



## Tarea 5 - Fenómenos de Transporte - Parte 2

Ayudante sello Ingeniería para Chile (IPCh) : Joaquín Barros  
Profesor : Felipe Huerta

La tarea consiste en dos problemas de modelación y resolución computacional de fenómenos de transporte. Cada problema se debe entregar por separado en Canvas. La fecha de entrega de la tarea es el 29 de noviembre. Sin embargo, si usted entrega el problema 1 antes del 17 de noviembre, usted obtendrá un bono de **5 décimas**.

### Problema 2

La contaminación por lixiviación consiste en la infiltración de sustancias contaminantes presentes en la superficie del suelo, alcanzando acuíferos y otras fuentes de agua subterránea. Este proceso ocurre en áreas donde existen actividades industriales, agrícolas o de disposición de residuos, que generan compuestos químicos, fertilizantes y pesticidas, entre otros contaminantes. Estos compuestos pueden movilizarse por el subsuelo mediante la percolación del agua de lluvia u otras fuentes de agua, poniendo en riesgo la calidad de estos recursos como la salud humana y ecológica.

Para este problema, estás modelando la contaminación 1-D en estado no estacionario (transiente) por lixiviación hacia un cuerpo de agua subterráneo. En este caso, el sistema está modelado por una fuente contaminante descrita por un prisma de tamaño  $S_w \times W \times L_w$ , la cual permea a través de un suelo franco hasta un acuífero, siendo  $x=D$  el punto donde comienza este último. El siguiente gráfico describe el sistema:

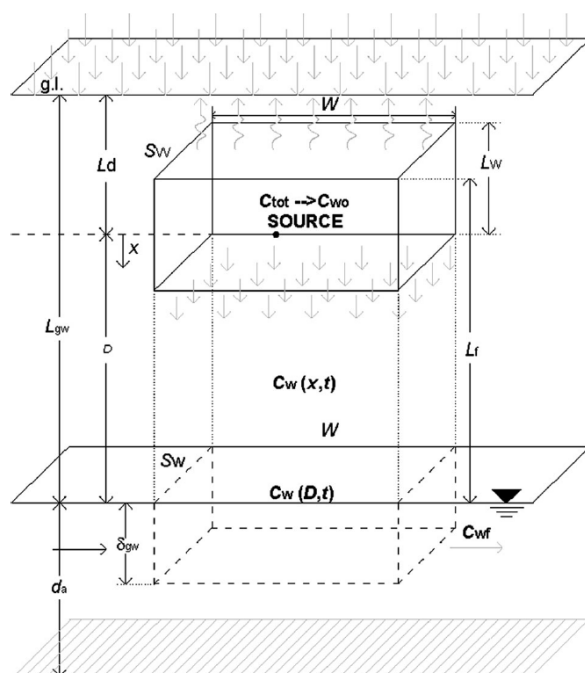


Figure 1: Imagen referencial del sistema. Fuente: Mazzieri et al., 2016

En este caso, el contaminante es un compuesto volátil que tiene una degradación de primer orden. La ecuación diferencial parcial que describe el sistema es la siguiente:

$$R \frac{\partial C_w}{\partial t} = D_h \frac{\partial^2 C_w}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_w}{\partial x} - \lambda C_w$$

Siendo  $R$  un factor de retardo que depende de la densidad del suelo y  $D_h$  la difusividad hidráulica del contaminante en el suelo. Este factor considera la difusión y dispersión axial del contaminante. La cantidad  $v$  representa la velocidad del fluido y  $\lambda$  es la tasa de reacción de primer orden. Adicionalmente, la fuente contaminante (en  $x = 0$ ) se degrada a través del tiempo mediante volatilización y lixiviación, descrito con la siguiente expresión:

$$C_w(x = 0, t) = C_0 * \exp(-\beta t)$$

Por ultimo, sabemos que el flux másico en  $x = L$  es igual a 0, que en este caso corresponde a una aproximación de flux igual a 0 en el infinito.

### Preguntas

Reporte todas sus concentración másicas (o densidades de contaminante) en  $\text{g m}^{-3}$ .

- 1) Escriba las ecuaciones para las condiciones de borde mencionadas anteriormente. **(0,5 pt)**.
- 2) Discretice la ecuación gobernante del perfil de concentración en estado transiente y sus condiciones de borde aplicando el método de diferencias finitas. Utilice diferencias finitas centrales de segundo orden para los términos difusivos y diferencias hacia atrás de primer orden para el término convectivo. Las condiciones de borde de Neumann deben discretizarse con diferencias hacia adelante o hacia atrás de segundo orden. **(1.5 pt)**.
- 3) Resuelva el problema a los valores de contorno 1-D utilizando el método FTCS en Python y Jupyter Notebook. Para ello, considere que el factor de retardo es de  $R = 1.5$ , la difusividad hidráulica es  $D_h = 0.38 \text{m}^2/\text{año}$ , la velocidad es  $v = 0.33 \text{ m/año}$  y la tasa de reacción es de  $\lambda = 0.15 \text{ año}^{-1}$ . Además, la concentración de contaminante inicial en el punto es de  $1 \text{ mg/L}$ , la tasa de degradación de la fuente de contaminación es  $\beta = 0.0768 \text{ año}^{-1}$  e inicialmente el terreno estaba libre de contaminación. Por último, utilice un  $L = 25 \text{ m}$ . Debido a que la contaminación por lixiviación es un proceso lento, su intervalo de integración será un horizonte de 30 años. La respuesta a esta pregunta debe ser el código del Jupyter Notebook que implementa el método numérico, y la concentración promedio de contaminante en el dominio después de 30 años. **(2 pt)**.

*Tip: Revise el módulo 5 del MOOC*

- 4) Grafique sus resultados para al menos 5 instantes de tiempo igualmente espaciados y explique el comportamiento del contaminante. **(0.5 pt)**.
- 5) Si ahora el contaminante se volatiliza y lixivía, pero no se degrada (por ejemplo, un metal pesado), modele la lixiviación del contaminante y encuentre a que profundidad se encuentra la máxima concentración en 20 años. Asuma que la concentración inicial del metal pesado es la misma que la concentración inicial del contaminante orgánico. **(0.5 pt)**.
- 6) Calcule el flux másico de contaminante orgánico que pasa hacia el acuífero (ubicado en  $x = 9 \text{ m}$ ) en 20 años **(0.5 pt)**.
- 7) Encuentre el año en que se transfiere la mayor cantidad de flux hacia el acuífero **(0.5 pt)**.

### References

- Mazzieri, F., Sante, M. D., Fratalocchi, E., & Pasqualini, E. (2016). Modeling contaminant leaching and transport to groundwater in tier 2 risk assessment procedures of contaminated sites. *Environmental Earth Sciences*, 75. <https://doi.org/10.1007/s12665-016-6043-1>