circ C$. Para armar el medio heterogéneo primero se insertó material fino hasta cierta altura ($x = 23$ [cm]), siempre manteniendo una capa de agua sobre el medio para asegurar la saturación. Dicha posición se escogió para poder comparar la misma zona de análisis que la del experimento homogéneo. Posteriormente se insertó la inclusión congelada y se acomodó su posición con varillas de acrílico, para que quedara centrada. Se subió el nivel de agua con las bombas peristálticas y a las orillas de la inclusión se insertaron microesferas de material fino. El agua iba derritiendo la inclusión, por lo cual se utilizó agua fría, a $5^\circ C$, para saturar el material de las orillas. Ya sobre la inclusión se construyó el medio al igual que en el experimento homogéneo. Cuando el tanque se llenó, se tapó y se conectó el vertedero de carga constante.

El experimento heterogéneo busca medir el efecto de la inclusión en el campo de concentraciones de BB, sujeto a las mismas condiciones de flujo del experimento homogéneo. Para ello se hizo circular un caudal $Q = 1,26$ [mL/min] por cada puerto. Los puertos centrales inyectaron BB con una concentración conocida, mientras que los otros puertos inyectaron agua clara, logrando la misma configuración del experimento homogéneo. La Figura 4.9 muestra una fotografía del experimento heterogéneo en su estado permanente, donde se puede apre-

ciar la inclusión rectangular. Antes de realizar el experimento en sí, se llevó a cabo el proceso de calibración que permite caracterizar el campo de concentraciones posteriormente, al igual que lo realizado en el experimento homogéneo.

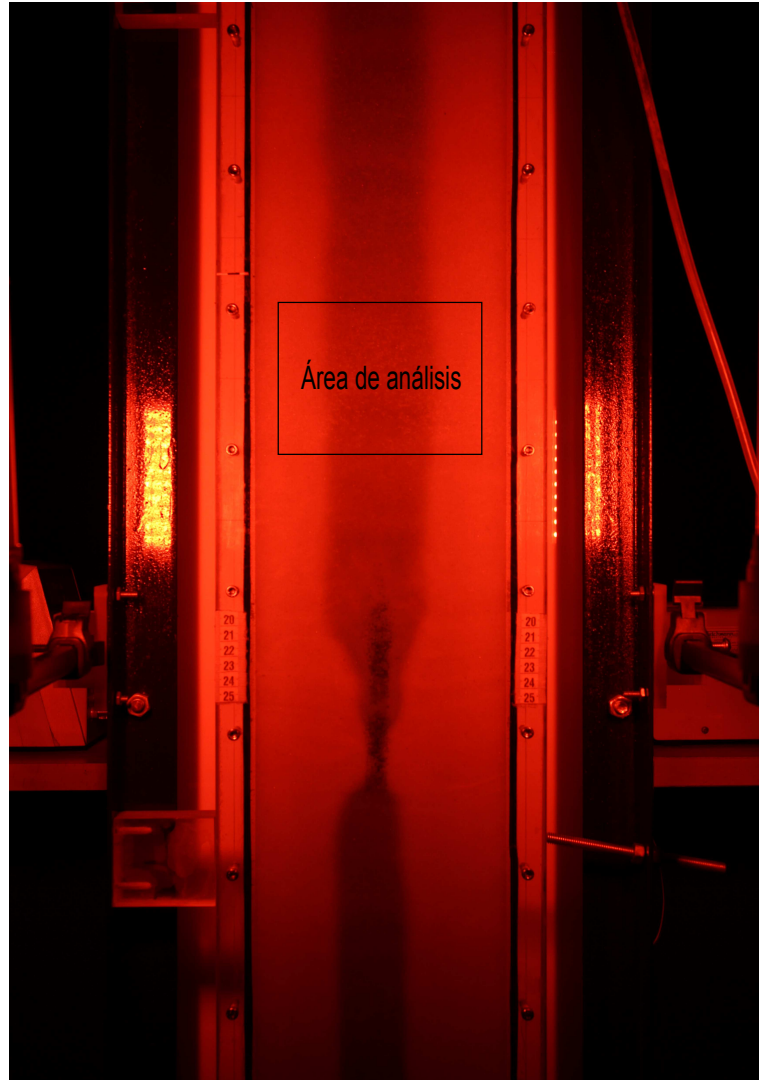


Figura 4.9: Estado permanente del experimento heterogéneo. Se muestra el área de estudio analizada.

4.2.2. Análisis de imágenes

Se siguió la misma metodología para establecer la relación entre absorción de luz y concentración de trazador, es decir se saturó el tanque con diversas concentraciones y se analizó como iba variando la intensidad del canal rojo en cada pixel de las fotografías. Se usaron 9 concentraciones distintas para poder hacer la calibración, $C = [0,00; 0,59; 1,26; 5,34; 10,90; 16,98; 22,04; 25,45; 29,01] [mg/L]$. Para asegurarse que ni el tanque ni la cámara se moviera, se verificaban las coordenadas de marcas hechas en el tanque. Para reducir ruido en las imágenes, la intensidad de luz en cada pixel se promedió en una ventana móvil de 15×15

pixeles. La escala de las fotografías es $1 [cm] = 121$ pixeles, por ende la zona de análisis ($12 [cm] \times 10 [cm]$) corresponde a $1.751.600$ pixeles. Las imágenes del proceso de calibración se muestran en los Anexos de este informe.

La Figura 4.10 muestra la absorbancia de luz para cada fotografía de la calibración, en el 1% del área de análisis, equivalente a 18.850 pixeles. Se grafica $A = \ln\left(\frac{I_0}{I}\right)$, de acuerdo a (3.1). La concentración se normaliza por la máxima concentración utilizada en la calibración, $C_0 = 29,01 [mg/L]$.

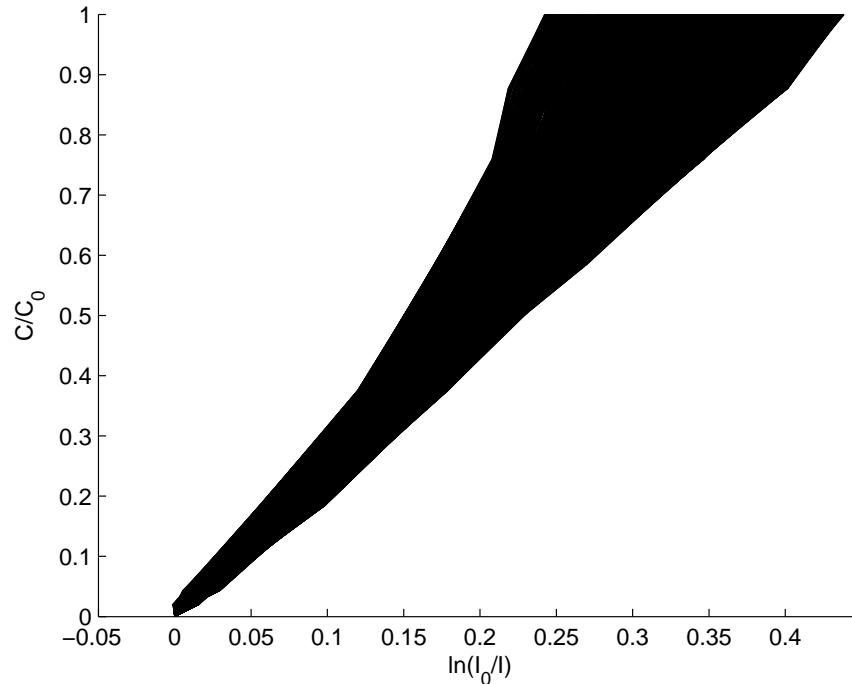


Figura 4.10: Relación concentración de trazador versus absorción de luz para 18.850 pixeles, equivalente al 1% área de estudio). Calibración experimento heterogéneo.

Se definió la curva de calibración para cada pixel como lineal por tramos, de acuerdo a (4.1). La fotografía a la cual se aplica la curva de calibración se presenta en la Figura 4.11 y se toma con el máximo zoom del lente de la cámara ($55 [mm]$). Recordar que la zona de análisis es la misma que en el caso del experimento homogéneo, por ende no aparece la heterogeneidad, lo cual no es relevante, pues sólo se busca medir el efecto de ésta en el estado permanente del experimento.

La Figura 4.12 muestra el mapa de concentraciones de BB en la zona de análisis para el experimento heterogéneo, el cual se calculó en base a la curva de calibración pixel por pixel. Al igual que el campo de concentraciones obtenido para el experimento homogéneo, es posible apreciar ruido en la imagen.



Figura 4.11: Imagen estado permanente experimento heterogéneo. Se muestra el área de estudio analizada.

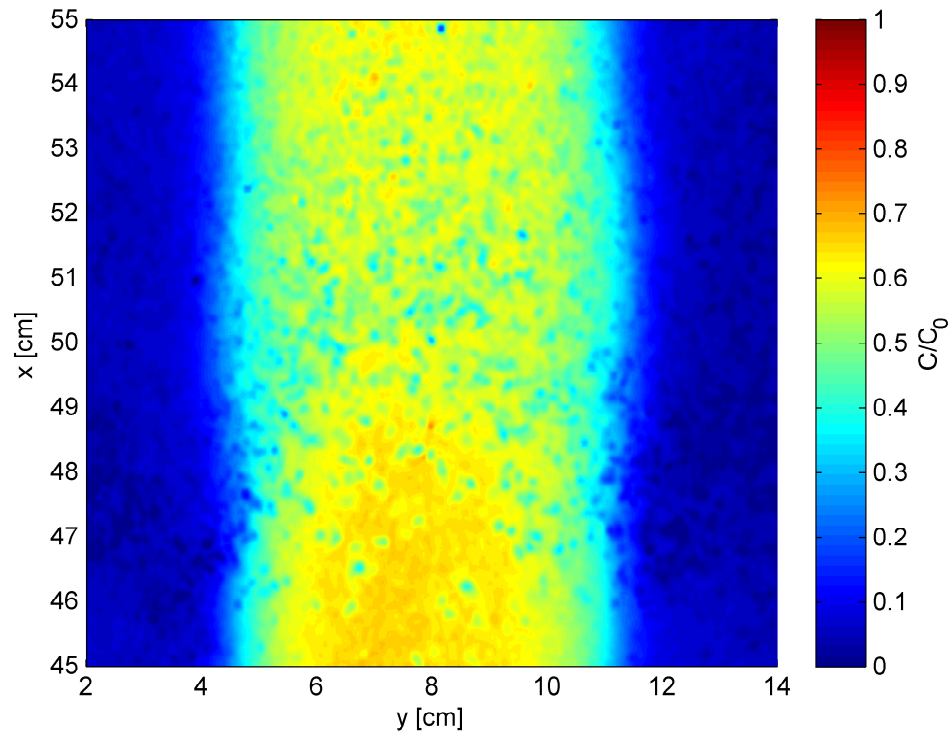


Figura 4.12: Mapa de concentraciones del área de análisis del experimento heterogéneo, obtenido mediante análisis de imágenes.

4.2.3. Modelación numérica del experimento

Al igual que para el experimento homogéneo se realizó una modelación numérica del caso heterogéneo en GMS. Las características del modelo son las mismas que en el caso homogéneo, es decir, igual tamaño de grilla, condiciones de borde y condición inicial; con la excepción que se modela la inclusión de dimensiones 10 [cm] x 1,5 [cm] (alto por ancho), desde $x = 23$ [cm] a $x = 33$ [cm], con $K = 4,76$ [cm/s] determinado en ensayo de carga constante y $\alpha_L = 0,08$ [cm] a partir de ensayo de dispersividad. La dispersividad transversal se modela como un 13 % de la longitudinal $\alpha_T = 0,13\alpha_L$, en base a los ajustes realizados a la solución teórica del experimento homogéneo. Los esquemas de resolución tanto del flujo como del transporte son los mismos del modelo homogéneo.

La Figura 4.13 muestra los resultados obtenidos del modelo numérico en GMS. En dicha figura se aprecia como las líneas de corriente se contraen para entrar en la inclusión, pues ésta genera menores pérdidas de energía al tener mayor conductividad hidráulica. A la inclusión ingresan líneas de corriente que transportan masa y líneas de corriente que no. Las líneas de corriente en la inclusión tienen una menor distancia entre sí, lo que aumenta el intercambio de masa entre ellas por lo que aumenta la mezcla. Es por este hecho que a la salida de la inclusión, cuando las líneas de corriente se expanden, la concentración de trazador es menor que a la entrada, pues más líneas de corriente llevan masa, lo que se traduce en que hay un área mayor del medio con trazador.

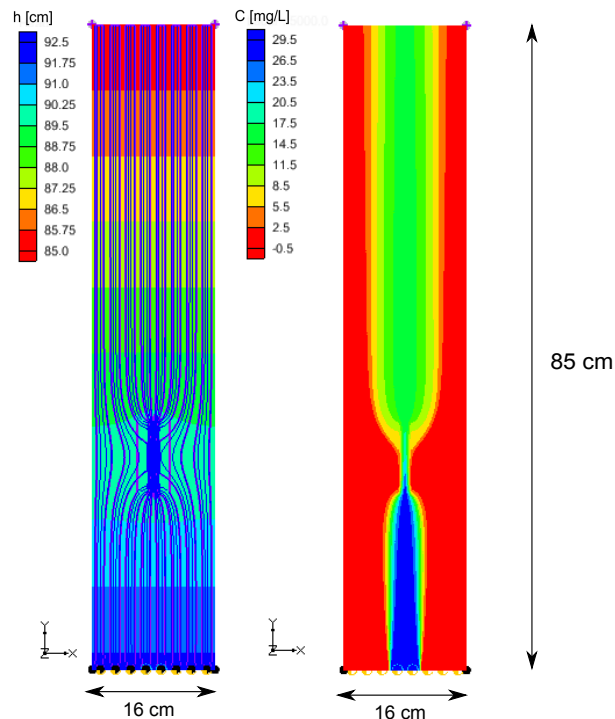


Figura 4.13: Resultados modelo numérico en GMS del experimento heterogéneo. A la izquierda se muestran las líneas de corriente y a la derecha las concentraciones modeladas.

