

**ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR
DE INGENIEROS DE MINAS**

PROYECTO FIN DE CARRERA

**DEPARTAMENTO DE INGENIERIA QUÍMICA Y
COMBUSTIBLES**

**MODELIZACION DEL DESPLAZAMIENTO DE
BTEX EN UN ACUÍFERO POR LA RUPTURA DE UN
TANQUE DE GASOLINA EN LA ZONA DE
ALICANTE**

MARIA LEON CARRERA

NOVIEMBRE 2001

AGRADECIMIENTOS

Quiero agradecer ante todo a Dios por darme la oportunidad de abrir mis horizontes y conocimientos más allá de un país y un continente, que me ha permitido conocer gente maravillosa, cultivar amistades, dar a conocer al Ecuador y por seguir dándome la oportunidad de que mi carrera profesional ascienda aún más.

En segundo lugar, expreso mi agradecimiento a la institución de la que provengo, mi alma matter, la Escuela Superior Politécnica del Litoral y a la institución que me ha acogido, la Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas de Madrid por tener este tipo de convenios y permitir que jóvenes emprendedores tengan una visión del nuevo mundo científico y de la tecnología de punta, para que podamos construir un país mejor y un futuro próspero, que influyamos en la sociedad de manera innovadora y productiva.

Agradezco a mi tutor, don Juan Llamas Borrajo que con paciencia ha sabido guiarme hacia la culminación de este proyecto tratando de mostrar de manera global lo que comprende una evaluación de contaminación con hidrocarburos empleando todos los medios pedagógicos posibles, como lo es el manejo del programa Hydrocarbon Spill Screening Model, el significado de investigar y más que nada al desenvolvimiento en mi vida profesional y personal con sus valiosos consejos.

Mis más sinceras gracias a Maria Jesús, Cristina, Eduardo, Francisco, Milton y todos aquellos que de una u otra manera ayudaron con sus conocimientos, tiempo y colaboración a la culminación de este proyecto.

Concluyo, agradeciendo a mis padres, amigos y todos aquellos que depositaron su fe en mí cuando gané la beca del Programa Antonio de Ulloa, por su apoyo incondicional, sus motivaciones y aportes.

INDICE GENERAL

INDICE DE FIGURAS	viii
INDICE DE TABLAS	x
INDICE DE FORMULAS	xi
RESUMEN	xiii
ABSTRACT	xiv
SÍNTESIS	xv

DOCUMENTO N° 1. MEMORIA

1	OBJETIVOS Y ALCANCE	2
2	DEFINICION DEL PROBLEMA	3
2.1	SUELO COMO RECEPTOR DE CONTAMINANTES.....	4
2.1.1	ZONACION DEL SUELO DE ACUERDO AL CONTENIDO DE AGUA.....	5
2.1.2	PROPIEDADES DEL SUELO DESDE EL PUNTO DE VISTA HIDROGEOLOGICO.....	8
2.1.2.1	DENSIDAD VOLUMÉTRICA.....	8
2.1.2.2	CAPACIDAD DE CAMPO.....	10
2.1.2.3	POROSIDAD.....	10
2.1.2.4	ANISOTROPIA.....	11
2.1.2.5	COEFICIENTE DE REPARTO SUELO-AGUA.....	11
2.1.3	PROCESOS REGULADORES DEL COMPORTAMIENTO DE CONTAMINANTES EN EL SUELO.....	12
2.1.3.1	PH.....	13
2.1.3.2	MATERIA ORGANICA.....	13
2.1.3.3	OXIDACION-REDUCCION.....	13
2.1.3.4	ADSORCION-DESORCION.....	14

2.2	ACUIFEROS – ENTES CONTAMINADOS.....	14
2.2.1	PROPIEDADES DEL ACUÍFERO.....	16
2.2.1.2	INFILTRACION O RECARGA.....	16
2.2.1.3	PRESION CAPILAR.....	17
2.2.1.4	GRADIENTE HIDRÁULICO.....	18
2.2.1.5	SATURACION.....	19
2.2.1.6	PERMEABILIDAD.....	21
2.2.1.7	HUMECTACION.....	24
2.2.2	PROCESOS REGULADORES DEL COMPORTAMIENTO DE CONTAMINANTES EN LOS ACUÍFEROS.....	24
2.2.2.1	ADVECCION.....	25
2.2.2.2	DIFUSION.....	26
2.2.2.3	DISPERSION.....	27
2.2.2.4	BIOTRANSFORMACION.....	29
2.3	HIDROCARBUROS Y SU COMPORTAMIENTO EN EL SUBSUELO.....	29
2.3.1	CLASIFICACION Y COMPOSICION.....	30
2.3.2	PROPIEDADES GENERALES DE LOS HIDROCARBUROS.....	31
2.3.2.1	DENSIDAD.....	31
2.3.2.2	VISCOSIDAD.....	32
2.3.2.3	TENSION SUPERFICIAL.....	33
2.3.2.4	SOLUBILIDAD EN AGUA.....	33
2.3.2.5	COEFICIENTE DE REPARTO NAPL/ AGUA.....	34
2.3.3	COMPORTAMIENTO DE LOS HIDROCARBUROS EN EL SUELO Y ACUÍFEROS.....	35
3	DESCRIPCION DEL MODELO.....	37
3.1	APLICACIÓN DEL PROGRAMA HSSM-WINDOWS.....	38
3.2	DESCRIPCION DEL AREA DE ESTUDIO.....	38
3.3	DESCRIPCION DEL PROGRAMA.....	39
3.3.1	COMPONENTES DEL MODELO.....	39
3.3.1.1	MODULO KOPT.....	39
3.3.1.2	MODULO OILENS.....	41

3.3.1.3	MODULO TSGPLUME.....	41
3.3.2	PARAMETROS DE ENTRADA.....	42
3.3.2.1	PARAMETROS GENERALES DEL M ODELO.....	42
3.3.2.2	PARAMETROS HIDROGEOLOGICOS.....	43
3.3.2.3	PARAMETROS DEL HIDROCARBURO.....	46
3.3.2.4	PARAMETROS DE SIMULACION.....	50
3.3.3	MODELO HSSM-KO, TSG-PLUME Y RESULTADOS GRAFICOS.....	53
3.3.4	REPRESENTACION GRAFICA.....	55
3.3.5	MODELIZACION DEL PROBLEMA.....	57
3.3.5.1	PARAMETROS GENERALES DEL PROBLEMA.....	57
3.3.5.2	PARAMETROS HIDROGEOLOGÍCOS DEL PROBLEMA.....	60
3.3.5.3	PARAMETROS DEK HIDROCARBURO DRL PROBLEMA.....	63
3.3.5.4	PARAMETROS DE SIMULACIÓN DEL PROBLEMA.....	67
3.3.6	RESULTADOS GRAFICOS DEL PROBLEMA.....	69
3.4	ANALISIS DE LOS RESULTADOS.....	71
4	VALORIZACION DEL RIESGO.....	74
4.1	ESQUEMA GENERAL DE LA VALORACION DE RIESGO.....	75
4.2	EVALUACIÓN DE LOS EFECTOS.....	76
4.3	ESTIMACIÓN DE LA RELACION DOSIS RESPUESTA.....	77
5	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	80
6	BIBLIOGRAFIA.....	82

DOCUMENTO N° 2 ESTUDIO ECONOMICO

1	INTRODUCCION.....	86
2	CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES.....	86
3	PRESUPUESTO.....	86
3.1	PRESUPUESTO GENERAL.....	88

DOCUMENTO N° 3 ANEXOS

ANEXO A:	RESULTADOS GRAFICOS DEL PROGRAMA.....	91
A.1	PERFIL DE SATURACION PARA EL BENCENO.....	92
A.2	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 15 DIAS.....	93
A.3	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 30 DIAS.....	94
A.4	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 45 DIAS.....	95
A.5	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 60 DIAS.....	96
A.6	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 75 DIAS.....	97
A.7	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 90 DIAS.....	98
A.8	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 105 DIAS.....	99
A.9	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 120 DIAS.....	100
A.10	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 135 DIAS.....	101
A.11	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 150 DIAS.....	102
A.12	CURVA DE COMPORAMIENTO DEL RADIO PARA EL BENCENO.....	103
A.13	FLUJO DE LA MASA DEL BENCENO.....	104
A.14	BALANCE DE MASA EN LA LENTE PARA EL BENCENO.....	105
A.15	CONCENTRACIONES EN LOS SONDEOS DE OBSERVACIÓN PARA EL BENCENO.....	106

A.16	PERFIL DE SATURACION PARA EL TOLUENO.....	107
A.17	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 15 DIAS.....	108
A.18	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 30 DIAS.....	109
A.19	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 45 DIAS.....	110
A.20	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 60 DIAS.....	111
A.21	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 75 DIAS.....	112
A.22	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 90 DIAS.....	113
A.23	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 105 DIAS.....	114
A.24	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 120 DIAS.....	115
A.25	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 135 DIAS.....	116
A.26	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 150 DIAS.....	117
A.27	CURVA DE COMPORAMIENTO DEL RADIO PARA EL TOLUENO.....	118
A.28	FLUJO DE LA MASA DEL TOLUENO.....	119
A.29	BALANCE DE MASA EN LA LENTE PARA EL TOLUENO.....	120
A.30	CONCENTRACIONES EN LOS SONDEOS DE OBSERVACIÓN PARA EL TOLUENO.....	121
A.31	PERFIL DE SATURACION PARA EL ETILBENCENO.....	122
A.32	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 15 DIAS.....	123
A.33	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 30 DIAS.....	124

A.34	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 45 DIAS.....	125
A.35	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 60 DIAS.....	126
A.36	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 75 DIAS.....	127
A.37	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 90 DIAS.....	128
A.38	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 105 DIAS.....	129
A.39	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 120 DIAS.....	130
A.40	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 135 DIAS.....	131
A.41	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 150 DIAS.....	132
A.42	CURVA DE COMPORAMIENTO DEL RADIO PARA EL ETILBENCENO.....	133
A.43	FLUJO DE LA MASA DEL ETILBENCENO.....	134
A.44	BALANCE DE MASA EN LA LENTE PARA EL ETILBENCENO.....	135
A.45	CONCENTRACIONES EN LOS SONDEOS DE OBSERVACIÓN PARA EL ETILBENCENO.....	136
A.46	PERFIL DE SATURACION PARA EL XILENO.....	137
A.47	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 15 DIAS.....	138
A.48	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 30 DIAS.....	139
A.49	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 45 DIAS.....	140
A.50	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 60 DIAS.....	141