Con el fin de comparar más claramente el experimento homogéneo con el heterogéneo, los resultados del modelo numérico heterogéneo son exportados desde GMS y se presentan junto a los resultados de la modelación del experimento homogéneo en la Figura 4.14, para la zona de análisis,

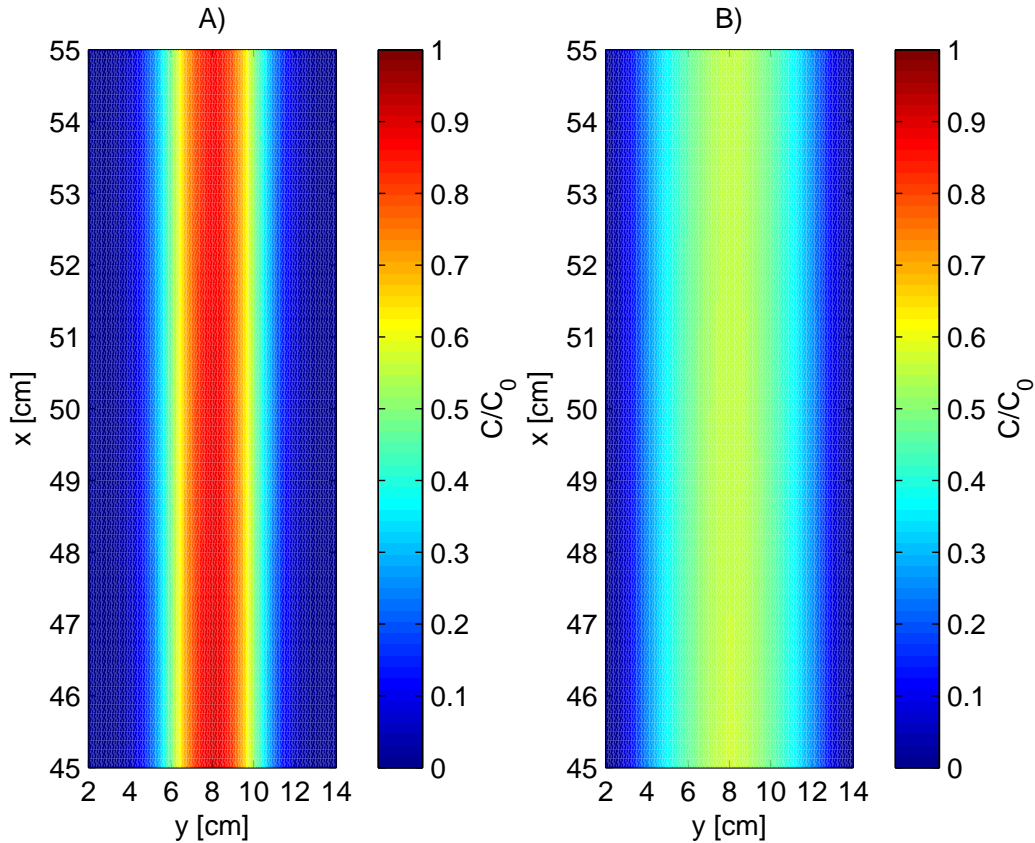


Figura 4.14: A) Concentraciones obtenidas para el área de análisis mediante el modelo numérico en el experimento homogéneo. B) Concentraciones obtenidas para el área de análisis mediante el modelo numérico en el experimento heterogéneo.

Es importante tener en cuenta que según los resultados de la simulación numérica en la zona de análisis las líneas de corriente son cuasi paralelas entre sí, por lo que se asumió una situación equivalente en un medio homogéneo para ajustar un “coeficiente de dispersividad transversal efectivo” para el experimento heterogéneo, utilizando la solución teórica del problema de inyección de fuente lineal en medio homogéneo, de acuerdo a (2.20). Esta será una forma de cuantificar cuanto aumenta la dispersión transversal por efecto de la inclusión. Dicho ajuste no es correcto desde el punto de vista teórico, pues el medio heterogéneo no cumple todos los supuestos del problema, tales como campo de velocidad unidireccional, pero se llevará a cabo dada la simplicidad que representa y que ya se hizo para el experimento homogéneo. Aun así el campo de velocidades es unidireccional en la zona de análisis y de igual magnitud que el del experimento homogéneo, resultado que se obtiene de las simulaciones numéricas y que será presentado más adelante.

4.2.4. Comparación a solución teórica del experimento homogéneo

Se intentó ajustar la solución teórica, presentada en (2.20) a los resultados obtenidos mediante el análisis de imágenes para el experimento heterogéneo. Esto se realiza para todas las franjas transversales de la zona de análisis, es decir desde $x = 45$ [cm] a $x = 55$ [cm], donde las líneas de corriente son cuasi paralelas. Se utilizan los mismos parámetros para la fuente lineal que los obtenidos en el ajuste realizado para el experimento homogéneo, es decir un ancho de fuente $Y = 3,6$ [cm], ubicada en $x = +5$ [cm]. Recordar que la solución teórica no depende de la velocidad del flujo para el número de Péclet con el cual se está trabajando ($Pe = 54$), sólo depende de la dispersividad transversal, del ancho de la fuente y la posición con respecto a la misma.

La Figura 4.15 muestra los valores obtenidos de la dispersividad transversal (α_T) para la zona de análisis, en relación al valor de la dispersividad longitudinal (α_L) de las microesferas de $d_{50} = 0,52$ [mm], que es el material que se encuentra en la región analizada. Se obtiene que en promedio, el valor efectivo de α_T ajustado es de un 37% de α_L . Recordar que en el caso homogéneo se obtuvo que α_T era, en promedio, un 13% de α_L . Por lo tanto dicho valor aumenta casi al triple por efecto de la heterogeneidad.

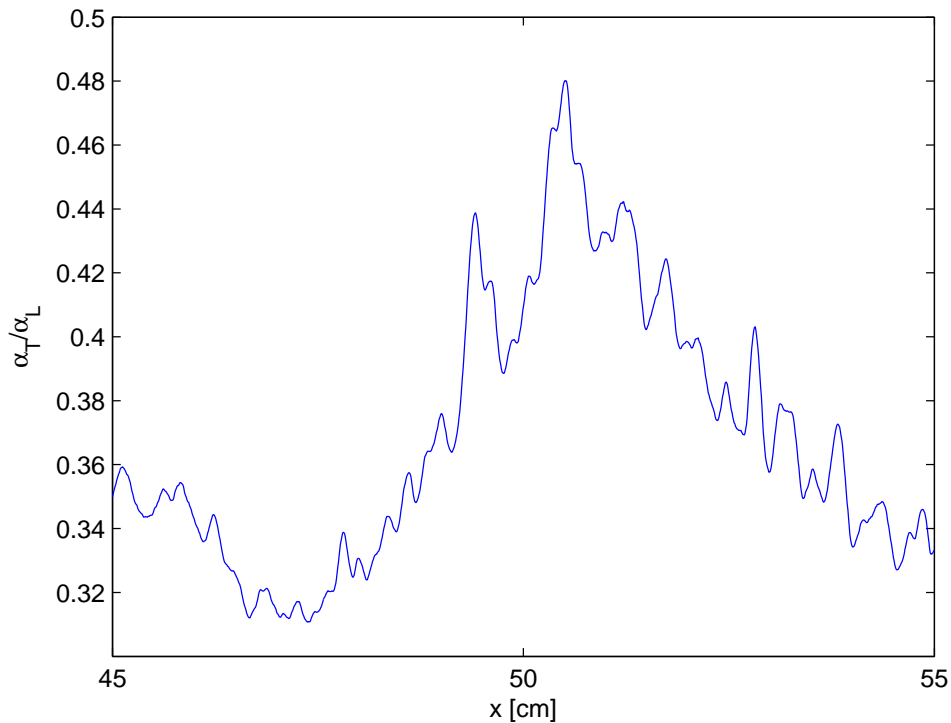


Figura 4.15: Dispersividad transversal para cada franja del dominio. Experimento heterogéneo.

A modo de poder comparar los resultados obtenidos mediante el análisis de imágenes, el modelo numérico y la solución teórica, se presentan en la Figura 4.16 los tres resultados para el perfil más alejado de la solución de borde y de la heterogeneidad, es decir para $x = 55$ [cm]. En la Figura 4.16 es posible apreciar diferencias importantes entre el modelo numérico y el ajuste “teórico”, lo cual demuestra lo importante del efecto de la contracción y expansión del flujo, debido a la presencia de la inclusión.

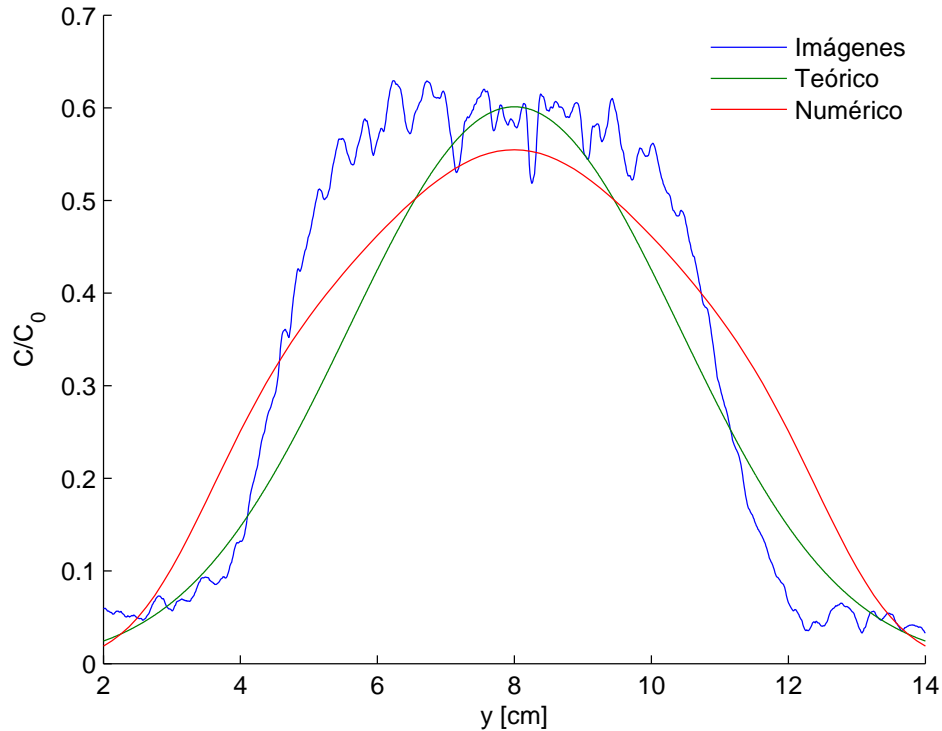


Figura 4.16: Resultados obtenidos mediante imágenes, modelo numérico y solución teórica para el experimento heterogéneo en $x = 55$ [cm].

4.3. Comparación entre experimento homogéneo y heterogéneo

4.3.1. Concentraciones obtenidas mediante análisis de imágenes

Como el fin de esta tesis es cuantificar como la heterogeneidad afecta la mezcla, se presentan los resultados del experimento homogéneo junto a los del experimento heterogéneo, de modo de ver más claramente las diferencias en los resultados de dichos experimentos. La Figura 4.17 muestra los mapas de concentraciones obtenidos en ambos experimentos mediante el análisis de imágenes.

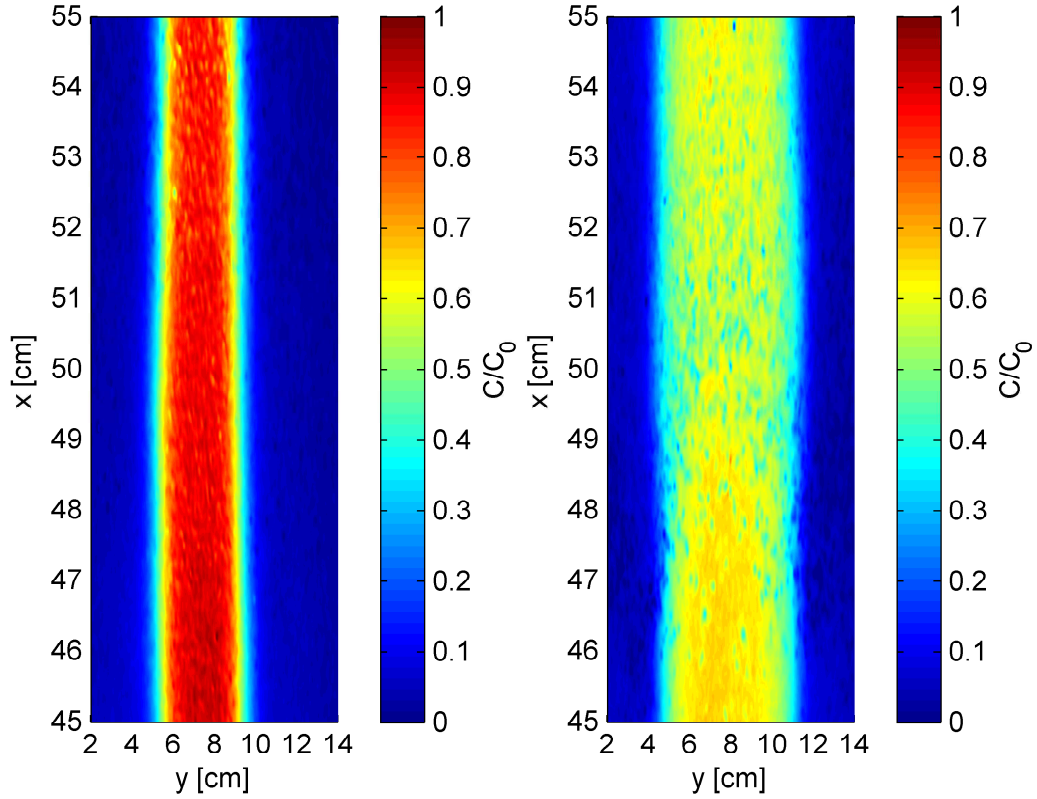


Figura 4.17: Mapas de concentraciones obtenidos mediante imágenes. A la izquierda el experimento homogéneo y a la derecha los resultados del experimento heterogéneo.

A modo de comparar para una misma sección de los experimentos, la Figura 4.18 muestra las concentraciones obtenidas para la franja transversal $x = 55$ [cm] que es la más alejada a la heterogeneidad y al final de la zona de análisis.

4.3.2. Cálculo índice de dilución relacionado al flujo

La forma cuantitativa de comparar como la heterogeneidad aumenta la dilución es mediante el índice de dilución relacionado al flujo, el cual fue definido en la ecuación 2.16. Dicha ecuación está escrita en forma continua y a continuación se realiza el desarrollo algebraico que permite su cálculo para un problema discreto, que es lo que se tiene en este caso, dado los campos de concentración discretos calculados mediante el análisis de imágenes.

En primer lugar es necesario obtener la función de densidad de probabilidad ponderada por el flujo, $p_Q(x, y, z)$, definida en la ecuación 2.17. Es importante entender que tanto esta función como el índice de dilución se calculan para una franja transversal, es decir para un x_0 fijo. Se tiene

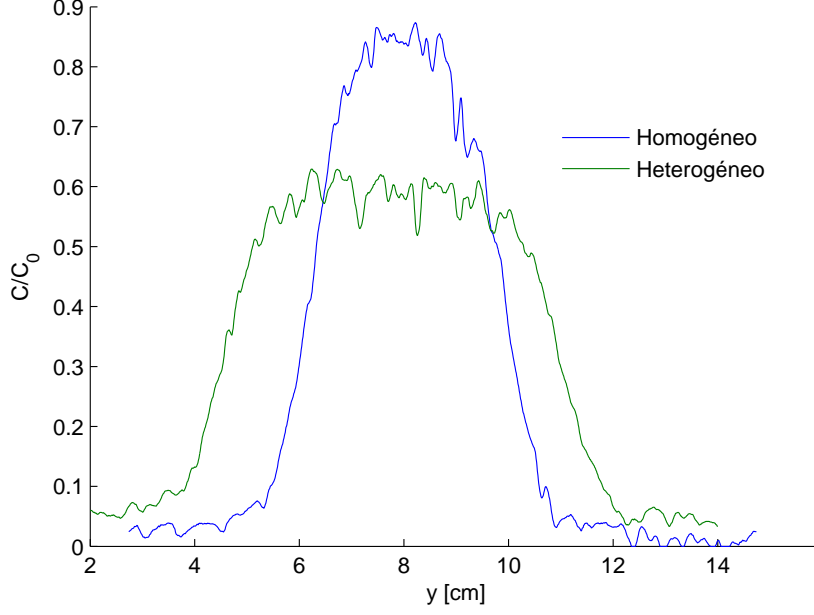


Figura 4.18: Concentraciones obtenidas mediante imágenes para $x = 55$ [cm] en ambos experimentos.

$$p_Q(x_0, y, z) = \frac{c(x_0, y, z)}{\int_{\Omega} c(x_0, y, z) q_{x_0}(x_0, y, z) dA} = \frac{c(x_0, y, z)}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c(x_0, y, z) q_{x_0}(x_0, y, z) dy dz} \quad (4.2)$$

Entendiendo que se trabaja en un problema en dos dimensiones, es decir las funciones no dependen de z y que $\int_{-\infty}^{\infty} dz = w_z = 1$ [cm] (espesor del tanque), se tiene

$$\frac{c(x_0, y, z)}{\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} c(x_0, y, z) q_{x_0}(x_0, y, z) dy dz} = \frac{c(x_0, y)}{w_z \int_{-\infty}^{\infty} c(x_0, y) q_{x_0}(x_0, y) dy} \quad (4.3)$$

La descarga específica $q_{x_0}(x_0, y)$ es una constante que equivale al flujo total inyectado dividido por el área total que atraviesa, es decir $q_{x_0}(x_0, y) = \frac{Q}{A} = \frac{Q}{w_y w_z}$, la cual es conocida. Esto es para el caso donde las líneas de corriente son paralelas, lo que ocurre para ambos experimentos en la zona de análisis. Este resultado se puede corroborar de las simulaciones numéricas (Figura 4.4 y Figura 4.13). De este modo $q_{x_0}(x_0, y) = q$ no depende de y y puede salir de la integral, así

$$\frac{c(x_0, y)}{w_z \int_{-\infty}^{\infty} c(x_0, y) q_{x_0}(x_0, y) dy} = \frac{c(x_0, y)}{w_z q \int_{-\infty}^{\infty} c(x_0, y) dy} \quad (4.4)$$

El espacio en y va desde $y_i = 2$ [cm] hasta $y_f = 14$ [cm]. Esta coordenada se encuentra espaciada en $\Delta y = 1$ pixel, por lo que se puede discretizar la última integral obteniendo

$$\frac{c(x_0, y)}{w_z q \int_{-\infty}^{\infty} c(x_0, y) dy} \cong \frac{c(x_0, y)}{w_z q \sum_{i=y_i}^{i=y_f} c(x_0, i) \Delta y} \quad (4.5)$$

Como Δy es constante puede salir de la sumatoria. Se obtiene

$$p_Q(x_0, y) = \frac{c(x_0, y)}{w_z q \Delta y \sum_{i=y_i}^{i=y_f} c(x_0, i)} \quad (4.6)$$

La expresión $\sum_{i=y_i}^{i=y_f} c(x_0, i)$ es conocida para cada x_0 pues se obtiene de sumar las concentraciones calculadas por el análisis de imágenes y sólo depende de x_0 , $\sum_{i=y_i}^{i=y_f} c(x_0, i) = C(x_0)$. En términos de la concentración promedio $\bar{C}(x_0)$, se tiene $\sum_{i=y_i}^{i=y_f} c(x_0, i) = \bar{C}(x_0) n_p$, donde n_p es igual al número de píxeles en la transversal. Finalmente se tiene que la función de densidad de probabilidad ponderada por el flujo, $p_Q(x_0, y)$ es

$$p_Q(x_0, y) = \frac{c(x_0, y)}{w_z q \Delta y \sum_{i=y_i}^{i=y_f} c(x_0, i)} = \frac{c(x_0, y)}{w_z q \Delta y \bar{C}(x_0) n_p} \quad (4.7)$$

Definida la función de probabilidad se necesita definir el índice de dilución relacionado al flujo, $E_Q(x_0)$, en forma discreta. Se tiene de la ecuación 2.16

$$E_Q(x_0) = \exp \left[- \int_{\Omega} p_Q(x_0, y, z) \ln(p_Q(x_0, y, z)) q_{x_0}(x_0, y, z) dA \right] = \quad (4.8)$$

$$\exp \left[- \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} p_Q(x_0, y, z) \ln(p_Q(x_0, y, z)) q_{x_0}(x_0, y, z) dy dz \right]$$

Dado que el problema es de dos dimensiones y que $q_{x_0}(x_0, y, z) = q$, se tiene

$$\exp \left[- \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} p_Q(x_0, y, z) \ln(p_Q(x_0, y, z)) q_{x_0}(x_0, y, z) dy dz \right]$$

$$= \exp \left[- w_z q \int_{-\infty}^{\infty} p_Q(x_0, y) \ln(p_Q(x_0, y)) dy \right] \quad (4.9)$$

$$\cong \exp \left[- w_z q \Delta y \sum_{i=y_i}^{i=y_f} p_Q(x_0, i) \ln(p_Q(x_0, i)) \right]$$

Reemplazando la definición de p_Q y simplificando se obtiene

$$\exp \left[- w_z q \Delta y \sum_{i=y_i}^{i=y_f} p_Q(x_0, i) \ln(p_Q(x_0, i)) \right]$$

$$\begin{aligned}
&= \exp \left[-w_z q \Delta y \sum_{i=y_i}^{i=y_f} \frac{c(x_0, i)}{w_z q \Delta y \bar{C}(x_0) n_p} \ln \left(\frac{c(x_0, i)}{w_z q \Delta y \bar{C}(x_0) n_p} \right) \right] \\
&= \exp \left[-\frac{1}{\bar{C}(x_0) n_p} \sum_{i=y_i}^{i=y_f} c(x_0, i) \ln \left(\frac{c(x_0, i)}{w_z q \Delta y \bar{C}(x_0) n_p} \right) \right]
\end{aligned} \tag{4.10}$$

En resumen se tiene

$$E_Q(x_0) = \exp \left[-\frac{1}{\bar{C}(x_0) n_p} \sum_{i=y_i}^{i=y_f} c(x_0, i) \ln \left(\frac{c(x_0, i)}{w_z q \Delta y \bar{C}(x_0) n_p} \right) \right] \tag{4.11}$$

De la ecuación anterior se tiene que el índice de dilución relacionado al flujo sólo depende de los campos de concentraciones, conocidos por el análisis de imágenes, de propiedades geométricas y del valor de la descarga específica. La Tabla 4.1 muestra los valores de los parámetros necesarios para el cálculo del índice de dilución para ambos experimentos.

Tabla 4.1: Parámetros para el cálculo del índice de dilución

w_z [cm]	Δx [cm]	q [cm/s]
1	1/121	0,0105

De la tabla anterior llama la atención que el valor de la descarga específica sea igual para los dos experimentos, dado que se tiene la intuición que la heterogeneidad debiese afectar ese valor. Esta intuición es correcta para la zona cercana a la heterogeneidad, pero dado que la zona de análisis se encuentra alejada de ella y que el caudal inyectado en ambos experimentos es el mismo, la descarga específica es igual para ambos experimentos. Este resultado se puede corroborar al comparar los campos de velocidades de ambos experimentos, los cuales pueden ser obtenidos de las simulaciones numéricas. Los campos de velocidad se muestran en la Figura 4.19. Es importante mencionar que se muestra la velocidad lineal v , la cual se relaciona a la descarga específica mediante la ecuación 2.3. Se obtiene para ambas simulaciones que la velocidad lineal en la zona de análisis es de 0,029 [cm/s], lo cual considerando que la porosidad es del 36 %, entrega una descarga específica de 0,105 [cm/s], resultado equivalente de dividir el caudal inyectado en cada experimento (0,168 [cm³/s]), por el área transversal del tanque (16 [cm²]).

Como se planteó en el marco teórico de esta tesis, el índice de dilución relacionado al flujo cuantifica como un flujo de masa es distribuido en un flujo de agua. En otras palabras E_Q determina cuanto flujo de agua transporta masa. Así el máximo valor del índice de dilución (E_Q^{max}) corresponde a la descarga total de agua en la sección de análisis, valor para el cual se tendría concentración constante en la transversal.

$$E_Q^{max}(x_0) = \int_0^{w_z} \int_{y_i}^{y_f} q(x_0, y, z) dy dz = w_z q \int_{y_i}^{y_f} dy = w_z q (y_f - y_i) \tag{4.12}$$

Rolle *et al.*, (2009) normalizan E_Q por E_Q^{max} , expresión que denominan “flux related reactor ratio”, M_Q o proporción del reactor relacionado al flujo, que determina cual es la proporción del flujo que es ocupada por la masa.

$$M_Q(x_0) = \frac{E_Q(x_0)}{E_Q^{max}(x_0)} \quad (4.13)$$

M_Q no puede exceder el valor de la unidad (dilución total). Los índices de dilución y la proporción del reactor, obtenidos para el caso homogéneo y heterogéneo en base al análisis de imágenes se presentan en la Tabla 4.2.

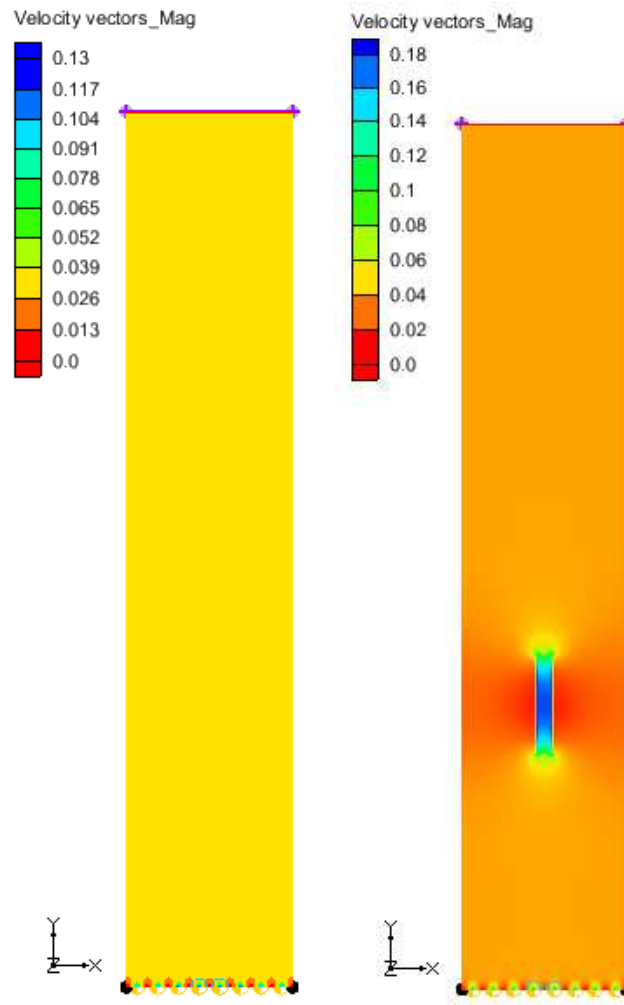


Figura 4.19: Campos de velocidad simulados en GMS para ambos experimentos.

Tabla 4.2: Índice de dilución relacionado al flujo para ambos experimentos, en franja $x = 55$ [cm], obtenidos del análisis de imágenes.

Experimento	E_Q [cm^3/s]	M_Q
Homogéneo	0,062	0,49
Heterogéneo	0,094	0,75

Se tiene que para el experimento heterogéneo el índice de dilución es 1,51 veces mayor que para el experimento homogéneo, lo cual comprueba que la heterogeneidad aumenta la dilución. De este modo se comprueba la importancia de la contracción de las líneas de corriente en la heterogeneidad, proceso que promueve el intercambio de masa entre ellas, aumentando la dilución.

Estos mismos parámetros pueden ser calculados a partir de las simulaciones numéricas. Se calculan para la misma franja de análisis, es decir para $x = 55$ [cm]. Los resultados se presentan en la Tabla 4.3:

Tabla 4.3: Índice de dilución relacionado al flujo para ambos experimentos, en franja $x = 55$ [cm], obtenidos de las simulaciones numéricas.

Experimento	E_Q [cm^3/s]	M_Q
Homogéneo	0,078	0,62
Heterogéneo	0,108	0,86

Se tiene que para el experimento heterogéneo el índice de dilución es 1,39 veces mayor que para el experimento homogéneo, según las modelaciones numéricas. Entonces, el incremento en dilución observado es similar en magnitud al modelado numéricamente.

En los Anexos de este informe se realizan simulaciones numéricas para calcular el índice de dilución para distintos largos de inclusión, de manera de extender los resultados obtenidos de los experimentos.

5. Conclusiones

En este informe se estudió el efecto de la heterogeneidad en los procesos de dispersión transversal de un trazador conservativo, desde un punto de vista experimental, teórico y numérico. A continuación se discuten los resultados obtenidos en este trabajo y se presentan las conclusiones generales del mismo.

5.1. Montaje experimental

El primer objetivo de esta tesis era lograr la construcción de un montaje experimental que permitiera emular las condiciones de flujo y transporte que se tienen en medios permeables. Si bien es cierto que este objetivo se cumplió y se definió un montaje experimental, hay diversas recomendaciones que se pueden realizar para trabajos futuros. El hecho de contar con un vertedero de carga constante a la salida, sólo permitía tomar muestras promediadas espacialmente de la concentración, las cuales no son de utilidad a la hora de caracterizar los fenómenos de dilución, pues éstos últimos requieren medidas locales de concentración, por ejemplo, para el cálculo del índice de dilución relacionado al flujo. Es por esto que se recomienda para trabajos futuros realizar un montaje experimental que utilice bombas peristálticas a la salida, pues éstas si permiten la toma de muestras locales. Además se recomienda utilizar bombas que permitan la inyección de caudales más bajos, para estudiar los efectos de la heterogeneidad en un rango más amplio de números de Péclet.