A.51	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 75 DIAS.....	142
A.52	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 90 DIAS.....	143
A.53	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 105 DIAS.....	144
A.54	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 120 DIAS.....	145
A.55	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 135 DIAS.....	146
A.56	PERFIL DE LA LENTE DEL HIDROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 150 DIAS.....	147
A.57	CURVA DE COMPORAMIENTO DEL RADIO PARA EL XILENO.....	148
A.58	FLUJO DE LA MASA DEL XILENO.....	149
A.59	BALANCE DE MASA EN LA LENTE PARA EL XILENO.....	150
A.60	CONCENTRACIONES EN LOS SONDEOS DE OBSERVACIÓN PARA EL XILENO.....	151

INDICE DE FIGURAS

Figura 1	Formación y horizontes del suelo.....	6
Figura 2	Tipos de agua en cada zona de humedad del suelo.....	7
Figura 3	Distribución espacial de los poros en los sedimentos.....	9
Figura 4	Tipos de acuíferos.....	15
Figura 5	Recarga de acuíferos.....	17
Figura 6	Presión Capilar versus Saturación del agua.....	20
Figura 7	Estados de saturación para el agua y el hidrocarburo.....	21
Figura 8	Curvas de K_r para dos fases.....	23
Figura 9	Dispersión Longitudinal y Transversal.....	28
Figura 10	Comportamiento del LNAPL en el subsuelo al ser liberado desde un tanque.....	36
Figura 11	Fases del comportamiento del hidrocarburo relacionado al modelo del programa.....	40
Figura 12	Distribución gaussiana tomada como límite de la lente.....	41
Figura 13	Recuadro de parámetros generales.....	43
Figura 14	Recuadro de parámetros hidrogeológicos.....	46
Figura 15	Recuadro de parámetros del hidrocarburo.....	50
Figura 16	Recuadro de simulación.....	53
Figura 17	Resultados gráficos del programa HSSM-Windows.....	56
Figura 18	Parámetros generales para el benceno.....	57
Figura 19	Parámetros generales para el tolueno.....	57
Figura 20	Parámetros generales para el etilbenceno.....	58
Figura 21	Parámetros generales para el xileno.....	58
Figura 22	Parámetros hidrogeológicos para el benceno.....	61
Figura 23	Parámetros hidrogeológicos para el tolueno.....	62
Figura 24	Parámetros hidrogeológicos para el etilbenceno.....	62
Figura 25	Parámetros hidrogeológicos para el xileno.....	63
Figura 26	Parámetros del hidrocarburo para el benceno.....	65
Figura 27	Parámetros del hidrocarburo para el tolueno.....	65

Figura 28	Parámetros del hidrocarburo para el etilbenceno.....	66
Figura 29	Parámetros del hidrocarburo para el xileno.....	67
Figura 30	Parámetros de simulación del problema.....	69
Figura 31	Cronograma de actividades.....	86

INDICE DE TABLAS

Tabla 1	Densidad volumétrica relacionado con el tipo de suelo.....	9
Tabla 2	Densidad y viscosidad dinámica de principales hidrocarburos.....	32
Tabla 3	Solubilidad en agua y coeficiente de partición octanol/agua de los BTEX.....	35
Tabla 4	Archivos de salida del modulo HSSM-KO.....	54
Tabla 5	Parámetros hidrogeológicos del problema.....	60
Tabla 6	Parámetros hidrogeológicos – Propiedades del suelo.....	61
Tabla 7	Propiedades de la gasolina.....	64
Tabla 8	Propiedades del benceno.....	64
Tabla 9	Propiedades del tolueno.....	65
Tabla 10	Propiedades del etilbenceno.....	66
Tabla 11	Propiedades del xileno.....	66
Tabla 12	Datos de simulación del problema.....	67
Tabla 13	Coste de personal.....	88
Tabla 14	Coste del equipo.....	88
Tabla 15	Coste de oficina.....	88
Tabla 16	Presupuesto general.....	89

INDICE DE FORMULAS

Fórmula 1	Densidad volumétrica.....	9
Fórmula 2	Porosidad en función de la densidad volumétrica.....	9
Fórmula 3	Porosidad en función del volumen de roca.....	10
Fórmula 4	Porosidad efectiva.....	10
Fórmula 5	Coefficiente de reparto suelo-agua.....	12
Fórmula 6	Coefficiente de reparto suelo – agua en función del factor de carbono orgánico.....	12
Fórmula 7	Presión capilar.....	17
Fórmula 8	Ley de Darcy.....	18
Fórmula 9	Ley de Darcy en función de la velocidad de Darcy.....	19
Fórmula 10	Velocidad de Darcy.....	19
Fórmula 11	Ecuación de transporte advectivo.....	25
Fórmula 12	Derivada parcial de la ecuación de transporte advectivo.....	26
Fórmula 13	Primera Ley de Fick.....	26
Fórmula 14	Segunda Ley de Fick.....	27
Fórmula 15	Coefficiente de dispersión longitudinal.....	28
Fórmula 16	Coefficiente de dispersión transversal.....	28
Fórmula 17	Grados API.....	31
Fórmula 18	Coefficiente de reparto NAPL/ agua.....	34
Fórmula 19	Coefficiente de reparto NAPL / agua según Cline (1991).....	34
Fórmula 20	Coefficiente de reparto octanol/agua.....	35
Fórmula 21	Permeabilidad relativa máxima.....	44
Fórmula 22	Saturación de agua- Modelo de Brooks & Corey.....	44
Fórmula 23	Modelo de Van Genuchten.....	45
Fórmula 24	Ley de Darcy.....	45
Fórmula 25	Dispersividad longitudinal, transversal y vertical.....	46
Fórmula 26	Concentración del compuesto químico de interés.....	47

Fórmula 27	Concentración inicial del constituyente.....	48
Fórmula 28	Coeficiente de reparto suelo/ agua.....	48
Fórmula 29	Dosis diarias admisibles.....	78
Fórmula 30	Dosis diarias de exposición	79
Fórmula 31	Sumatoria de la dosis diaria de exposición.....	79
Fórmula 32	Exceso de riesgo individual.....	79

RESUMEN

En este Proyecto Fin de Carrera se ha realizado un estudio de la contaminación de un acuífero al romperse un tanque de gasolina en una zona de Alicante, usando un programa que simula el comportamiento del hidrocarburo en el subsuelo y el acuífero transcurrido un tiempo definido por el operador.

El programa utiliza los datos de las propiedades del suelo, del acuífero y del combustible que fueron obtenidos por sondeos y análisis en el laboratorio. Los resultados gráficos muestran el desplazamiento del hidrocarburo por número de días y permite determinar las concentraciones de los BTEX en el acuífero y hasta donde llega el alcance de la contaminación.

Además se presenta con una síntesis del paso siguiente en este estudio que es la valorización de riesgos que consiste en aplicar diferentes pasos que conduzcan a la toma de decisiones adecuadas para la remediación de la contaminación, estos pasos son: la evaluación de los efectos, evaluación de la exposición y caracterización de riesgos. Se concluye con un estudio económico que comprende los costes generados en la elaboración del proyecto.

ABSTRACT

In this Final Year Project a study of the contamination in an aquifer after the rupture of a gasoline tank in a zone of Alicante. I have used a program that simulates the behavior of hydrocarbon in the subsoil and in the aquifer after a period of time defined by operator has gone by.

The program use the data of the properties of the soil, of the aquifer and of the fuel that were obtained by probe and analysis in the laboratory. The graphic results show the displacement of the hydrocarbon per day and allow to determine the concentrations of the BTEX the aquifer and to what degree contamination spreads.

In addition, I am presenting a synthesis of the following step in this study which is the evaluation of risks. It consists of applying different steps leading to making proper decisions to remedy contamination. These steps are: the evaluation of the effects, evaluation of the exposition and characterization of the risks. The project concludes an economic study which includes the prices generated in the elaboration of the study.

SINTEISIS

En este Proyecto Final de Carrera se estudia el comportamiento del hidrocarburo cuando es liberado desde la superficie, su desplazamiento en el subsuelo y la disolución de sus componentes cuando alcanza el acuífero transcurrido un tiempo. Para ello se estudio la zona de Alicante donde ocurrió la ruptura de un tanque de gasolina basándose en el trabajo del Ing. Juan Ramón Garín que estudio dicha zona pero con otros fines.

Al definir el problema, se estudiaron las propiedades del suelo que condiciona el movimiento del hidrocarburo, además se tenía que conocer como fue liberado el hidrocarburo, determinar fechas, transporte y tasas de transformación de contaminantes en el suelo, se analizó el área para definir el radio de influencia del contaminante, el volumen del tanque y junto con los datos de los sondeos hechos para detectar la presencia de hidrocarburos sobre la tabla de agua fue posible obtener los datos necesarios para la simulación.

Otro elemento dentro del problema era el tipo de hidrocarburo, sus características y contenido en Benceno, Tolueno, Etilbenceno y Xileno (BTEX), a su vez un número de fenómenos y parámetros que interactúan para determinar la concentración de estos constituyentes y la capacidad de disolución en el agua en los puntos receptores.

Cuando el hidrocarburo alcanza la tabla de agua, es el momento en que la dispersión del contaminante depende de las características del acuífero y del tiempo de permanencia del combustible. Por ello es necesario conocer el comportamiento del acuífero basándonos en sus propiedades de transporte y de solubilidad para receptor los constituyentes químicos del hidrocarburo.

Para el análisis de la contaminación se realizó la simulación con un programa creado por el Laboratorio de Investigación Ambiental Rober S. Kerr perteneciente a la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (EPA). Este programa describe el

comportamiento de contaminantes líquidos no acuosos más ligeros que el agua (LNAPL's) en el subsuelo y provee información de los niveles de contaminación en el tiempo, este programa es el Hydrocarbon Spill Screening Model y separa en módulos el avance del LNAPL en la zona vadosa o no saturada, la zona saturada y el transporte de los constituyentes químicos del LNAPL una vez alcanzada la lámina de agua.

Los resultados gráficos del programa permiten hacer el análisis de la contaminación y definir su avance transcurrido un tiempo, para posterior estudios de remediación en un área establecida o para realizar un análisis de riesgos debido a la concentración de los BTEX en agua, suelo, plantas, etc.; es decir, poder definir el peligro de una sustancia de acuerdo al grado de toxicidad, niveles de exposición y gravedad de afección utilizando técnicas específicas para dicho análisis o programas informáticos que modelicen la realización de las diferentes etapas de valoración de riesgo con el fin de tomar una decisión y realizar las acciones correctoras necesarias. Finalmente se realiza con las concentraciones de los contaminantes, la valoración del riesgo cuya metodología para determinar si las condiciones del medio son peligrosas para los seres vivos, permite tomar decisiones ante el problema establecido. Además se realiza un estudio económico de la modelización que se indica en el documento tres.

**ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR
DE INGENIEROS DE MINAS**

PROYECTO FIN DE CARRERA

**DEPARTAMENTO DE INGENIERIA QUÍMICA Y
COMBUSTIBLES**

**MODELIZACION DEL DESPLAZAMIENTO DE
BTEX EN UN ACUÍFERO POR LA RUPTURA DE UN
TANQUE DE GASOLINA EN LA ZONA DE
ALICANTE**

DOCUMENTO N° 1 MEMORIA

MARIA LEON CARRERA

NOVIEMBRE 2001

1 OBJETIVOS Y ALCANCE

El objetivo de este proyecto es conocer de manera global el proceso de la contaminación de acuíferos por el deterioro de una instalación de almacenamiento de hidrocarburos, cuyas continuas fugas produjeron la alteración del medio geológico y de las aguas subterráneas.

El objetivo secundario es la evaluación del caso mediante los programas existentes en el mercado, con el fin de determinar las concentraciones de BTEX de la gasolina en el acuífero después de un tiempo específico, a partir de los resultados que ofrecen los programas de esta índole, es factible también realizar las distintas etapas de una valoración de riesgos ambientales en suelo y agua.

Los estudios realizados para medir la gravedad del daño y modelizar el comportamiento del hidrocarburo en el suelo y el acuífero se basan en los datos de sondeos y muestras de suelo y agua. Esta información tratada con el programa HSSM-Windows permite alcanzar todas las metas previstas en este proyecto y consecuentemente hacer referencia del siguiente paso, la valorización del riesgo latente por la presencia del contaminante en estos medios.

2 DEFINICIÓN DEL PROBLEMA

La mayoría de los problemas de contaminación por hidrocarburos se debe a la manera en que son almacenados, el manejo de los combustibles y la eficacia del almacén; cualquiera de estos factores que no cumplan con las condiciones normales de funcionamiento generan vertidos y fugas.

La causa fundamental de las fugas es el mal estado de los depósitos de combustibles debido a la corrosión interna o externa, le sigue los vertidos por manipulación incorrecta debido a la falta de supervisión y no-seguimiento de las normas de seguridad. En la mayoría de los casos, las fugas se deben a corrosión interna por picaduras en depósitos subterráneos y cuya falta de control y mantenimiento generan vertidos de grandes volúmenes de combustible que no son detectados hasta que afloran en pozos cercanos.

El caso a estudiar ocurre en una instalación antigua cuya actividad consistió en el almacenamiento temporal, previo a su distribución en camiones cisterna. Actualmente todos los tanques existentes han sido desmantelados. Las manchas de hidrocarburo permitieron definir el alcance del mismo y la facilidad para realizar sondeos de investigación para la toma de muestras y adquisición de datos.

La instalación fue creada hace 25 años y fue sacada del servicio y desmantelada hace 5 años, de acuerdo a un estudio realizado por la Agencia de Protección Ambiental de los Estados Unidos (EPA) en 1986 estableció que la edad media de los tanques defectuosos era de 17 años, entonces se estudiará el problema considerando tiempo de derrame a partir de 2 años y un tiempo de 6 años de distribución del hidrocarburo desde que fue desmantelada.

Mediante el programa utilizado en este proyecto, se simula el comportamiento del combustible en todo el período de liberación y la posición que tiene actualmente, además de las concentraciones de los constituyentes químicos de interés en la pluma de contaminación.

2.1 SUELO COMO RECEPTOR DE CONTAMINANTES

El suelo es el sistema dinámico superficial de la corteza terrestre más usado por el hombre para su beneficio vital, económico y social; es un recurso muy explotado que en la mayoría de los casos no recibe la protección ambiental adecuada, limitando cada vez más su capacidad de uso y aprovechamiento.

El suelo es el medio que debido a su proximidad física tiene más probabilidad de que vayan todos los residuos generados por los seres vivos, claro está, a excepción de un medio mayor como lo es el océano, en consecuencia pueden estimarse en miles los contaminantes que el suelo alberga en su seno. Las sustancias extrañas además de invadir el suelo pueden estar contaminando otros recursos de interés e incluso a muchos seres vivos, es decir que hay una relación directa con la interfase del suelo, donde la interfase del suelo y la atmósfera, las aguas subterráneas, los sedimentos y las aguas continentales resultan ser un soporte de los seres vivos acuáticos y no acuáticos.

De acuerdo al tipo de suelo, es decir a las propiedades físicas, químicas y físico - químicas del mismo tendremos un medio típico para el avance o estancamiento de contaminantes, que en nuestro caso es el petróleo o sus productos derivados y se trata de estudiar el comportamiento de dicho huésped en el suelo y como se verá afectado por sus características locales.

Múltiples métodos de recuperación se han creado para remediar el daño hecho por el hombre cuando se contamina un suelo, pero además el suelo puede ser el medio de contaminación para otro bien de mayor importancia que son los acuíferos, casi el 0.3441% del agua de la tierra es utilizable para el consumo humano, por lo que la prevención de contaminación de acuíferos o su recuperación es un punto que debe tener prioridad.

El camino para entender el suelo como receptor de contaminantes y posteriormente como transmisor a otros recursos de interés, parte del estudio de sus propiedades que influyen en la manera en que los contaminantes se desplazan, cuanto tiempo tardan en pasar de una

zona a otra dentro del suelo, entre otras posibilidades que pueden aparecer según el contaminante y dicho medio.

2.1.1 ZONACION DEL SUELO DE ACUERDO AL CONTENIDO DE AGUA

El perfil del suelo permite estudiarlo de manera bidimensional presentando diferentes zonas de acuerdo al tipo de material, sus componentes mineralógicos o químicos y, en nuestro caso, al contenido de agua presente en cada uno de los horizontes, que se extienden desde la superficie terrestre hasta el material rocoso.

Se entiende por horizonte a la capa de suelo que posee características únicas debido a los procesos formadores de suelo, cada horizonte generado se relaciona entre sí, a diferencia de los estratos que se identifican por características descriptivas y no tienen relación con otros estratos.

Entonces, el suelo esta compuesto por horizontes y estratos, el primer horizonte es el orgánico de color oscuro por su contenido en humus, formado generalmente por arenas y arcillas, es de poco espesor y bien aireado (A); el segundo horizonte esta formado por arcillas de color amarillo a pardo rojizo por la presencia de óxidos de hierro y aluminio (B) es el que recoge las sales precipitadas y los hidróxidos lavados y arrastrados por el agua desde el nivel superior; el penúltimo horizonte esta constituido por minerales de material no consolidado (C) compuesto por cantos gruesos, arena y arcilla; actúa de receptor de soluciones de las capas superiores; y por último la capa de roca continua endurecida con algunas fisuras que es la roca madre (R).

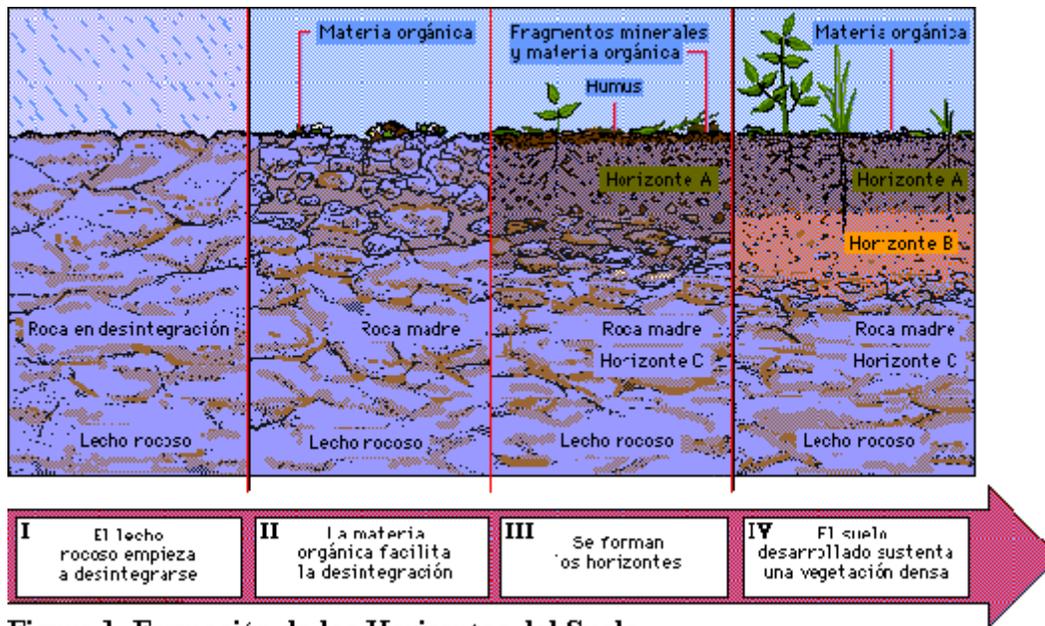


Figura 1 Formación de los Horizontes del Suelo

Sin embargo de acuerdo a la distribución de agua en el suelo, éste tiene otra clasificación y es la que interesa, el agua de lluvia y de escorrentía que llega al suelo, viaja a través de él hasta que encuentra un equilibrio transcurrido un período de tiempo, generando una serie de zonas que se diferencian por el contenido de este fluido, conocidas como zonas de humedad.

Las zonas de humedad de mayor a menor contenido de agua son:

1. **Zona de saturación.-** es aquella donde el agua llena completamente cada espacio existente en el suelo (poro) y está sometida a la presión ya que en la parte superior se encuentra la superficie freática.
2. **Zona de aireación, vadosa o no saturada.-** está arriba de la zona de saturación y la limita la superficie del suelo. Comprende una pequeña zona saturada conocida como Zona Capilar que esta saturada permanentemente, otras partes de la zona vadosa pueden estar saturadas pero con el paso del tiempo dejan de estarlo debido a las fuerzas de gravedad, así se distinguen tres subzonas que son:

- a. **Subzona capilar.**- es una franja de transición entre la zona no saturada y la saturada, la altura de esta subzona dependerá de las fuerzas capilares. En algunos casos se la considera como parte de la zona saturada y en otras como parte de la zona vadosa.
- b. **Subzona intermedia.**- es aquella que contiene agua de retención, es decir, agua retenida por atracción eléctrica debido al carácter dipolar de la molécula de agua, y contiene agua capilar, es decir que es retenida por fuerzas capilares.
- c. **Subzona sometida a evapotranspiración.**- que abarca desde la superficie del suelo hasta donde llegan las raíces de la vegetación existente en esa área, esto implica que la subzona de evapotranspiración puede ser muy delgada en áreas de poca vegetación, como muy gruesa en áreas de vegetación abundante. Generalmente tiene agua que es retenida para la alimentación de las plantas.



Figura 2 Tipos de agua en cada zona de humedad del suelo

2.1.2 PROPIEDADES DEL SUELO DESDE EL PUNTO DE VISTA HIDROGEOLÓGICO

El desarrollo en el estudio de las propiedades del suelo ha sido ampliado por la agronomía, ya que existe una intensa relación entre las plantas, el tipo de suelo en el que se desarrollan y el agua que es retenida en él. Basándonos en las características del suelo como: porosidad, capacidad de campo, densidad, entre otras que se tratarán en este apartado, se estudiará el desplazamiento del agua hacia el interior del mismo. El agua no es el único fluido existente en este sistema complejo tridimensional, cualesquier otro fluido es afectados por dichas propiedades en su desplazamiento a través de él, como por ejemplo: el hidrocarburo.