Otro punto experimental a mejorar en el futuro es la construcción de la heterogeneidad, mediante técnicas de congelamiento para su montaje. Esto se debe principalmente al tamaño del tanque. Una buena opción para trabajos futuros sería el diseño de un montaje experimental de flujo horizontal, para el cual sería necesario la inyección y extracción del flujo mediante bombas peristálticas.

5.2. Análisis de imágenes

La caracterización de los campos de concentraciones de los experimentos se logró a través de técnicas de análisis de imágenes. Un punto difícil de notar fue que la iluminación por la parte trasera del montaje experimental presentaba una alta refracción de luz, lo que llevaba a estimaciones erróneas de las concentraciones. La iluminación por la parte delantera del tanque disminuye ampliamente el efecto de refracción, pero no lo elimina, en base a los resultados mostrados en las Figuras 3.10 y 3.11. Posiblemente afecte el efecto de la sombra del papel celofán en el acrílico, por lo que se propone a futuro estudiar este fenómeno utilizando acrílico de colores y no papel celofán, ubicando una placa de acrílico de color, de dimensiones

conocidas, entre el acrílico del tanque y el medio permeable. Aun así, la iluminación por la parte delantera del tanque ha sido utilizada en otros experimentos (Castro-Alcalá *et al.*, 2012; Sánchez *et al.*, 2008) por lo que se utiliza como una técnica válida para la caracterización de los campos de concentraciones de los experimentos.

La discrepancia entre los resultados obtenidos por el método de análisis de imágenes y las modelaciones numéricas se puede explicar por diferentes factores. La pluma de trazador, tanto en el experimento homogéneo como heterogéneo, está sujeta a fluctuaciones del campo de conductividad hidráulica. Dicha propiedad se modela como una constante en los experimentos para cada tipo de suelo, lo cual no es correcto, pues a nivel local la conductividad hidráulica varía, dada la construcción experimental del medio permeable. Se propone para estudios posteriores calibrar campos de conductividad hidráulica de manera más local en base a los perfiles de concentraciones obtenidos de las imágenes. Del punto de vista experimental una mejora podría ser rellenar el tanque con microesferas de diámetro uniforme, de modo de disminuir la variabilidad de la conductividad hidráulica. Además, como se planteó en el marco teórico de este informe, la ecuación de advección dispersión ha sido cuestionada para modelar los procesos de transporte en el caso de números de Péclet altos, lo cual ocurre para los experimentos de esta tesis. Se propone a futuro el desarrollo de un modelo numérico donde el coeficiente de dispersión transversal se calcule en función del número de Péclet, como se planteó en los trabajos de Olsson & Grathwohl (2007), Delgado (2007) y Chiogna *et al.* (2009).

Desde el punto de vista de la solución analítica para un problema de inyección con fuente lineal, las imágenes tampoco debieran coincidir totalmente con dicha solución, pues los supuestos de campo unidireccional constante de velocidades y del tipo de fuente, no se cumplen totalmente en el montaje experimental. En la realización de los experimentos era posible apreciar como el flujo avanzaba más rápido por las orillas del medio, lo que tiene que ver con la interacción del fluido con la pared de acrílico. Este hecho hace complicado el estudio de los fenómenos de transporte en régimen transiente, por lo mismo se prefirió estudiar el régimen permanente de los experimentos.

Explicadas las discrepancias que se tienen entre los resultados teóricos, numéricos y experimentales, se concluye que las concentraciones obtenidas por el método de análisis de imágenes representan de manera más cercana el campo de concentraciones de los experimentos, pues el método sólo se basa en propiedades físicas del trazador y no considera todos los errores experimentales presentes como: construcción del medio, fluctuaciones de velocidad, etc. No obstante lo anterior es importante notar que el análisis de imágenes permite notar grandes diferencias entre los resultados obtenidos del experimento homogéneo y del heterogéneo (Figuras 4.17 y 4.18), lo cual era lo esperado por efecto de la heterogeneidad.

5.3. Índice de dilución relacionado al flujo

Para poder comparar cuantitativamente los resultados del experimento homogéneo y heterogéneo, se calculó el índice de dilución relacionado al flujo (Rolle *et al.*, 2009). Dicho índice

es una medida propuesta para medir dilución en situaciones de inyección continua. Se obtuvo que el índice en el caso heterogéneo es 1,51 veces mayor que en el caso homogéneo, demostrando que el efecto de la heterogeneidad es aumentar la mezcla. Si bien es cierto que las modelaciones numéricas no reproducen totalmente las condiciones experimentales, para ellas se obtuvo que el caso heterogéneo presentaba un índice de dilución 1,39 veces mayor que el homogéneo, el cual es bastante cercano al obtenido por las imágenes (8,6 % de error relativo).

En la sección de Anexos se muestran los resultados del índice de dilución calculados por simulación numérica para diversos largos de inclusión, mostrando que mientras mayor largo de inclusión hay mayor dilución. Se propone como extensión de este trabajo comprobar dicho resultado de manera experimental, incluyendo las recomendaciones que se han dado para el montaje experimental y su análisis.

En resumen, se desarrolló un montaje experimental y técnicas de medición, de bajo costo, que permitieron comprobar cómo la heterogeneidad aumenta la mezcla de un trazador conservativo, debido al aumento de la dispersión transversal. Además la instalación experimental permite medir concentraciones al interior del experimento, sin el uso de sensores que pudiesen perturbar el flujo.

Bibliografía

Acharya, R. C., Valocchi, A. J., Werth, C. J., & Willingham, T. W. (2007). Pore scale simulation of dispersion and reaction along a transverse mixing zone in two dimensional porous media. *Water Resources Research*, 43(10).

Apey, A. (2009). Contaminación de Aguas Subterráneas: Determinación del Coeficiente de Dispersión Mediante el uso de Trazadores Conservativos. Memoria para optar al título de Ingeniero Civil. Santiago, Chile. Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas.

Aris, R. (1956, April). On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube. In *Proceedings of the Royal Society of London A: mathematical, physical and engineering sciences* (Vol. 235, No. 1200, pp. 67-77). The Royal Society.

Ballarini, E., Bauer, S., Eberhardt, C., & Beyer, C. (2012). Evaluation of transverse dispersion effects in tank experiments by numerical modeling: parameter estimation, sensitivity analysis and revision of experimental design. *Journal of Contaminant Hydrology*, 134, 22-36.

Ballarini, E., Bauer, S., Eberhardt, C., & Beyer, C. (2014). Evaluation of the Role of Heterogeneities on Transverse Mixing in Bench Scale Tank Experiments by Numerical Modeling. *Groundwater*, 52(3), 368-377.

Bear, J. (1972). *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Elsevier, New York. 764 pp.

Bear, J., & Bachmat, Y. (1990). *Introduction to modeling phenomena of transport in porous media*.

Castro Alcalá, E., Fernández Garcia, D., Carrera, J., & Bolster, D. (2012). Visualization of mixing processes in a heterogeneous sand box aquifer. *Environmental Science & Technology*, 46(6), 3228-3235.

Chiogna, G., Eberhardt, C., Grathwohl, P., Cirpka, O. A., & Rolle, M. (2009). Evidence of compound-dependent hydrodynamic and mechanical transverse dispersion by multitracer laboratory experiments. *Environmental Science & Technology*, 44(2), 688-693.

Chiogna, G., Cirpka, O. A., Grathwohl, P., & Rolle, M. (2011). Transverse mixing of conservative and reactive tracers in porous media: Quantification through the concepts of flux related and critical dilution indices. *Water Resources Research*, 47(2).

Cirpka, O. A., Frind, E. O., & Helmig, R. (1999). Numerical simulation of biodegradation controlled by transverse mixing. *Journal of Contaminant Hydrology*, 40(2), 159-182.

Cirpka, O. A., & Kitanidis, P. K. (2000). Characterization of mixing and dilution in heterogeneous aquifers by means of local temporal moments. *Water Resources Research*, 36(5), 1221-1236.

Cirpka, O. A., de Barros, F. P., Chiogna, G., Rolle, M., & Nowak, W. (2011). Stochastic flux related analysis of transverse mixing in two dimensional heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 47(6).

Cleary, R. W., & Unger, M. J. (1978). Analytical models for groundwater pollution and hydrology. Water Resources Program, Department of Civil Engineering, Princeton University.

Delgado, J. M. P. Q. (2007). Longitudinal and transverse dispersion in porous media. *Chemical Engineering Research and Design*, 85(9), 1245-1252.

Domenico, P. A., & Palciauskas, V. V. (1982). Alternative boundaries in solid waste management. *Groundwater*, 20(3), 303-311.

Domenico, P. A., & Robbins, G. A. (1985). A new method of contaminant plume analysis. *Groundwater*, 23(4), 476-485.

Domenico, P. A. (1987). An analytical model for multidimensional transport of a decaying contaminant species. *Journal of Hydrology*, 91(1), 49-58.

Domenico, P. A., & Schwartz, F. W. (1998). Physical and chemical hydrogeology (Vol. 44). New York: Wiley. pp. 215-237.

Espinoza, C. (2013). Apuntes del Curso Remediación, CI6109. Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Chile.

Fick, A. (1855). On liquid diffusion. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 10(63), 30-39.

Fitts, C. R. (2002). Groundwater Science. Academic Press. pp 360-368.

Ghoreishi, S. M., Behpour, M., & Golestaneh, M. (2011). Simultaneous voltammetric determination of brilliant blue and tartrazine in real samples at the surface of a multi-walled carbon nanotube paste electrode. *Analytical Methods*, 3(12), 2842-2847.

Grathwohl, P. (1998). Diffusion in Natural Porous Media: contaminant transport, sorption/desorption and dissolution kinetics. *Kluwer Academic Publishers*, Boston, MA, USA.

Gray, W. G., & O'Neill, K. (1976). On the general equations for flow in porous media and their reduction to Darcy's law. *Water Resources Research*, 12(2), 148-154.

Han, N. W., Bhakta, J., & Carbonell, R. G. (1985). Longitudinal and lateral dispersion in packed beds: Effect of column length and particle size distribution. *AIChE Journal*, 31(2), 277-288.

- Herrera, P. (2013). Apuntes del Curso Procesos de Transporte en Sistemas Acuáticos, CI6101. Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Chile.
- Kitanidis, P. K. (1994). The concept of the dilution index. *Water Resources Research*, 30(7), 2011-2026.
- Klenk, I. D., & Grathwohl, P. (2002). Transverse vertical dispersion in groundwater and the capillary fringe. *Journal of Contaminant Hydrology*, 58(1), 111-128.
- Liedl, R., Valocchi, A. J., Dietrich, P., & Grathwohl, P. (2005). Finiteness of steady state plumes. *Water Resources Research*, 41(12).
- McDonald, M. G., & Harbaugh, A. W. (1988). A modular three-dimensional finite-difference ground-water flow model. Open File Report 83-875. U.S. Geological Survey.
- Ogata, A., & Banks, R. B. (1961). A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media: fluid movement in earth materials. US Government Printing Office.
- Olsson, A., & Grathwohl, P. (2007). Transverse dispersion of non reactive tracers in porous media: a new nonlinear relationship to predict dispersion coefficients. *Journal of Contaminant Hydrology*, 92(3), 149-161.
- Pollock, D. W. (1989). Documentation of computer programs to compute and display pathlines using results from the US Geological Survey modular three-dimensional finite-difference groundwater flow model (No. 89-381). US Geological Survey.
- Rolle, M., Eberhardt, C., Chiogna, G., Cirpka, O. A., & Grathwohl, P. (2009). Enhancement of dilution and transverse reactive mixing in porous media: Experiments and model-based interpretation. *Journal of Contaminant Hydrology*, 110(3), 130-142.
- Sánchez, I., López, L., & Capilla, J. (2008). Investigación del flujo y transporte mediante experimentación a escala intermedia. *Ingeniería del Agua*, 15(3), 147-162.
- Silliman, S. E., Zheng, L., & Conwell, P. (1998). The use of laboratory experiments for the study of conservative solute transport in heterogeneous porous media. *Hydrogeology Journal*, 6(1), 166-177.
- Simunek, J., Van Genuchten, M. T., Sejna, M., Toride, N., & Leij, F. J. (1999). The STANMOD computer software for evaluating solute transport in porous media using analytical solutions of convection dispersion equation. Versions 1.0 and 2.0. International Ground Water Modeling Center.
- Slichter, C. S. (1905). Field measurements of the rate of movement of underground waters (No. 140). Govt. Print. Off.

Tartakovsky, A. M., Tartakovsky, G. D., & Scheibe, T. D. (2009). Effects of incomplete mixing on multicomponent reactive transport. *Advances in Water Resources*, 32(11), 1674-1679.

Van Milligen, B. P., & Bons, P. D. (2012). Analytical model for tracer dispersion in porous media. *Physical Review E*, 85(1), 011306.

Werth, C. J., Cirpka, O. A., & Grathwohl, P. (2006). Enhanced mixing and reaction through flow focusing in heterogeneous porous media. *Water Resources Research*, 42(12).

Werth, C. J., Zhang, C., Brusseau, M. L., Oostrom, M., & Baumann, T. (2010). A review of non invasive imaging methods and applications in contaminant hydrogeology research. *Journal of Contaminant Hydrology*, 113(1), 1-24.

Wexler, E. J. (1992). Analytical solutions for one, two, and three dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow. US Government Printing Office.

Whitaker, S. (1986). Flow in porous media I: A theoretical derivation of Darcy's law. *Transport in Porous Media*, 1(1), 3-25.

Willingham, T. W., Werth, C. J., & Valocchi, A. J. (2008). Evaluation of the effects of porous media structure on mixing controlled reactions using pore scale modeling and micromodel experiments. *Environmental Science & Technology*, 42(9), 3185-3193.

Willingham, T., Zhang, C., Werth, C. J., Valocchi, A. J., Oostrom, M., & Wietsma, T. W. (2010). Using dispersivity values to quantify the effects of pore scale flow focusing on enhanced reaction along a transverse mixing zone. *Advances in Water Resources*, 33(4), 525-535.

Ye, Y., Chiogna, G., Cirpka, O. A., Grathwohl, P., & Rolle, M. (2015). Enhancement of plume dilution in two dimensional and three dimensional porous media by flow focusing in high permeability inclusions. *Water Resources Research*, 51(7), 5582-5602.

Zheng, C., & Wang, P. P. (1999). MT3DMS: a modular three dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; documentation and user guide. Alabama University.

Zinn, B., Meigs, L. C., Harvey, C. F., Haggerty, R., Peplinski, W. J., & von Schwerin, C. F. (2004). Experimental visualization of solute transport and mass transfer processes in two dimensional conductivity fields with connected regions of high conductivity. *Environmental Science & Technology*, 38(14), 3916-3926.

Anexos

A. Fotografías del montaje experimental

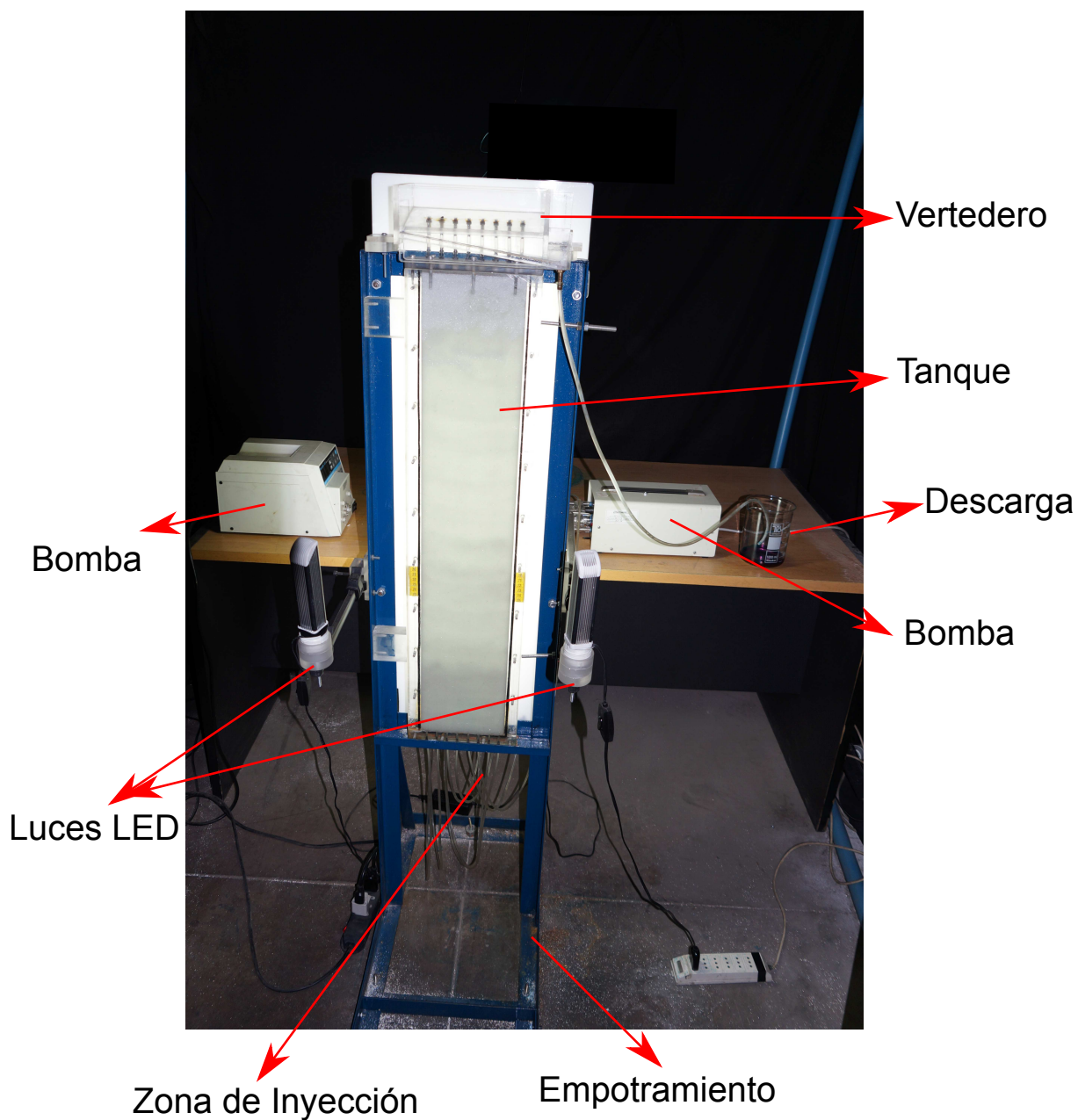


Figura A.1: Vista frontal montaje experimental.



Figura A.2: Cámara fotográfica en su estructura de soporte.

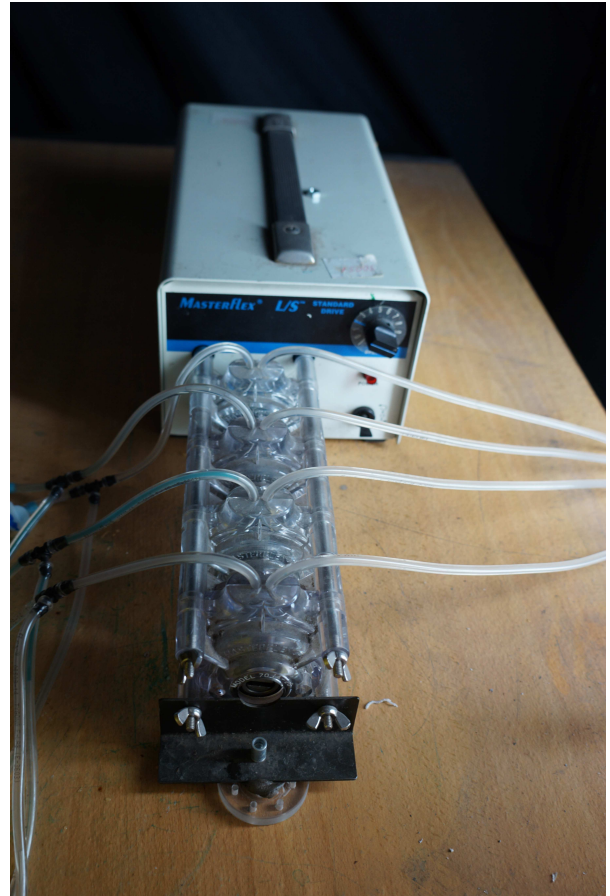


Figura A.3: Una de las dos bombas peristálticas.

B. Determinación propiedades de los medios permeables utilizados

A lo largo de esta sección se explicarán las metodologías que se utilizaron para determinar las granulometrías, conductividades hidráulicas y dispersividades de las microesferas de vidrio utilizadas.

B.1. Granulometría

Los tres tipos de microesferas de vidrio utilizadas fueron las siguientes:

- Microesferas de diámetro medio de $0,52$ [mm], granulometría extendida.
- Microesferas de diámetro uniforme de 1 [mm].
- Microesferas de diámetro uniforme de 2 [mm].

Cómo se cuenta con dos tipos de microesferas sin granulometría extendida, sólo se debió realizar la curva granulométrica del primer tipo de microesferas, la cual se muestra en la Figura B.1.

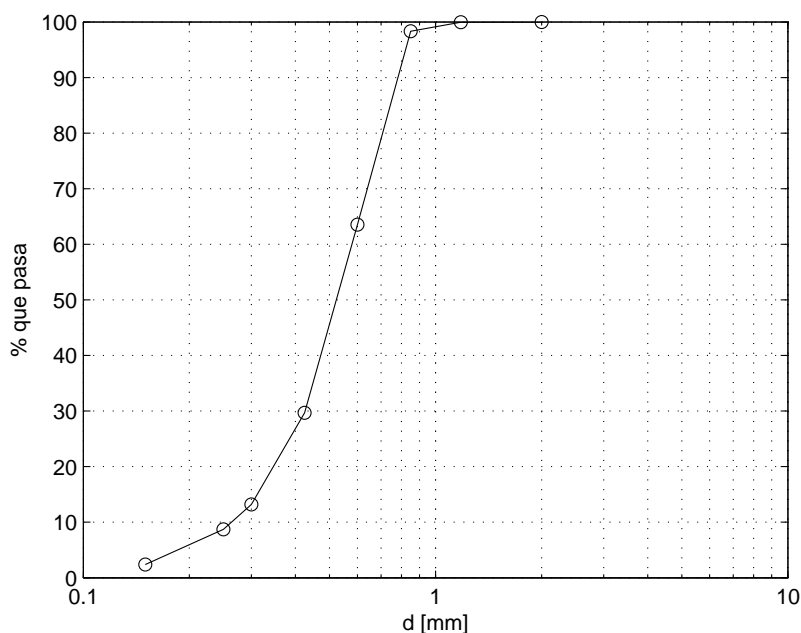


Figura B.1: Curva granulométrica microesferas de vidrio $d_{50} = 0,52$ [mm].

B.2. Conductividad hidráulica

Una propiedad importante de definir para los tres tipos de suelos es la conductividad hidráulica, pues esta propiedad define el campo de flujo que se tendrá en cada experimento. Comúnmente los ensayos de conductividad hidráulica se realizan en un permeámetro, ya sea de carga variable o carga constante. En este caso se construyó un permeámetro de carga constante, en el cual se hizo circular flujo de agua gracias a una bomba peristáltica. Se contaba con dos piezómetros conectados al permeámetro, los cuales permitían definir la diferencia de carga entre dos puntos de la columna. Un esquema del permeámetro utilizado se muestra en la Figura B.2.

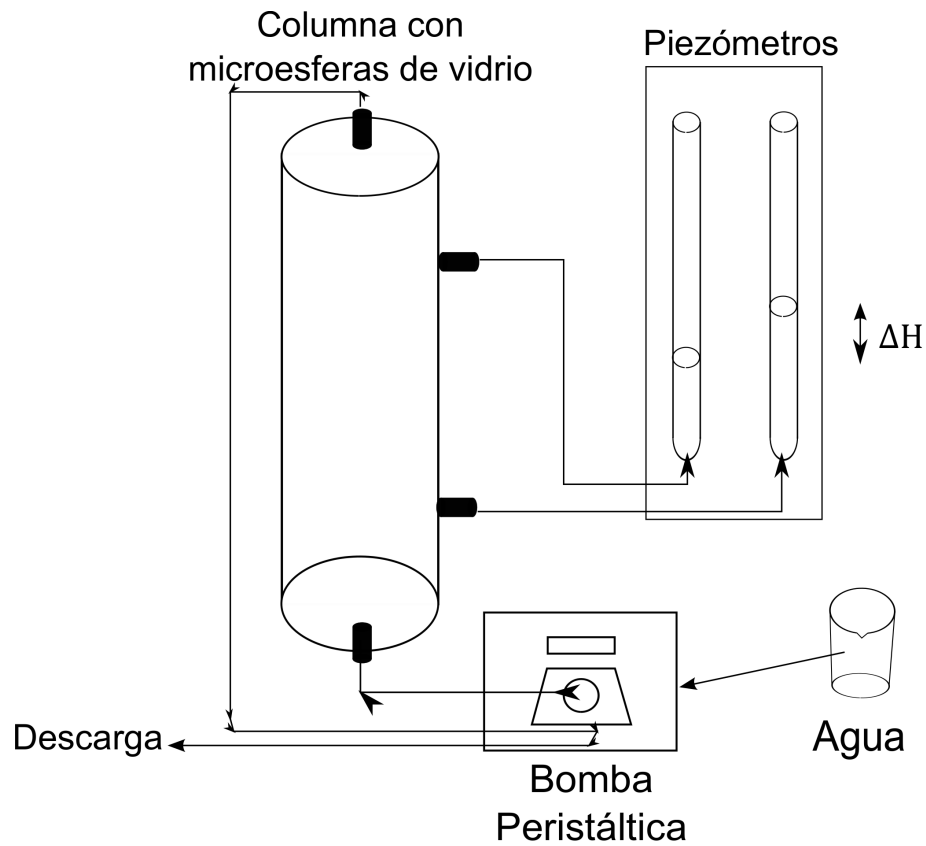


Figura B.2: Esquema permeámetro.

La conductividad hidráulica se estima gracias a la ley de Darcy (ecuación 2.1), en su forma discreta:

$$K = \frac{QL}{A\Delta H} \quad (\text{B.1})$$

donde:

K : Conductividad hidráulica [LT^{-1}].

Q : Caudal que pasa por el permeámetro [L^3T^{-1}].

L : Distancia entre los puntos donde se mide la carga hidráulica [L].

A : Área transversal al flujo [L^2].

ΔH : Diferencia de carga entre los puntos [L].

Tanto A como L son valores fijos en la ecuación B.1, pues se repiten en todos los ensayos realizados (se utiliza la misma columna). Se tiene $A = 15,76$ [cm^2], que corresponde a un diámetro de $4,48$ [cm], y $L = 22,5$ [cm].

La Tabla B.1 resume los valores de Q y ΔH reportados en cada ensayo y el consiguiente valor de K obtenido en base a la ecuación B.1

Tabla B.1: Valores de Q y ΔH medidos.

d_{50} [mm]	Q [cm^3/s]	ΔH [cm]	K [cm/s]
0,5	0,23	2,7	0,12
0,5	0,33	3,9	0,12
1	0,23	0,3	1,11
1	0,33	0,4	1,19
2	0,33	0,1	4,76

En el caso de $d_{50} = 2$ [mm] sólo se realizó un ensayo, pues al tener una conductividad hidráulica elevada se producen pequeñas pérdidas de carga, las cuales son difíciles de medir con el permeámetro utilizado. Se obtienen las siguientes conductividades hidráulicas, resumidas en la Tabla B.2:

Tabla B.2: Valores de conductividad hidráulica obtenidos.

d_{50} [mm]	K [cm/s]
0,5	0,1
1,0	1,2
2,0	4,8

B.3. Dispersividad longitudinal

Es importante determinar los coeficientes de dispersión hidrodinámica de cada suelo, los cuales aparecen en la ecuación de advección dispersión. Al estar modelando un problema en dos dimensiones, se tienen que conocer los coeficientes de dispersión hidrodinámica longitudinal y transversal, los cuales se definieron en la ecuación 2.11. Simplificando dicha ecuación se obtiene

$$D_L = \eta D_m + \alpha_L v \quad (B.2)$$

$$D_T = \eta D_m + \alpha_T v \quad (\text{B.3})$$

donde:

D_L : Coeficiente de dispersión hidrodinámica longitudinal [L^2T^{-1}].

D_T : Coeficiente de dispersión hidrodinámica transversal [L^2T^{-1}].

D_m : Coeficiente de difusión molecular en agua [L^2T^{-1}].

α_L : Dispersividad longitudinal [L].

α_T : Dispersividad transversal [L].

v : Velocidad de poros en la dirección preferencial del flujo [LT^{-1}].