2.1.2.1 Densidad Volumétrica

La densidad volumétrica se define como la tasa que representa el grado de compactación del suelo. El numerador de dicha tasa es el peso en seco de la muestra de suelo y el denominador es su volumen.

Para la determinación de este parámetro se aplican dos métodos sencillos: el primero consiste en cavar un hoyo circular de 8 a 10 centímetros de diámetro y 20 a 30 centímetros de profundidad, obtener la muestra de suelo cuidadosamente, en un contenedor calibrado, llenar con agua hasta que se sature la muestra, no hasta que se disgregue, y determinar el volumen de agua utilizado.

El segundo método es usar una muestra de suelo-densidad, un núcleo de 5 centímetros de diámetro y 15 centímetros de largo; conociendo la longitud y diámetro de la muestra se conoce su volumen. Para obtener la muestra seca se la pone en un horno a una temperatura de 100 °C por lo menos unas 24 horas.

La densidad volumétrica influye en la estructura y textura del suelo (Ver figura 3), es decir en sus propiedades físicas que a su vez afectan la capacidad de campo, el drenaje, la porosidad, el intercambio de gases y el movimiento de fluidos, esto permite clasificarlo (Ver Tabla 1). La relación entre la densidad volumétrica y la porosidad es inversamente proporcional, como se muestra a continuación:

$$D.volumétrica = \left(\frac{Peso}{Volumen} \right) \quad (1)$$

$$Porosidad = \left(1 - \frac{D.volumétrica}{D.partícula} \right) * 100 \quad (2)$$



Figura 3 Distribución espacial de los poros en los sedimentos.

TABLA 1 DENSIDAD VOLUMÉTRICA RELACIONADA CON EL TIPO DE SUELO

Densidad Volumétrica (g/cm³)	Descripción
1.0 a 1.6	Suelos normales
1.4 a 1.6	Suelos con crecimiento de raíz restringida
1.7 a 2.2	Encontrado en sitios para la construcción
1.4 a 2.3	Bloques o ladrillos

Fuente: Manual de Edafología. Honorato Pinto Ricardo.

2.1.2.2 Capacidad de Campo

Se define a la capacidad de campo como el volumen máximo de agua que un suelo puede mantener en sus poros después de que se ha drenado la mayor cantidad. El agua es mantenida en la estructura del suelo debido a fuerzas de cohesión con otras moléculas y por adsorción a superficies coloidales.

Entonces cuando el terreno esta saturado de agua, es decir, cuando todos los poros del suelo están llenos de agua, después de un tiempo “x”, el agua se drena desde los poros grandes que permiten su paso ayudada por la fuerza de gravedad y es cuando el suelo está en una condición conocida como capacidad de campo. Una vez que las plantas no puedan absorber el agua del suelo debido a las fuerzas de adsorción se dice que el suelo a alcanzado su punto de marchites.

2.1.2.3 Porosidad

Se define como poro al espacio existente en un agregado de granos cuyo tamaño, tipo, forma y arreglo espacial son factores importantes que controlan la capacidad de almacenamiento y transmisibilidad de los materiales del subsuelo.

La porosidad es la relación entre el volumen de espacios vacíos de la roca con respecto al volumen total de la roca:

$$\eta = \frac{V_{huecos}}{V_{total}} \quad (3)$$

Sea un volumen de agua removido del medio poroso por acción de la gravedad (ω), y V el volumen total de la roca, la relación entre estos dos elementos se conoce como porosidad efectiva:

$$\eta_{efectiva} = \frac{\omega}{V} \quad (4)$$

El almacenamiento o movimiento de cualquier fluido dentro de él se verá afectado, de acuerdo a la porosidad efectiva del terreno. No existe una relación directa entre porosidad efectiva y total pero la efectiva es significativamente menor que la porosidad total.

Generalmente el volumen que ocupa ese fluido en la roca se lo denomina saturación. La saturación es igual al volumen del fluido dividido para el volumen de espacio poroso.

2.1.2.4 Anisotropía

Un medio geológico se define como anisótropo si la permeabilidad cambia en cualquier dirección, es decir que el flujo del acuífero y del producto libre ocurre en una dirección diferente de la dirección del gradiente hidráulico en cambio que para un flujo en un medio isótropo es paralelo al gradiente hidráulico.

Generalmente los sedimentos muy compactos como paquetes ajustados y foliados a menudo muestran anisotropía, donde la permeabilidad horizontal es mucho más grande que la vertical.

2.1.2.5 Coeficiente de reparto suelo-agua

La capacidad que tenga el suelo de retener o adsorber los constituyentes químicos de los hidrocarburos, afecta la movilidad de estos contaminantes en el suelo. La capacidad de que un constituyente sea adsorbido depende de las propiedades físico-químicas del constituyente y del suelo. La capacidad de sorción se define como el reparto del constituyente químico entre las fases sólida y líquida, por ello debe ser determinada con referencia al constituyente particular y su par en el suelo.

El coeficiente de reparto suelo-agua (K_d) es el cociente entre la concentración del contaminante adsorbido y la concentración disuelta en equilibrio, también es llamado coeficiente de distribución suelo/ agua y se lo usa generalmente para cuantificar la sorción

del suelo. K_d proporciona una medida específica del reparto químico entre el suelo y el agua para la fase sólida, además es dependiente de la presencia de carbono orgánico.

Se puede definir al coeficiente de reparto suelo-agua como función de la concentración del contaminante en el suelo y en el agua:

$$K_d = \frac{C_s}{C_w} \quad (5)$$

Y como función del factor del carbono orgánico y del coeficiente de partición del carbono:

$$K_d = f_{oc} \times K_{oc} \quad (6)$$

Utilizando estas definiciones el coeficiente de reparto suelo-agua permite una estimación de la concentración en un medio, dada la concentración del medio adyacente. Entonces cuando se tienen valores altos de K_d , menos móvil es un contaminante debido a que la mayor parte de los compuestos químicos permanecen estacionarios debido al alto grado de sorción, a su vez la concentración del contaminante en el suelo es elevada.

2.1.3 PROCESOS REGULADORES DEL COMPORTAMIENTO DE CONTAMINANTES EN EL SUELO

El suelo es un sistema en equilibrio aparente que al ser modificado por la presencia de fluidos contaminantes como los hidrocarburos se ve desmejorado en su calidad y puede actuar como medio de transporte de dicho fluido invasor. La contaminación del suelo y sus manifestaciones son procesos a largo plazo y que afectan todo lo que se involucre con este recurso, entre ellos: aguas subterráneas, superficiales, vegetación y seres vivos.

¿Hasta qué punto el contaminante domina la situación?, esto depende del potencial de movilidad, biodisponibilidad y permanencia en el suelo del contaminante que cambian de

acuerdo al pH del suelo, humedad, cantidad de materia orgánica, presencia de minerales de arcilla y potencial REDOX, entre otros que se tratarán a continuación.

2.1.3.1 PH

La reacción del suelo esta definida por el grado de acidez o basicidad del mismo, es decir por su potencial de hidrógeno que es el logaritmo negativo de base 10 de la concentración del ión hidrógeno. El pH afecta los procesos de formación y desarrollo de suelos, descomposición de la materia orgánica, disponibilidad y absorción de nutrientes, así como la capacidad de intercambio iónico y catiónico.

La capacidad del suelo de resistir a cambiar su pH es el Poder Tampón o Buffer y está relacionada con la cantidad de coloides orgánicos e inorgánicos que posea el suelo, se determina como la inversa de la pendiente de la curva de valoración en puntos próximos al pH del suelo.

2.1.3.2 Materia Orgánica

Dentro de los componentes del suelo está la parte orgánica, la materia orgánica esta presente en diferentes grados de descomposición y proporción. La presencia de ésta en forma de humus (ácidos húmicos, fúlvicos, huminas, etc.) afecta el estado de agregación, capacidad de retención de agua, color, acidez y la capacidad de intercambio iónico.

2.1.3.3 Oxidación – Reducción

Las condiciones de oxidación – reducción del suelo influyen en los procesos biológicos, de meteorización y de formación. Estas condiciones se basan en el equilibrio de los electrones libres cuya actividad depende de los agentes oxidantes y reductores existentes. Las condiciones REDOX se modifican por la actividad de los microorganismos y de la fauna existente en el suelo, cuyo consumo de oxígeno puede modificar la forma química en la que se encuentran algunos elementos, principalmente el Fe, Mn, Mo, Cu, etc. Los valores de

pH y potencial REDOX (Eh) delimitan los campos de estabilidad de las especies químicas presentes en el suelo.

2.1.3.4 Adsorción – Desorción

La adsorción ocurre cuando los contaminantes, en nuestro caso los hidrocarburos, se adhieren a los gránulos del suelo debido a las fuerzas físico-químicas como: enlaces iónicos y covalentes, fuerzas de Van der Waals, energía de orientación dipolo – dipolo, puentes de hidrógeno, efecto hidrofóbico e intercambio de ligandos. Representa la acumulación de contaminantes en la interfase sólida acuosa, la cantidad de masa absorbida en el suelo es una función del contaminante y del suelo.

Una sustancia absorbida en el subsuelo a bajas temperaturas permanecerá en ese estado posiblemente, hasta que la temperatura del subsuelo se incremente, llegará un punto en que la energía térmica de esta sustancia absorbida sea tal que se produzca: bien su descomposición química, o que reaccione con el subsuelo y forme un nuevo compuesto en él o bien que la especie permita la desorción y se desprenda de la superficie de los gránulos del suelo.

En la mayoría de los casos, las sustancias que son desorbidas conservan sus propiedades o características. Cuando los contaminantes entran en el suelo es posible que estos se adhieran a los gránulos de suelo y que después de un cierto tiempo bajo unas determinadas condiciones se produzca la desorción de los contaminantes y las partículas inicialmente adsorbidas se disuelven en el agua.

2.2 ACUIFEROS – ENTES CONTAMINADOS

El agua subterránea es un recurso importante de manera mundial, tal es así que el 68% del total de estas aguas se destina para riego y es el hombre quien interviene en este recurso a través de la explotación de las aguas subterráneas pero además aporta a la contaminación del mismo. Una vez que el contaminante se incorpora a dicho medio, es más difícil de

eliminar, en la mayoría de los casos, la contaminación de las aguas subterráneas constituyen un proceso irreversible.

Los acuíferos se los define como formaciones geológicas que se encuentren saturadas de agua que puede fluir en dicho estrato con normalidad. Capas no permeables como las arcillas que no permiten el movimiento del agua en el subsuelo se denominan acuicludos y para capas menos permeables cuyo transporte es muy lento acuitardos. Generalmente estos dos últimos tipos de acuíferos son clasificados como acuíferos confinados, mientras que los acuíferos libres y los acuíferos artesianos (cuando el nivel freático alcanza la superficie) se agrupan bajo el nombre de acuíferos no confinados.