η : Porosidad de la muestra de suelo.

El coeficiente de difusión molecular comúnmente se obtiene de la literatura. En el caso de esta tesis se usa como trazador el colorante alimenticio Blue Brilliant (BB), el cual es conservativo para el transporte en microesferas de vidrio (Zinn *et al.*, 2004) y tiene un coeficiente de difusión molecular $D_m = 2,8 \cdot 10^{-9}$ [m^2/s] (Ghoreishi *et al.*, 2011) en condiciones estándar.

Para determinar la dispersividad longitudinal, se realizaron ensayos de columna de flujo unidimensional, para los cuales se ajustó el valor de α_L a partir de soluciones teóricas. En el caso de la dispersividad transversal α_T , actualmente no existe consenso en la comunidad científica para su determinación. En este trabajo α_T se calibró en base a los resultados obtenidos del análisis de imágenes de las concentraciones en el montaje experimental. Para poder realizar las pruebas de columna se diseñó un montaje experimental como el que se muestra en la Figura B.3. El trazador se inyectó mediante el uso de una bomba peristáltica por la parte inferior de la columna de 28 [cm] de largo y 4,48 [cm] de diámetro. La misma bomba se conecta a la salida para asegurar que el caudal inyectado es el mismo que el que sale de la columna. Es importante tener en cuenta que la columna debe estar saturada antes de la inyección del trazador, lo cual se logra inyectando agua en la columna vacía y llenando de partículas en pequeñas capas (1 [cm]), de tal forma de que el nivel de agua esté siempre sobre la capa de material. Una vez saturada la columna, se hace pasar el trazador. Se registró el tiempo desde la inyección y la concentración a la salida de la columna. La concentración de BB se midió en un espectrofotómetro (HACH DR5000), el cual fue previamente calibrado para tener una relación de absorbancia versus concentración de BB.

Conociendo la evolución temporal de las concentraciones de BB en el efluente de la columna, es decir las breakthrough curves, se pudo analizar el valor de la dispersividad longitudinal de cada tipo de microesferas de vidrio.

Para analizar los resultados obtenidos se usó el programa STANMOD (Simunek *et al.*, 1999), desde el cual se pueden obtener el valor del coeficiente de dispersión hidrodinámica longitudinal y el valor de la velocidad de poros, insertando las curvas de concentración v/s tiempo medidas. En base a estos valores y a la ecuación B.2, se pudo calcular la dispersividad longitudinal de cada tipo de microesferas. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla B.3:

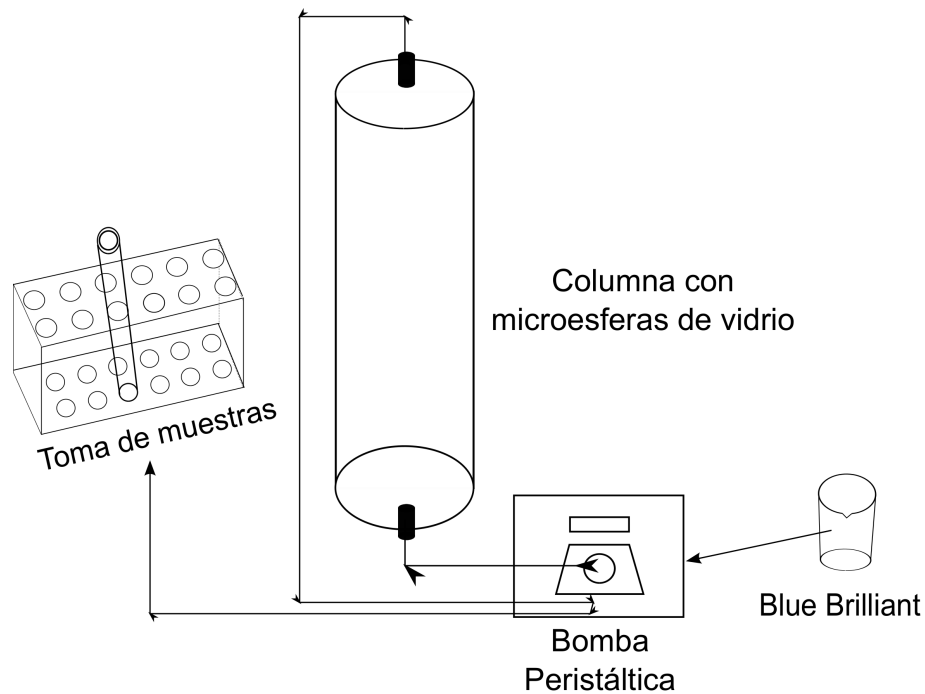


Figura B.3: Esquema montaje experimental ensayos de dispersividad.

Tabla B.3: Valores de dispersividad longitudinal obtenidos.

d_{50} [mm]	α_L [cm]
0,5	0,12
1,0	0,05
2,0	0,08

Es importante notar que para el caso $d_{50} = 0,52$ [mm] se tiene una mayor dispersividad longitudinal, a pesar que se tiene un diámetro menor. Esto podría explicarse debido a que para el diámetro medio menor se tiene una granulometría extendida, no así en los otros casos (Han *et al.*, 1985).

En las Figuras B.4, B.5 y B.6 se muestran las curvas teóricas esperadas de los experimentos de columna junto a los datos medidos, para cada tipo de microesfera. El eje x corresponde a volúmenes de poros, es decir el volumen de agua inyectada v /s el volumen de vacíos de la columna. Para un problema unidimensional de inyección continua, con condición inicial $C(x,0) = 0$ y condición de borde $C(0,t) = C_0$, de primer tipo o Dirichlet, la evolución temporal de la concentración se puede estimar a partir de la ecuación B.4 (Ogata & Banks, 1961):

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x-vt}{2\sqrt{D_L t}} \right) + \exp \left(\frac{vx}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x+vt}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right] \quad (\text{B.4})$$

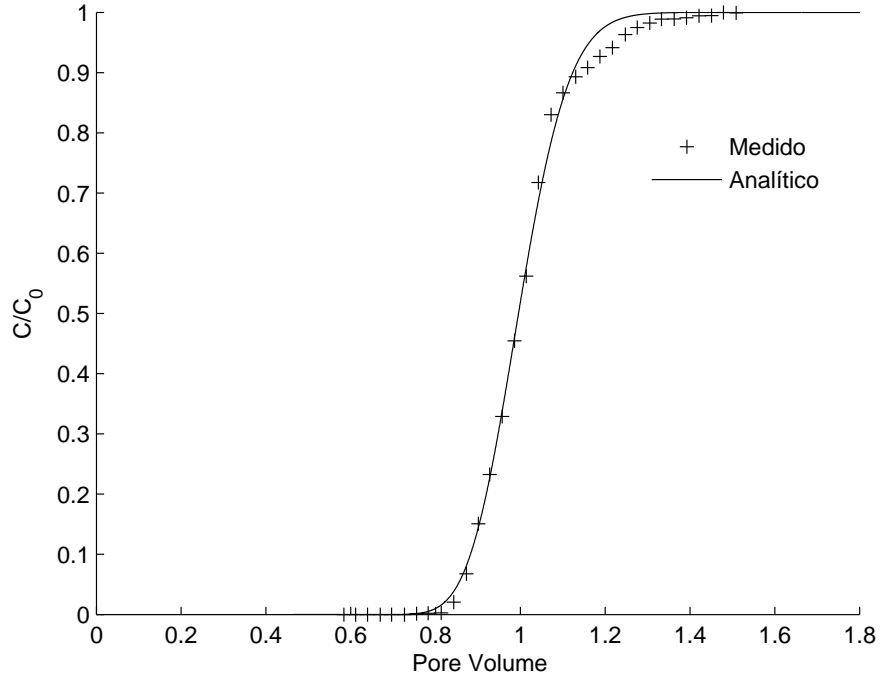


Figura B.4: Concentraciones de BB medidas junto a solución analítica, $d_{50} = 0,52$ [mm].

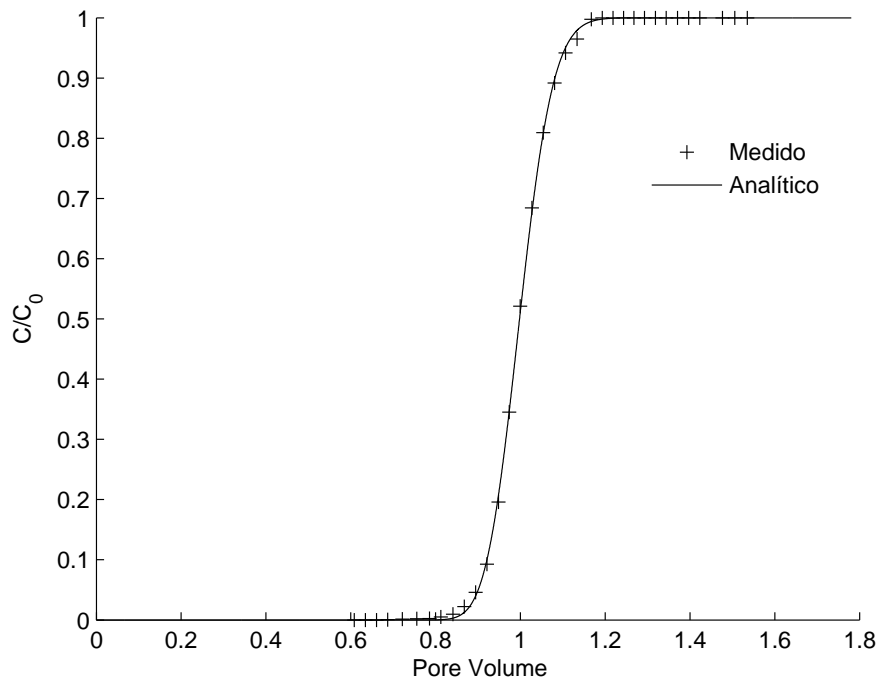


Figura B.5: Concentraciones de BB medidas junto a solución analítica, $d_{50} = 1$ [mm].

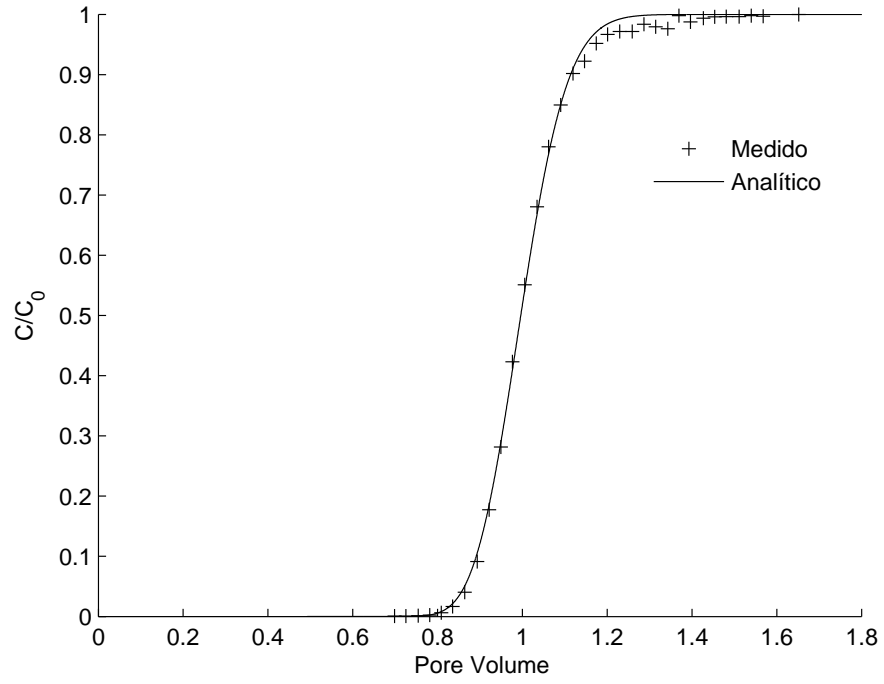


Figura B.6: Concentraciones de BB medidas junto a solución analítica, $d_{50} = 2 [mm]$.

C. Fotografías de la calibración del experimento homogéneo

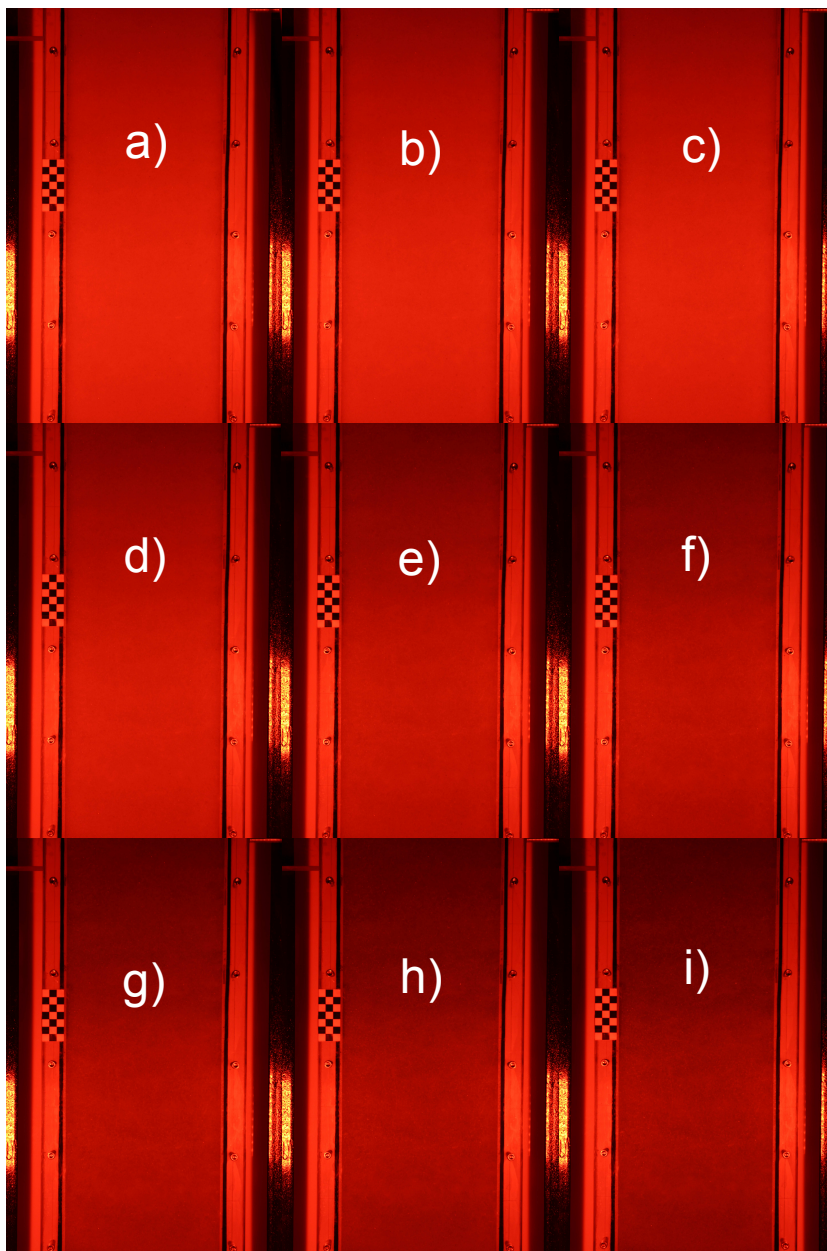


Figura C.1: Imágenes de la calibración del experimento homogéneo. En orden alfabético las concentraciones son $C = [0; 0.58; 1.00; 4.89; 9.9; 14.15; 19.02; 23.81; 28.30]$ $[mg/L]$.