La contaminación del suelo con características que lo hacen permeable, permite el paso de fluidos como los hidrocarburos que son arrastrados con el agua de lluvia a zonas impermeables donde se encuentran los acuíferos. La forma más común de contaminación de acuíferos es cuando ocurre filtración a través del suelo de sustancias provenientes de drenajes sanitarios, zonas de confinamiento de residuos que son lixiviados por el agua de lluvia o como en nuestro caso de ruptura de tanques de combustible. Este tipo de contaminación es generalmente ocasionada por la mala construcción de confinamientos de residuos, o deficiencias en los tanques por el incorrecto mantenimiento, deficiencias en los sistemas de control de contaminación, entre otros.

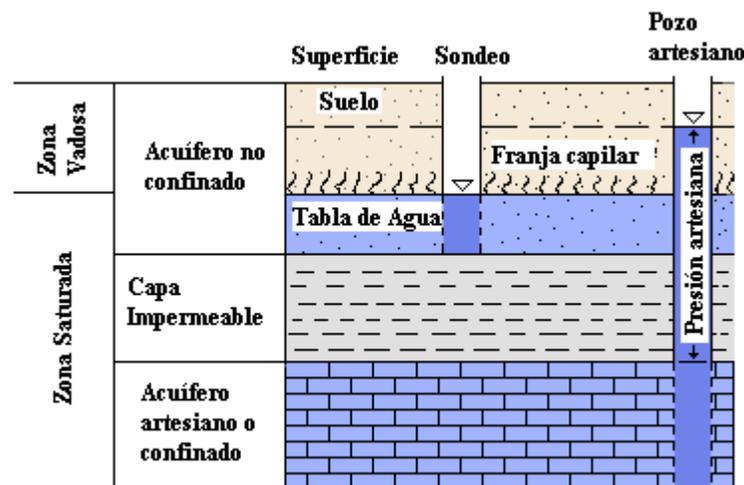


Figura 4 Tipos de Acuíferos

2.2.1 PROPIEDADES DEL ACUÍFERO

El conocimiento de las características del acuífero dentro del ciclo hidrogeológico en la zona de estudio revela la incidencia que tiene sobre cualquier otro fluido que interactúe con él, motivo por el cual se definirán parámetros hidrogeológicos con el fin de mostrar la importancia de las propiedades y leyes que rigen el flujo del agua subterránea y los procesos que dan a lugar a la interacción entre el contaminante y el acuífero.

En general, las definiciones mostradas en este capítulo permitirán comprender la manera en que se comporta el acuífero y los requisitos que son necesarios para la ejecución del programa. Muchos de los fenómenos de movimiento de masas que es el caso a estudiar, se ven afectadas por las leyes que rigen los flujos de fluidos, como el agua. Los hidrocarburos en su mayoría tienden a moverse en la misma dirección que lo hace el acuífero de acuerdo a su gradiente hidráulico, en el caso de que el medio sea isótropo.

2.2.1.2 Infiltración o Recarga

La recarga o infiltración es el proceso por el cual los acuíferos son alimentados y forma parte del ciclo hidrológico. Una vez que parte del agua de lluvia ha sido repartida en la escorrentía y la evapotranspiración, el resto pasa a ser infiltración; claro está que parte del agua de escorrentía tanto la superficial como la subsuperficial pueden contribuir a este proceso. Este aporte del agua de escorrentía ocurre en áreas áridas, mientras que en zonas lacustres, de deltas o ríos, el aporte tendrá lugar solamente si las capas del subsuelo son permeables y si el nivel freático del acuífero está muy bajo con respecto al nivel del agua de estos cuerpos de agua en superficie.

Los factores que afectan la tasa de infiltración son muchos, van desde las propiedades del suelo, intensidad de lluvia, topografía de la zona, vegetación hasta la presencia de capas impermeables y acuíferos. La recarga puede afectar de muchas formas la contaminación del acuífero, como por ejemplo: disolviendo a su paso por las capas del suelo, los

constituyentes químicos de los hidrocarburos liberados o empujando el contaminante hacia abajo hasta que alcance la tabla de agua con mayor rapidez de lo esperado.



Figura 5 Recarga de Acuíferos

2.2.1.3 Presión Capilar

Otro de los factores que afectan el movimiento del contaminante es la presión capilar entre dos fases, como el hidrocarburo y el agua. La presión capilar se define como la diferencia de presión entre dos fases que ocupan el mismo espacio del poro, es decir, el límite entre las dos fases inmiscibles es una superficie curva afectada por la tensión interfacial. Si se mide la presión de cada fluido en dicha superficie curva, serán diferentes, entonces, al definir como P_w la presión del agua y como P_o la presión del hidrocarburo, la diferencia será la presión capilar, P_c :

$$P_c = P_w - P_o \quad (7)$$

A medida que el tamaño del poro disminuye entonces la presión capilar aumenta, es decir que en medios de grano fino como las arcillas, la presión capilar es más alta que en medios de grano grueso como las gravas. Cuando el producto contaminante es liberado, su distribución en la zona vadosa estará influenciado por la presión capilar y se acelerará si las condiciones del suelo y distribución espacial de los poros del medio lo vuelven un modelo permeable.

Cuando el hidrocarburo alcanza la franja capilar, que esta formada precisamente por la presión capilar entre el agua y el aire; el movimiento de este producto hacia abajo es más difícil y comienza a desplazarse hacia los lados obteniendo la forma de una lente cuyo espesor y presión aumentarán con el tiempo desplazando el agua del medio poroso.

En la zona vadosa, el hidrocarburo se encuentra con otra presión capilar en los medios de grano fino y que obligan al contaminante a extenderse lateralmente y moverse a través de medios de grano más grueso o con fracturas. El espesor de la lente de hidrocarburo dependerá de la presión que ejerza el contaminante y de si es o no superior a la de la “barrera” capilar, la presión del hidrocarburo que supere esta presión capilar se denomina espesor o altura crítica.

En medios heterogéneos, el contaminante puede moverse más libremente que en medios homogéneos ya que existen más caminos en el subsuelo donde los efectos de la presión capilar son débiles, es decir que no existen barreras capilares de igual o mayor intensidad en toda la zona saturada.

2.2.1.4 Gradiente Hidráulico

Los primeros experimentos del comportamiento del agua en el subsuelo fueron realizados por Henry Darcy y basándose en ellos se formuló la Ley de Darcy que define el volumen de descarga, ($m^3/día$), como función de la permeabilidad del subsuelo y el gradiente hidráulico:

$$Q = -KA \frac{dh}{dl} \quad (8)$$

Donde K, ($m / día$), es la permeabilidad o conductividad hidráulica; A (m^2), es el área total de la sección (el espacio del poro más la estructura del grano); y $\frac{dh}{dl}$ como el gradiente hidráulico.

La ecuación (8) puede ser abreviada (10) usando la descarga específica o velocidad de Darcy, que se expresa como:

$$Q = qA \quad (9)$$

$$q = -K \frac{dh}{dl} \quad (10)$$

A partir de la velocidad de Darcy se puede determinar la velocidad de flujo del agua a través del espacio poroso dividiéndolo para la porosidad, entonces al medir la permeabilidad, la porosidad de los sedimentos y la velocidad de flujo del agua, se puede calcular el gradiente hidráulico del acuífero conociendo previamente el flujo del agua al monitorear lo; el gradiente hidráulico sigue generalmente el relieve local y está influenciado por la tasa de recarga o infiltración que provocan el aumento y descenso de la tabla o lámina de agua.

En los acuíferos confinados el gradiente hidráulico es definido por la inclinación y dirección de la pendiente de la tabla de agua; en la mayoría de los casos el agua fluye hacia puntos de menor gradiente hidráulico. Cuando existen zonas en el subsuelo con mayor permeabilidad que otras como por ejemplo una capa de grava debido a un paleocanal, el agua tiende a acumularse y por ende tener un mayor gradiente hidráulico que las otras capas. Este hecho provoca que la liberación de un contaminante en dicha zona exactamente fluya en todas direcciones ya que tienen un mayor gradiente hidráulico que el de resto de los estratos.

2.2.1.5 Saturación

Se define la saturación como el porcentaje de volumen de fluido con respecto al volumen de huecos en una porción de suelo en condiciones naturales, es decir, la fracción del espacio poroso que esta lleno de dicho fluido. La saturación del medio controla la movilidad de cualquier fluido que entre en el acuífero, es decir que la movilidad del hidrocarburo será reducida hasta que la saturación del agua decrezca.

Por ejemplo, si el agua que satura un medio poroso se desplaza debido al hidrocarburo, la saturación del agua (S_w) decrecerá hasta que solamente quede el agua retenida por fuerzas capilares; este proceso se conoce como drenaje y el porcentaje de agua que es retenida por las fuerzas capilares se conoce como saturación irreducible o saturación residual, S_{wr} .

Ahora si ocurriese lo contrario, que el hidrocarburo fuese desplazado por el agua, este proceso se conoce como imbibición y la saturación del hidrocarburo restante en los poros del medio se conoce como saturación residual del hidrocarburo, S_{or} ; los ciclos de drenaje e imbibición difieren uno de otro como resultado de las diferentes saturaciones, presiones capilares y humectación, el fenómeno es conocido como: histéresis. Durante el drenaje, los poros grandes drenan primero que los pequeños y viceversa cuando ocurre la imbibición, esto conduce a que la zona vadosa retenga menos hidrocarburo residual que la zona saturada. La presión de desplazamiento, valor umbral, presión de imbibición o de burbujeo esta representado por P_d y es la presión con que inicia el hidrocarburo a saturar el medio y desplazar al agua. (Figura 6) Los fluidos con altas viscosidades como los DNPAL's tienen saturaciones residuales más altas que los menos viscosos.

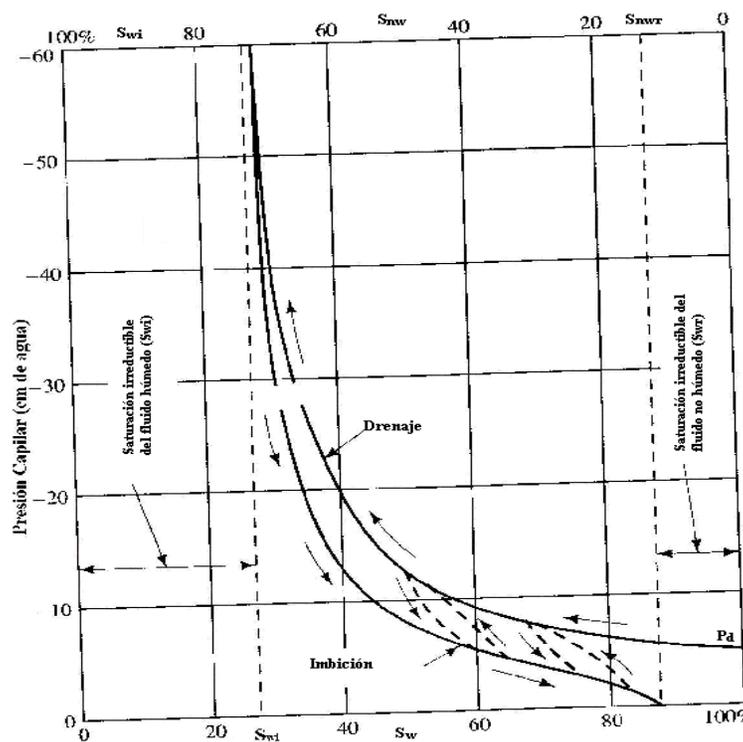


Figura 6 Presión Capilar versus Saturación de Agua

Los fluidos que son más densos para una viscosidad dada drenan en mayor grado bajo la influencia de la gravedad que los menos densos, y fluidos con altos valores de tensión interfacial también tienden a exhibir presiones capilares altas, lo cual conlleva a saturaciones residuales altas. La saturación residual del hidrocarburo es una fuente de contaminación de acuíferos, serán naturalmente atenuada debido a la diseminación con el tiempo mediante procesos de disolución volatilización, biodegradación, etc, pero una constante polución a cuenta gotas. (Figura 7)

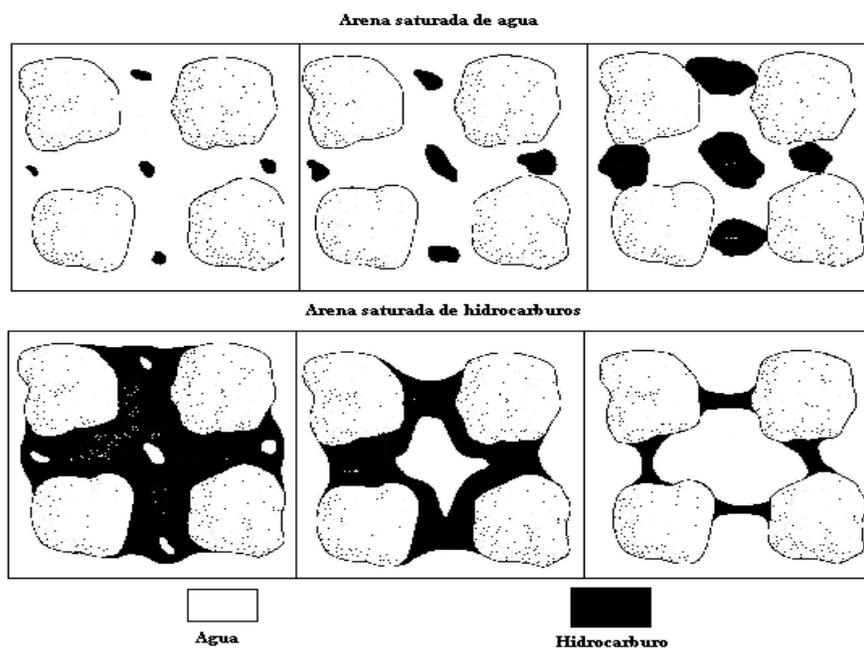


Figura 7 Estados de Saturación para el agua y el hidrocarburo

2.2.1.6 Permeabilidad

La permeabilidad se la define como la capacidad de un medio para permitir el paso de un fluido; mientras mayor sea esta capacidad, más permeable será el medio. Se tiende a tratar como sinónimos a la permeabilidad y a la conductividad hidráulica, pues ambos definen la facultad del suelo para transmitir un fluido, ya que un medio con alta conductividad hidráulica tiene una permeabilidad elevada.

Incluso a partir de la permeabilidad o conductividad hidráulica y el espesor del acuífero se puede hallar su transmisividad. Generalmente, la transmisividad es un parámetro que se obtiene para los estudios hidrogeológicos donde interesa medir el transporte de agua de manera horizontal.

La permeabilidad es función de la porosidad efectiva del suelo, cuando el suelo tiene muchos poros conectados entre sí, el paso del fluido es más fácil y menos tortuoso. El grado de permeabilidad y porosidad es la llave para el movimiento de agua o de un contaminante en un acuífero.

Como se mencionó en apartados anteriores, medios con la misma permeabilidad en todas las direcciones, son isótropos y si el flujo de agua no es paralelo a la conductividad hidráulica, se dice que el medio es anisótropo, cuando el medio es anisótropo puede ocurrir que el contaminante liberado se disperse en una dirección diferente a la del gradiente hidráulico.

La relación entre la permeabilidad para un fluido, bajo un grado de saturación seleccionado, y la permeabilidad total de la roca se conoce como permeabilidad relativa y es determinado en laboratorio, donde se pueden obtener curvas de permeabilidad relativa para los dos fluidos inmiscibles.

Cuando el hidrocarburo puede fluir en un medio donde coexisten las dos fases, quiere decir que el contenido de agua en dicho medio es menor que la saturación irreducible del agua que es retenida por las fuerzas capilares. En cambio cuando el agua puede fluir y el hidrocarburo no, es porque el contenido de hidrocarburo es menor que la saturación residual del mismo.

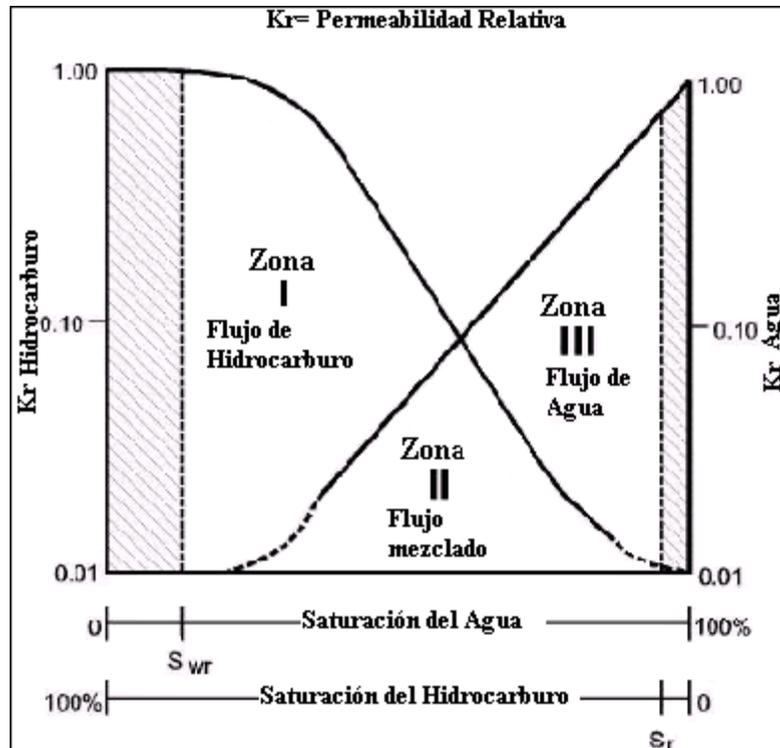


Figura 8 Curvas de Kr para dos fases

La figura 8 muestra las curvas de permeabilidad del hidrocarburo y del agua, para que el agua comience a fluir deberá sobrepasar el límite de la saturación irreducible del agua, S_{wr} , lo mismo ocurre con el hidrocarburo cuyo límite para que comience a fluir es la saturación irreducible, S_{or} . Se distinguen tres zonas, la primera corresponde al movimiento del hidrocarburo y no del agua pues esta restringida a los poros pequeños por lo que la permeabilidad relativa del agua será muy baja o cero; esto es un ejemplo claro de los grandes volúmenes de hidrocarburos liberados en un medio poroso. En la zona dos coexisten los dos fluidos y no necesariamente en los mismos poros, cada fluido tendrá una permeabilidad relativa diferente, estos casos pueden ocurrir cuando el contaminante está cerca de la tabla de agua.

Por último la zona tres donde es el agua el único fluido que se mueve mientras que el contaminante está retenido en los poros del medio, un ejemplo de estas condiciones se dan en hidrocarburos atrapados bajo la tabla de agua.

La permeabilidad o conductividad hidráulica es uno de los parámetros críticos en la mayoría de los problemas de contaminación ya que con esta propiedad se pueden definir la movilidad del contaminante dentro de la formación, realizar la valorización del riesgo y diseñar los sistemas de recuperación del recurso.

2.2.1.7 Humectación

La humectación es la diseminación preferencial de un fluido sobre la superficie de un sólido y depende de la tensión interfacial, por lo que el tamaño del poro influencia de manera importante a los fluidos inmiscibles dentro del sistema agua – hidrocarburo. Generalmente, la fuerza adhesiva entre el agua y la superficie del gránulo hace que el agua se mantenga en los poros y repele al hidrocarburo.

En la zona vadosa, es el aire que empuja de los poros los fluidos como el agua y el hidrocarburo, pero en la zona saturada es el agua la que desplaza a los hidrocarburos de los espacios pequeños del poro, siendo el hidrocarburo el que ocupa los poros más grandes.

Los factores que afectan la humectación en un sistema inmiscible como el agua-hidrocarburo son: la mineralogía, materia orgánica, química del agua y del hidrocarburo y el grado de saturación. Cuando uno de estos factores afecta la humectación de una zona en particular del medio geológico, se conoce como humectación fraccional, esto ocurre principalmente en medios heterogéneos.

2.2.2 PROCESOS REGULADORES DEL COMPORTAMIENTO DE CONTAMINANTES EN LOS ACUÍFEROS

El petróleo o sus productos derivados son vertidos directamente sobre el suelo intencional o accidentalmente, su comportamiento depende de la composición química y de las propiedades físicas y químicas del mismo, como: solubilidad, punto de ebullición,

densidad, entre otros, al llegar al suelo se puede desplazar por tres mecanismos que son: dispersión, disolución y advección.

Los componentes del petróleo pueden desplazarse, volatilizarse, adsorberse en granos del suelo y disolverse en un medio acuoso encerrado en los poros o en las aguas subterráneas. El movimiento del hidrocarburo al llegar al acuífero dependerá de diferentes procesos como:

- Disolución
- Advección
- Dispersión
- Adsorción
- Biotransformación

Los procesos más importantes serán tratados en los apartados siguientes, el movimiento del hidrocarburo al llegar a la tabla de agua, es uno de los puntos más importantes dentro de la simulación de su comportamiento, de acuerdo a las propiedades tanto del suelo como del acuífero mencionadas anteriormente, se podrán definir las dimensiones de los penachos de contaminación y las concentraciones en BTEX de los mismos.