D. Fotografías de la calibración del experimento heterogéneo

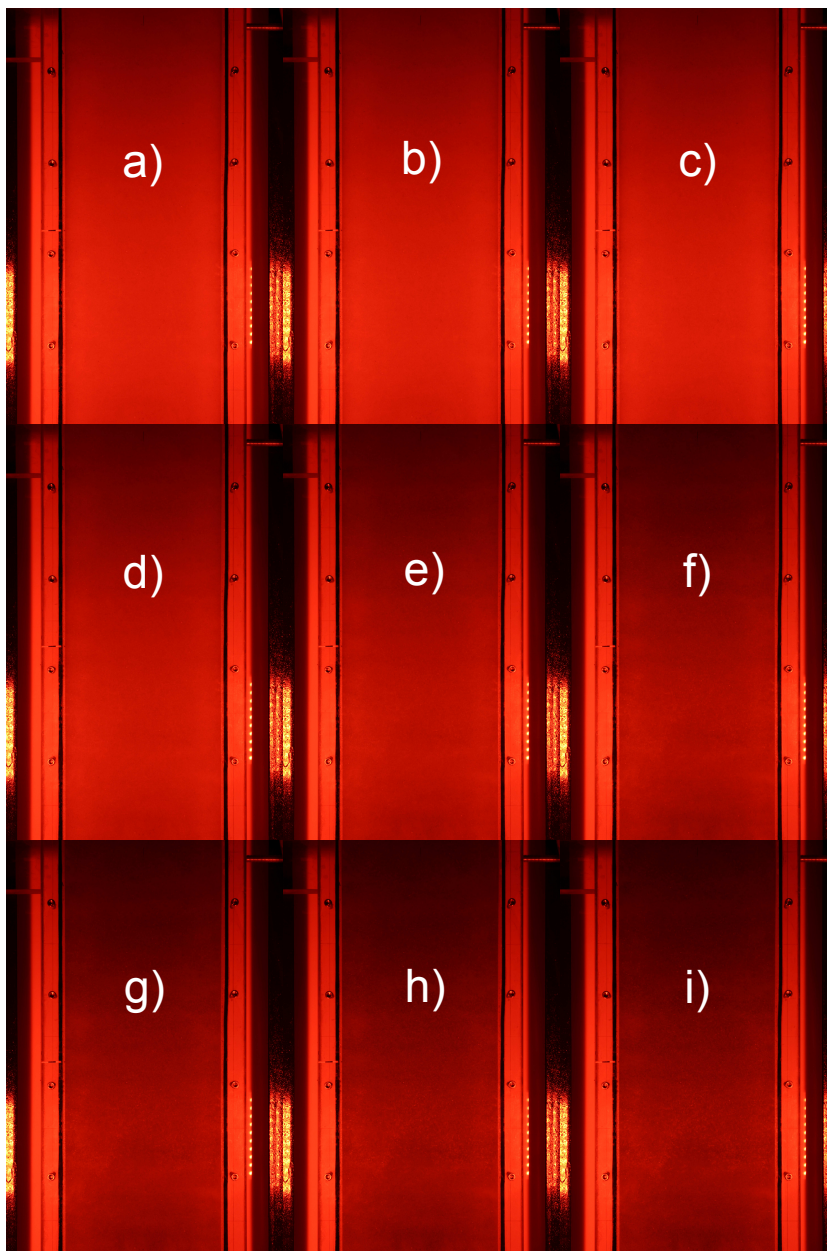


Figura D.1: Imágenes de la calibración del experimento heterogéneo. En orden alfabético las concentraciones son $C = [0; 0.59; 1.26; 5.34; 10.90; 16.98; 22.04; 25.45; 29.01]$ $[mg/L]$.

E. Cálculo del índice de dilución relacionado al flujo para distintos largos de inclusión mediante modelo numérico

Se realizaron simulaciones numéricas en GMS, cuyo objetivo es poder comparar cómo varía el índice de dilución (E_Q) dependiendo del largo de la inclusión. Para ello se realizaron 7 simulaciones, para largo de inclusión $L_i = [0; 5; 10; 15; 20; 25; 30]$ [cm]. Las inclusiones tienen un ancho fijo de 1,5 [cm], todas comienzan en la franja transversal $x = 20$ [cm] y se encuentran centradas. La configuración de las simulaciones fue la misma que la realizada para modelar los experimentos, es decir se inyectó el mismo caudal por los 8 puertos, el tamaño de la grilla fue el mismo. La matriz fina correspondió al suelo de $d_{50} = 0,52$ [mm] y las inclusiones son del suelo $d_{50} = 2$ [mm], tal cual al experimento heterogéneo. Se usaron los valores de conductividad hidráulica y de dispersividad longitudinal y transversal obtenidos a lo largo de este informe. Se analiza la sección final de la grilla, es decir $x = 85$ [cm] (máxima dilución). La Figura E.1 muestra las concentraciones obtenidas para cada caso, para la sección a la salida del tanque.

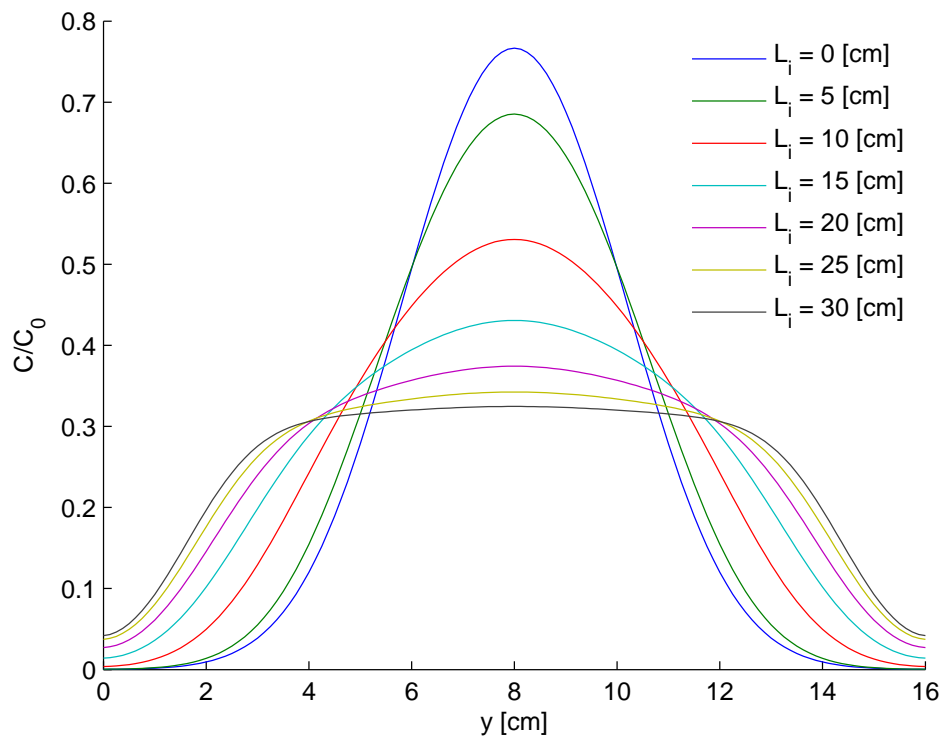


Figura E.1: Concentraciones obtenidas de las simulaciones numéricas a la salida de la grilla, para distintos largos de inclusión.

En base a las concentraciones mostradas en la Figura E.1 se procedió a calcular el índice de dilución relacionado al flujo (ecuación 4.11) y el *reactor ratio* (Ecuación 4.13) para cada simulación. Además, en la Tabla E.1 se presentan los índices de dilución normalizados por el del caso homogéneo ($L_i = 0$ [cm]), para mostrar de manera más clara cuanto aumenta la dilución por efecto de la inclusión.

Tabla E.1: Índice de dilución relacionado al flujo para distintos largos de inclusión. Se obtienen en base a las concentraciones calculadas en GMS, para la sección de salida del tanque.

L_i [cm]	E_Q [cm ³ /s]	M_Q	E_Q normalizado
0	0,089	0,53	1,00
5	0,096	0,57	1,08
10	0,118	0,70	1,32
15	0,136	0,81	1,52
20	0,146	0,87	1,64
25	0,152	0,90	1,70
30	0,155	0,92	1,74

De la tabla anterior se aprecia que para un mayor largo de inclusión se tiene mayor dilución. El efecto de la heterogeneidad es importante, pues en el caso homogéneo se tiene un 53 % de dilución, versus el 92 % que se alcanza para la inclusión más larga.

F. Discusión solución de Domenico

La solución exacta a la ecuación 2.18, dadas las condiciones de borde presentadas en 2.19 es (Cleary & Unga, 1978; Wexler, 1992):

$$c(x, y, t) = \frac{C_0 x}{4\sqrt{\pi\alpha_x v}} \exp\left(\frac{x}{2\alpha_x}\right) \int_{\tau=0}^{\tau=t} \tau^{-1,5} \exp\left[-\frac{v\tau}{4\alpha_x} - \frac{x^2}{4\alpha_x v\tau}\right] \left\{ \operatorname{erf}\left[\frac{\frac{Y}{2} - y}{2\sqrt{\alpha_y v\tau}}\right] + \operatorname{erf}\left[\frac{\frac{Y}{2} + y}{2\sqrt{\alpha_y v\tau}}\right] \right\} d\tau \quad (\text{F.1})$$

La integral de la ecuación F.1 no tiene solución analítica y debe ser resuelta numéricamente. En la ecuación F.1 aparecen los términos α_x y α_y , los cuales son la dispersividad longitudinal y transversal, respectivamente. Estos términos aparecen del hecho de despreciar la difusión molecular en el proceso de dispersión hidrodinámica, es decir para valores altos del número de Péclet.

Ante la dificultad de la evaluación directa de la ecuación F.1 se han presentado soluciones aproximadas para el problema planteado en 2.18 y 2.19 (Domenico & Robbins, 1985; Domenico, 1987). La solución de Domenico, es la siguiente:

$$c(x, y, t) = \frac{C_0}{4} \operatorname{erfc}\left[\frac{x - vt}{2\sqrt{\alpha_x vt}}\right] \left[\operatorname{erf}\left[\frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\alpha_y x}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\alpha_y x}}\right] \right] \quad (\text{F.2})$$

La solución de Domenico es válida bajo las siguientes restricciones:

$$t > \sim \frac{5\alpha_x}{v} \quad (\text{F.3})$$

$$\frac{x}{\alpha_x} > \sim 30 \quad (\text{F.4})$$

Ahora bien se debe tener en cuenta que las soluciones mostradas en (2.20) y (F.2) son para el caso de un dominio infinito. En el caso de un dominio finito se podría utilizar el método de las imágenes para caracterizar la condición de no flujo a través de las paredes del dominio. El método de las imágenes se basa en el principio de superposición, el cual permite superponer soluciones de problemas simples para resolver problemas más complejos, si la ecuación es lineal para la variable desconocida, por ejemplo $c(x, y, t)$ en (2.18).

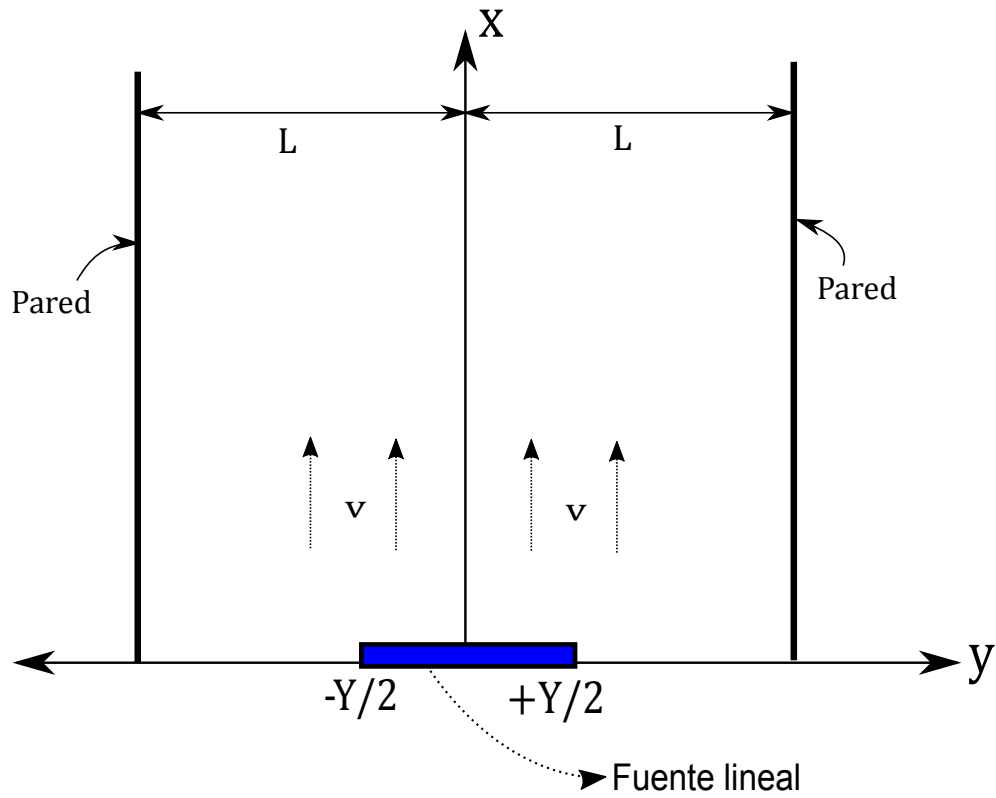


Figura F.1: Esquema problema teórico de un acuífero en dominio acotado, con campo de velocidad unidireccional.