2.2.2.1 Advección

La advección o convección es el proceso en el cual el agua transporta los sólidos a favor de un gradiente. La cantidad de agua que fluya dependerá de la velocidad promedio del flujo y de la porosidad efectiva, la cantidad de sólidos que son transportados dependen de su concentración en el acuífero y de la cantidad de agua que se mueva. Entonces, el flujo de masa que se transporta por advección en una dirección “x” estará relacionado a la velocidad promedio del flujo, a la porosidad efectiva del medio y a la concentración de soluto, como se muestra a continuación:

$$F_x = v_x n_e C \quad (11)$$

Al aplicar derivadas parciales se obtiene la ecuación de transporte advectivo (ecuación 11) en una dimensión:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (12)$$

Esta ecuación permite conocer la concentración del soluto en su avance por advección con respecto al tiempo a favor de un gradiente (efecto pistón). Cuando se hace un estudio de la concentración de un soluto en un medio heterogéneo, el transporte por advección es diferente en cada capa, es decir que el soluto se desplaza en tasas diferentes, ya que el gradiente cambia en cualquier dirección cuando se trabaja en este tipo de casos.

2.2.2.2 Difusión

Cuando un soluto se mueve dentro de un medio líquido o gaseoso, este se desplaza desde zonas de mayor concentración a menor, este proceso se conoce como difusión o difusión molecular, es decir que es el movimiento de las moléculas como resultado de las diferencias en las concentraciones. La difusión es un término usado para indicar la dispersión de una masa en medios donde el fluido está estancado y que se mueve por los gradientes de concentración.

Como se mencionó anteriormente el soluto que se difunde depende de los gradientes de concentración en el medio líquido o gaseoso, esta relación es expresada mediante la Primera Ley de Fick:

$$F = -D_d \left(\frac{dC}{dx} \right) \quad (13)$$

Donde, F es el flujo de masa del soluto por unidad de área por tiempo, D_d es el coeficiente de difusión (L^2/T), C es la concentración del soluto (M/L^3) y dC/dx es el gradiente de

concentración ($M/L^3/L$). Generalmente, el coeficiente de difusión esta dentro de un intervalo de 1×10^{-9} a 2×10^{-9} m^2/s en condiciones estándar.

Pero cuando la concentración en el medio cambia con el tiempo, que es donde caen la mayoría de los casos de contaminación, se aplican derivadas parciales a la ecuación 13 para obtener la Segunda Ley de Fick:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_d \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (14)$$

donde, $\partial C/\partial t$ es el cambio de concentración con respecto al tiempo ($M/L^3/T$). A partir de esta segunda ley se puede definir la concentración con respecto al tiempo, al trabajar la ecuación 14 matemáticamente se obtiene una función muy similar a la función de densidad normal, la curva de Gauss refleja la mayoría de los comportamientos de difusión y dispersión en la naturaleza.

Así los coeficientes de difusión describen el movimiento del soluto en un medio líquido o gaseoso debido al gradiente de concentración e incluso permite calcular el componente de dispersión del transporte químico.

2.2.2.3 Dispersión

La dispersión es el proceso en el cual las partículas se mueven en la dirección del flujo de agua en diferentes formas y por ende a diferentes velocidades, esto se debe a que el tamaño de los poros en el medio cambia y generalmente el agua tiende a moverse por los caminos más fáciles, donde exista menos fricción con los gránulos, además es porque las partículas transportadas pueden tomar trayectorias diferentes durante el transporte, sin olvidar que las partículas más pequeñas viajarán más rápido que las grandes; entonces, en la dispersión, el soluto se disuelve en el avance del flujo.

La dispersión es un mecanismo de atenuación importante que tiene como resultado la dilución del contaminante; el grado de dispersión o dilución es proporcional al valor de los coeficientes de dispersión.

Cuando el avance del contaminante corre en la misma dirección que la del flujo, la dispersión se denomina longitudinal, pero cuando el contaminante se mueve en dirección perpendicular a la dirección del flujo se denomina transversal. (Figura 9)

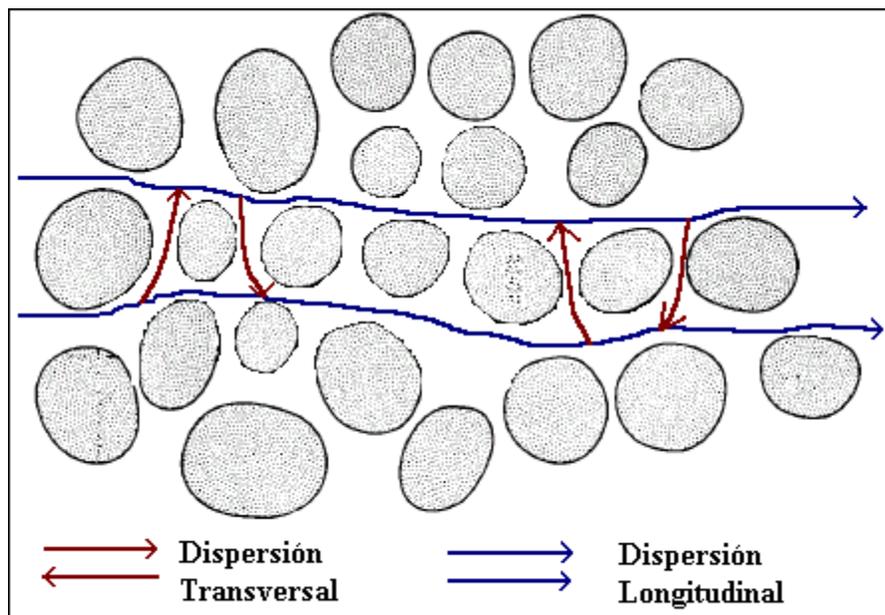


Figura 9 Dispersión Longitudinal y Transversal

La dispersión y la difusión van de la mano, al relacionarlas mediante la Primera Ley de Fick, aparecen los coeficientes de dispersión que explican la dispersividad de un medio, como se explica a continuación:

$$D_L = \alpha_L v_i \quad (15)$$

$$D_T = \alpha_T v_i \quad (16)$$

Donde D_L es el coeficiente de dispersión longitudinal, (L^2/T); D_T es el coeficiente de dispersión transversal, (L^2/T); α_L es la dispersividad dinámica longitudinal, (L); α_T es la

dispersividad dinámica transversal, (L) ; y v_i es la velocidad promedio en la dirección “i”, (L/T) . Recientemente, Gelhar (1992), realizó ensayos para determinar dispersividades en 59 sitios y consideró la veracidad de los coeficientes de dispersión. Los ensayos permitieron llevar a la conclusión que los coeficientes de dispersión longitudinal no son tan reales en escalas mayores a los 300 metros. En esta escala determinada, se puede encontrar que las dispersividades varían en 2 a 3 órdenes de magnitud, es decir que los datos de dispersividad horizontal transversal son un tercio a casi 3 órdenes de magnitud más bajo que la dispersividad longitudinal. Además la dispersividad transversal vertical es de 1 a 2 órdenes de magnitud inferior a la transversal.

El estudio de la dispersión y difusión permiten trazar modelos de trayectoria posible del contaminante liberado para, conociendo sus concentraciones iniciales, analizar su evolución con respecto al tiempo. La dispersión transversal da una idea del desplazamiento del contaminante en un modelo bidimensional cuando el hidrocarburo alcanza la tabla de agua, de igual forma el movimiento en las otras direcciones se verán afectadas por las dispersividades antes mencionadas.

2.2.2.4 Biotransformación

En los acuíferos pueden estar presentes tanto bacterias aeróbicas como anaeróbicas que al interactuar con los contaminantes pueden degradarlos parcial o totalmente. Los contaminantes más susceptibles de sufrir esta biodegradación son los de naturaleza orgánica y en especial los hidrocarburos del petróleo.

2.3 HIDROCARBUROS Y SU COMPORTAMIENTO EN EL SUBSUELO

El comportamiento de los hidrocarburos en el subsuelo depende principalmente de las características del medio geológico, especialmente la permeabilidad y porosidad; de las propiedades del hidrocarburo como: densidad, viscosidad y tensión superficial; y otros factores que están en función de la presión capilar, permeabilidad relativa, saturación,

saturación residual, además de las condiciones del acuífero, volumen liberado, dirección de flujo, entre otros que trataremos a continuación y que contribuyen a la migración y dispersión de los contaminantes.

2.3.1 CLASIFICACION Y COMPOSICIÓN

Tanto el petróleo crudo como sus productos refinados son mezclas de cientos de compuestos que pueden ser clasificados en función de sus propiedades y composición. Los productos a estudiar son: gasolinas, destilados medios y fueloils pesados.

Las **Gasolinas** son mezclas de hidrocarburos y otros aditivos químicos como alcoholes y éteres que son más móviles que los destilados o los fueloils debido a que sus componentes tienen pesos moleculares bajos, esto conlleva a que tengan baja viscosidad, alta volatilidad y moderada solubilidad en el agua. Las gasolinas frescas contienen de 4 a 10 átomos de carbono por molécula y altos porcentajes de hidrocarburos aromáticos los cuales son más solubles y tóxicos, dentro de los compuestos aromáticos encontrados frecuentemente son benceno, tolueno, etilbenceno y xileno (BTEX).

Los aditivos que no son hidrocarburos son solubles y se disuelven rápidamente en el acuífero, en consecuencia, sus concentraciones disminuyen en el producto libre. En otras palabras, los aditivos se mueven más rápido que el hidrocarburo.

Los **Destilados Medios** son el diesel, keroseno, combustibles ligeros y jet fuel que son más densos y menos volátiles, solubles en el agua y móviles que las gasolinas. Contienen de 9 a 20 átomos de carbón por molécula. La presencia de aromáticos ligeros, como los BTEX, son generalmente encontrados como impurezas y si son compuestos integrantes de estos destilados no aparecerán en las plumas de contaminación de vertidos antiguos ya que son biodegradados, evaporados y disueltos en el acuífero.

Los **Fueloils** pesados y lubricantes son de composición similar que los destilados medios pero son más viscosos, insolubles en agua e incluso inmóviles en el subsuelo. Su contenido de átomos de carbón por molécula esta entre 14 hasta 30.

2.3.2 PROPIEDADES GENERALES DE LOS HIDROCARBUROS

Dentro de las propiedades del hidrocarburo se tratarán aquellas que influyen en la migración del contaminante liberado, como: densidad, viscosidad, tensión superficial, solubilidad en agua y coeficiente de partición.

2.3.2.1 Densidad

La densidad influye en cómo el hidrocarburo se acumulará sobre la lámina de agua, se define como la masa por unidad de volumen de la sustancia, generalmente se lo expresa en grados API que es:

$$^{\circ}API = \frac{141.5}{sp.gr} - 131.5 \quad (17)$$

Donde, sp.gr es el peso específico del hidrocarburo.