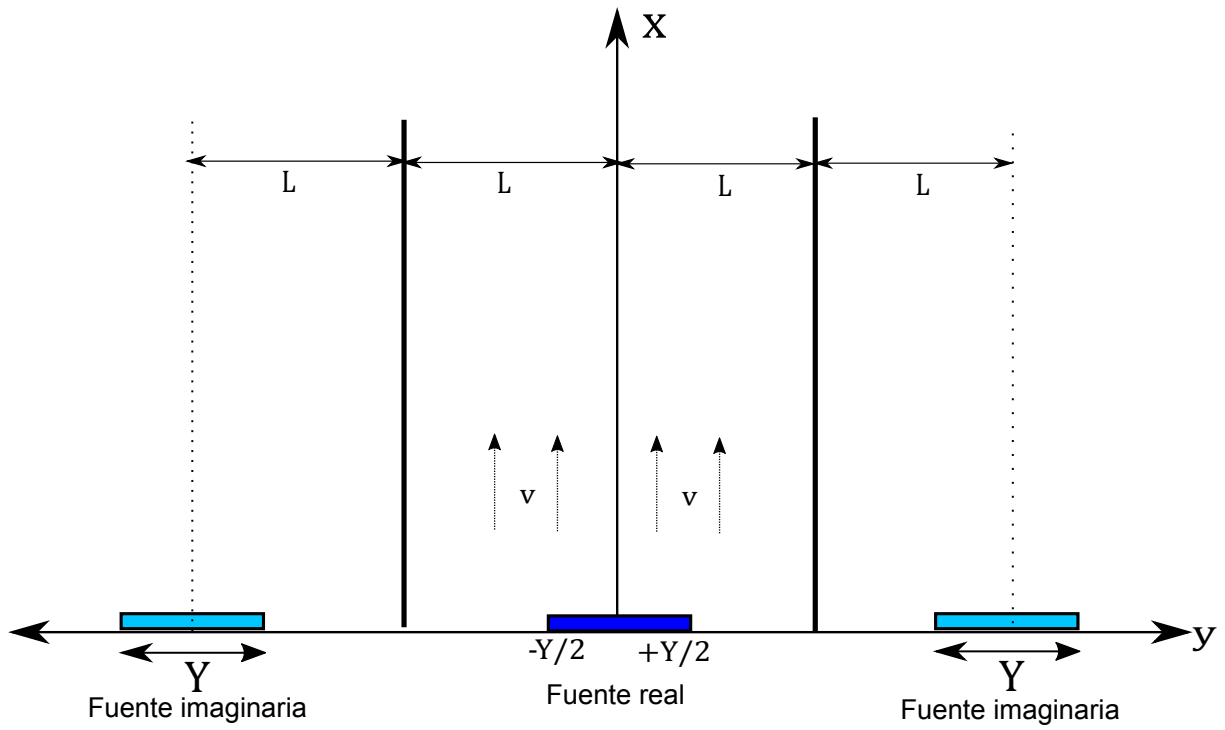


Figura F.2: Utilización del método de las imágenes.

Considérese un problema como el que se muestra en la Figura F.1. El problema es idéntico al mostrado en la Figura 2.5, con la diferencia que existen dos paredes impermeables (condición de no flujo) en las posiciones $y = -L$ y $y = L$. Dicho problema podría ser resuelto colocando dos fuentes lineales imaginarias de ancho Y , a una distancia L de cada barrera. Un esquema de dicha solución es presentado en la Figura F.2. Las fuentes lineales imaginarias lo que permiten es obtener una condición de no flujo en la posición de las paredes impermeables.

Como la solución para una fuente lineal en dominio infinito es conocida, sólo se deben sumar las imágenes ubicadas a $-2L$ y $2L$ del origen a la ecuación 2.20 para obtener la solución al problema de dominio acotado. Se obtiene:

$$C(x, y) = \frac{C_0}{2} \left[\left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{y + \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\frac{D_y x}{v}}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y - \frac{Y}{2}}{2\sqrt{\frac{D_y x}{v}}} \right] \right\} + \right. \\ \left. \frac{C_0}{2} \left[\left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{y + \frac{Y}{2} + 2L}{2\sqrt{\frac{D_y x}{v}}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y - \frac{Y}{2} + 2L}{2\sqrt{\frac{D_y x}{v}}} \right] \right\} + \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{y + \frac{Y}{2} - 2L}{2\sqrt{\frac{D_y x}{v}}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y - \frac{Y}{2} - 2L}{2\sqrt{\frac{D_y x}{v}}} \right] \right\} \right] \right] \quad (\text{F.5})$$

El efecto del utilizar las imágenes se presenta en la Figura F.3. En dicha figura se muestra la solución de Domenico para la concentración normalizada $\frac{C}{C_0}$ en un dominio infinito (curva azul) para un caso de $Y = 4$ [cm]; $\alpha_y = 0,1$ [cm]; $x = 50$ [cm]; $L = 8$ [cm] (Dominio de 16 [cm] de ancho con una fuente de 4 [cm]). Al utilizar la solución de dominio infinito en un dominio acotado se estaría perdiendo masa puesto que la condición de borde $\frac{\partial c}{\partial y} = 0$ (no flujo) se estaría alcanzando en un y fuera del dominio ($y \rightarrow \pm\infty$). Lo que hace el método de las imágenes es agregar esa masa dentro del dominio y alcanzar la condición de borde en $y = \pm L$ (curva verde).

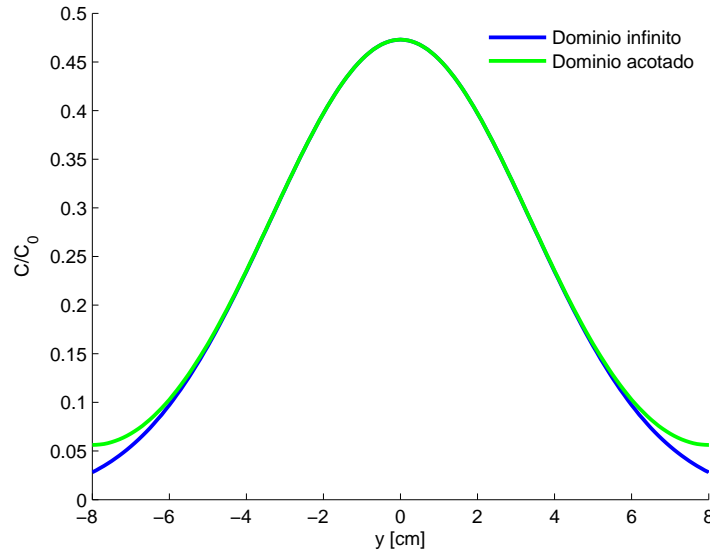


Figura F.3: Solución de Domenico en dominio infinito versus la de dominio acotado, evaluada mediante el método de las imágenes.

G. Cálculo de los momentos espaciales del experimento homogéneo

En un medio permeable, los momentos espaciales $M_{ijk}(t)$ se definen como (Aris, 1956):

$$M_{ijk}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} nC(c, y, z, t)x^i y^j z^k dx dy dz \quad (\text{G.1})$$

donde:

n : Porosidad.

x, y, z : Coordenadas espaciales [L].

$C(x, y, z, t)$: Concentración de soluto [ML^{-3}].

En el montaje experimental de este informe, se asume que la concentración se distribuye uniforme en z , en un espesor $w_z = 1$ [cm]. La zona de análisis en la coordenada y va desde $y_i = 2$ [cm] a $y_f = 14$ [cm] y en la coordenada x desde $x_i = 45$ [cm] a $x_f = 55$ [cm].

Se define el momento espacial de orden cero M_0 , para cada x , como:

$$M_0(x) = \int_0^{w_z} \int_{y_i}^{y_f} nC(x, y) dy dz \quad (\text{G.2})$$

M_0 equivale a la masa en cada franja del dominio analizado. Como el transporte de BB es conservativo, se debería tener la misma cantidad de masa en cada franja. Es importante notar que en la definición de (G.2) aparece la porosidad. Esta propiedad fue modelada como constante en el experimento, pero varía localmente. Se calibra la porosidad localmente para así tener la misma cantidad de masa en cada franja, pues $C(x, y)$ es conocida por el análisis de imágenes. Se obtiene $M_0 = 3,6 \cdot 10^{-4}$ [mg], para cada franja del dominio. Las porosidades obtenidas en cada franja se muestran en la Figura G.1. Se obtiene una porosidad promedio de 0,36, equivalente a la calculada en base al volumen de agua necesario para saturar el experimento.

La masa total inyectada M se puede conocer multiplicando el caudal de los puertos centrales, el tiempo de retención del experimento y la concentración inyectada. Todos estos son parámetros conocidos del experimento. Se obtiene que la masa inyectada en el experimento es de $M = 3,6$ [mg]. Como el largo total del experimento es de 85 [cm] y sólo se analizan 10 [cm], la masa medida por las imágenes debiera corresponder a un 10/85 de la masa total inyectada, es decir $\frac{10}{85}M = 0,42$ [mg]. Si se suman los momentos de orden cero en el área analizada, se obtiene una masa de 0,44 [mg], lo que representa un 4% de error relativo.

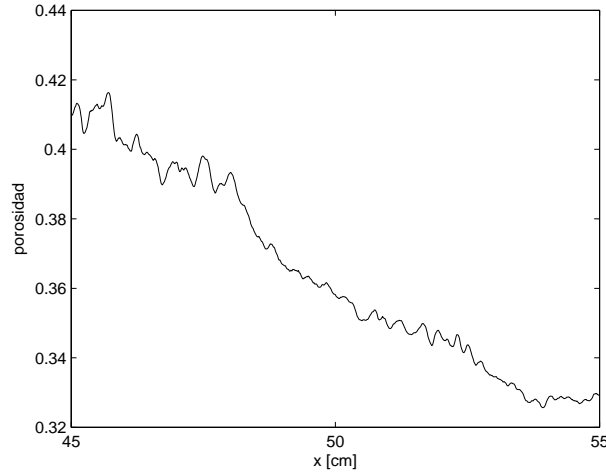


Figura G.1: Porosidad estimada para cada franja del dominio. Experimento homogéneo.

Se define el momento espacial de orden uno M_1 , para cada x , como:

$$M_1(x) = \int_0^{w_z} \int_{y_i}^{y_f} nC(x, y)ydydz \quad (\text{G.3})$$

M_1 , normalizado por M_0 , representa la posición del centro de gravedad de la pluma de soluto. La Figura G.2 muestra M_1/M_0 para cada franja del dominio analizado. Se aprecia que el centro de gravedad de la pluma oscila en torno al medio del tanque, lo que demuestra que el campo de velocidades no es del todo unidireccional.

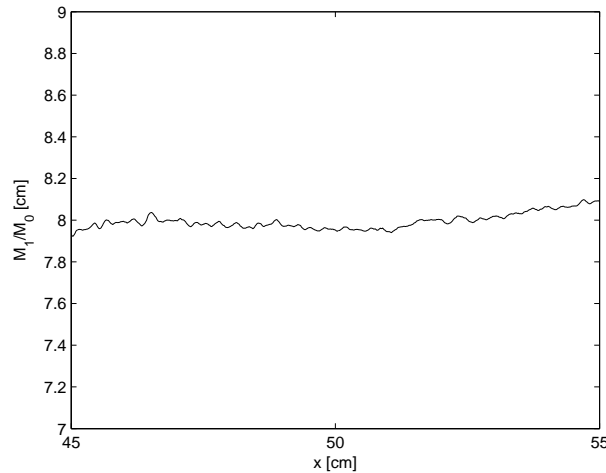


Figura G.2: Momento de orden uno normalizado. Experimento homogéneo.

Se define el momento espacial de orden dos centralizado M_{2c} , para cada x , como:

$$M_{2c}(x) = \int_0^{w_z} \int_{y_i}^{y_f} nC(x, y)(y - M_1(x))^2 dy dz \quad (\text{G.4})$$

Se tiene que el momento espacial de orden dos centralizado, normalizado por el momento de orden cero, varía linealmente en el tiempo, con constante de proporcionalidad $2D_T$, donde D_T es el coeficiente de dispersión hidrodinámica transversal.

$$\frac{dM_{2c}/M_0}{dt} = 2D_T \quad (\text{G.5})$$

Como se analizó el régimen permanente del experimento, no se puede medir la variación temporal del momento. Si se reemplaza la definición del tiempo, por la escala de tiempo donde se alcanza el régimen permanente $t = \frac{x}{q}$, con q la descarga específica, se podría tener una expresión para D_T en función de la variación espacial del segundo momento normalizado. Se prefiere usar q en vez de la velocidad efectiva v , pues la porosidad para cada franja varía. De este modo se tiene:

$$\frac{dM_{2c}/M_0}{dx} = 2\frac{D_T}{q} \quad (\text{G.6})$$

La Figura G.3 muestra la variación en el espacio de M_{2c}/M_0 .

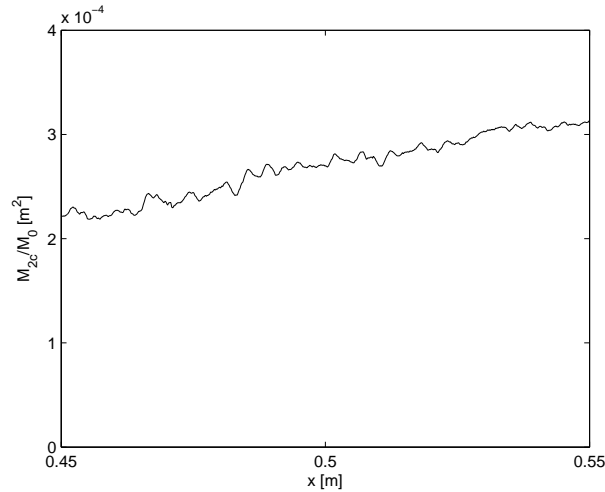


Figura G.3: Variación espacial segundo momento transversal centralizado y normalizado. Experimento homogéneo.

La expresión $\frac{dM_{2c}/M_0}{dx}$ representa la pendiente de la Figura G.3. Se obtiene, realizando un ajuste lineal $\frac{dM_{2c}/M_0}{dx} \cong 1 \cdot 10^{-3} [m]$.

Reordenando (G.6), se tiene:

$$D_T = \frac{1}{2} \frac{dM_{2c}/M_0}{dx} q \quad (\text{G.7})$$

Así se obtiene $D_T = 5,2 \cdot 10^{-8} [m^2/s]$. De los ajustes realizados en la sección Resultados de este informe, se obtuvo que la dispersividad transversal promedio es un 13% de la dispersividad longitudinal, es decir $\alpha_T = 0,15 [mm]$. Si se calcula el coeficiente de dispersión transversal, según (2.11) se obtiene $D_T = 4,7 \cdot 10^{-8} [m^2/s]$, el cual es del mismo orden que el obtenido por el método de los momentos.