Los hidrocarburos son fluidos inmiscibles con el agua, de ahí que se puedan acumular sobre o bajo la tabla o lámina de agua según sea su densidad, por ello se definirá un término que se presentará a lo largo del problema que es NAPL o fase líquida no acuosa (contaminante), el NAPL puede dividirse en: LNAPL que es más ligero que el agua, en cuyo caso se denomina fase líquida no acuosa ligera y DNAPL más denso que el agua conocido como: Fase líquida no acuosa densa.

Los hidrocarburos menos densos que el agua o LNAPL's son muchos y caen en este grupo casi todos los combustibles y químicos derivados del petróleo; son medidos in situ por medio de pozos donde se determina el espesor de la capa sobrenadante en la tabla de agua.

2.3.2.2 Viscosidad

La viscosidad se define como la resistencia del fluido a fluir debido a la fricción interna entre las moléculas del fluido. La viscosidad puede ser considerada como una descripción cualitativa del movimiento de los fluidos, los que tienen una baja viscosidad fluyen de manera más rápida que los fluidos con viscosidades altas. Se deduce entonces que los hidrocarburos con menor viscosidad son más fáciles de recuperar del subsuelo que los más densos.

La viscosidad dinámica es definida como la relación entre la viscosidad y la densidad y esta expresada en centipoises (cP), mientras que la viscosidad cinemática es igual a la dinámica o absoluta pero expresada en centistokes (cSt).

**TABLA 2 DENSIDAD Y VISCOSIDAD DINAMICA DE PRINCIPALES
HIDROCARBUROS**

FLUIDO	DENSIDAD (g/ml)	VISCOSIDAD DINÁMICA (cp)
Agua	0,998	1,14
Gasolina de automóvil	0,79	0,62
Diesel	0,827	2,70
Kerosene	0,839	2,30
Jet Fuel N° 5	0,844	-
Fuel Oil N° 2	0,866	-
Fuel Oil N° 4	0,904	47,20
Fuel Oil N° 5	0,923	215,00
Fuel Oil N° 6 ó Bunker C	0,923	-
Crudo de pozos normales	0,832	5,05
Crudos Avalon	0,89	11,40
Crudo Alberta	0,840	6,43
Crudo Atkinson	0,911	53,30
Crudo La Rosa	0,914	180,00

Fuente: API, 1996. A guide to the Assessment and Remedation to underground Petroleum Releases, 3°.

2.3.2.3 Tensión Superficial

La tensión interfacial que existe en la interfase entre dos fluidos inmiscibles determina el movimiento de los hidrocarburos libres debido a las fuerzas intermoleculares de ambos fluidos y es también uno de los factores que controlan la humectación (wettability). En consecuencia, a mayor tensión interfacial, mayor estabilidad de interfase entre los dos fluidos. La tensión interfacial entre un líquido y su vapor es la tensión superficial. La tensión superficial del agua a condiciones estándar es de 72 dinas cm^{-1} .

2.3.2.4 Solubilidad en agua

Se define como solubilidad de un compuesto químico en el agua a la máxima cantidad de dicho compuesto que se disolverá en agua pura a una temperatura determinada. La solubilidad del hidrocarburo afecta a la liberación del constituyente químico (benceno, tolueno, xileno y etilbenceno), su migración en un medio y su acumulación en el acuífero.

La solubilidad es uno de los factores de los cuales dependen muchos de los compuestos hidrófilos, ya que afecta a la movilidad, capacidad de lixiviación, disponibilidad para la biodegradación y al destino último del contaminante.

La mayoría de los compuestos químicos que son muy solubles tienen la facilidad de distribuirse rápidamente en los acuíferos, es decir que sus coeficientes de adsorción son relativamente bajos en el suelo. Al llegar al agua pueden ser degradados rápidamente o transportados con facilidad.

La acción combinada de la solubilidad en agua con la presión de vapor se caracteriza por la constante de Henry de los compuestos químicos (que determina si el compuesto químico se volatizará o no del agua al aire). La acción combinada de la solubilidad en agua con la solubilidad en las grasas se caracteriza por el coeficiente de partición octanol – agua.

2.3.2.5 Coeficiente de Reparto NAPL / Agua

Se define al coeficiente de partición NAPL/agua, (K_o), como la relación en equilibrio de la concentración del constituyente químico en el NAPL, (c_o), y la concentración en agua, (c_w):

$$K_o = \frac{c_o}{c_w} \quad (18)$$

Este coeficiente es de gran importancia ya que permite determinar cuanto del constituyente químico ha sido liberado del NAPL en el agua. El K_o depende de la composición del NAPL, es decir que el K_o será diferente para la gasolina, diesel, fuel oil, etc. Cline (1991) realizó varias pruebas para determinar una relación entre las propiedades del constituyente y el NAPL con el fin de obtener el K_o :

$$K_o = \frac{1 \times 10^6 \left(\frac{\rho_o}{\omega^o} \right)}{\frac{s_k}{\omega_k}} \quad (19)$$

Donde, ρ_o es la densidad del NAPL (g/ml), ω^o es el peso molecular promedio del NAPL (g/mol), s_k es la solubilidad del constituyente de interés (mg/L) y ω^o es el peso molecular del constituyente químico de interés en (g/mol).

Además del coeficiente de partición NAPL/agua, la composición del NAPL permite determinar las concentraciones de los contaminantes en el agua subterránea, es decir, la composición del NAPL rige el coeficiente de partición y la cantidad de constituyente que entrará como contaminante en el agua.

Otro coeficiente que se utiliza mucho en el estudio de contaminación de acuíferos es el Coeficiente de Reparto Octanol/Agua, que se define como la relación entre la concentración de un compuesto químico en la fase orgánica, representada por el octanol, (c_{oc}), y la concentración en la fase acuosa, (c_w).

$$K_{ow} = \frac{C_{oc}}{C_w} \quad (20)$$

Usando el K_{ow} es posible predecir cómo el constituyente orgánico se distribuye entre el agua subterránea y el hidrocarburo, fracción orgánica; así como entre el agua superficial y los organismos acuáticos. Para valores altos de K_{ow} , el constituyente orgánico tenderá a permanecer adsorbido en la fracción orgánica del suelo en lugar de disolverse en el agua; igualmente, el constituyente químico tenderá a acumularse en los tejidos grasos incorporándose así a la cadena alimenticia.

TABLA 3 SOLUBILIDAD EN AGUA Y COEFICIENTE DE REPARTO OCTANOL/AGUA DE LOS BTEX

CONSTITUYENTE	SOLUBILIDAD EN AGUA (mg/L)	K_{oc} (ml/g) o (L/Kg)
BENCENO	1750	83
TOLUENO	152	1100
XILENO-O	535	300
ETILBENCENO	175	830

Fuente: The Hydrocarbon Spill Screening Model. Volumen 1". EPA

2.3.3 COMPORTAMIENTO DE LOS HIDROCARBUROS EN EL SUELO Y ACUÍFEROS

Cuando los hidrocarburos y en nuestro caso los LNAPL (hidrocarburos ligeros de fase no acuosa) son liberados en la superficie de la tierra, estos migran a través de los poros conectados del suelo (porosidad efectiva) de manera vertical en la zona vadosa ya que están influenciados por la gravedad y las fuerzas de capilaridad, hasta alcanzar la lámina de agua.

El transporte del hidrocarburo en el subsuelo depende, básicamente, de las propiedades del mismo como: densidad, viscosidad, tensión interfacial, entre otras; y de las características del medio como: porosidad, permeabilidad, saturación de agua, presión capilar, etc.

Mientras que, al llegar al acuífero comienzan a intervenir otros factores que condicionarán la distribución del contaminante en el agua subterránea, como por ejemplo: dirección del flujo, caudal, gradiente hidráulico y otras propiedades mencionadas en capítulos anteriores. El movimiento del hidrocarburo en el medio geológico esta afectado por la gravedad y las fuerzas capilares, cuando el contaminante es más ligero, el efecto de estas dos características es más pronunciado. Si el volumen del hidrocarburo liberado es pequeño, puede ocurrir que quede retenido en el suelo ya que el contaminante será adsorbido y permanecerá en la superficie de los gránulos del medio. Pero en la mayoría de los casos de contaminación por ruptura de tanques, el volumen que estos liberan sobrepasa la capacidad de retención del suelo y migra hasta la franja capilar donde los constituyentes químicos del hidrocarburo pueden ser disueltos en el acuífero por advección, difusión, dispersión, etc. En cualquier caso, durante el paso del LNAPL por el medio geológico, parte queda retenido en este medio, denominándose hidrocarburo residual. En la zona vadosa parte de este hidrocarburo residual puede volatilizarse y dependerá de la volatilidad relativa y de la solubilidad en agua. La distribución del hidrocarburo al llegar a la lámina de agua dependerá tanto de sus propiedades como de las características hidrogeológicas del terreno; en esa fase, una vez en contacto con la lámina de agua, comenzará a extenderse formando lo que conocemos como plumas de contaminación siendo, cada caso su extensión directamente proporcional al tiempo transcurrido, al menos hasta haber sobrepasado el tiempo de vida media del contaminante (en aquellos casos en los que sea degradable). Durante todo este tiempo, el contaminante puede ir disolviendo y movilizandando otras sustancias químicas presentes en el medio.

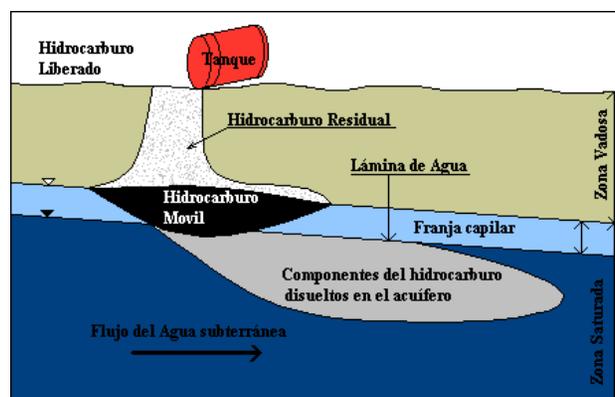


Figura 10 Comportamiento del LNAPL en el subsuelo al ser liberado desde un tanque.

3 DESCRIPCION DEL MODELO

Previo a la aplicación de diferentes métodos de remediación y recuperación de suelos y acuíferos es necesario conocer la magnitud del daño, es decir, las dimensiones de la pluma de LNAPL y las concentraciones de los constituyentes químicos en el acuífero, basándose en diferentes parámetros que afectan y caracterizan cada problema de contaminación.

Es indispensable para la simulación con diferentes programas que existen actualmente en el mercado, conocer mediante el muestreo de suelo y agua, las condiciones en tiempo presente del derrame del hidrocarburo, buscar esos indicios que existen en la zona para aplicar la modelización.

Toda simulación mediante programas, se basa en los datos recogidos en el campo, de ellos depende la veracidad de los resultados y la lógica de los mismos, además de las características del medio y del hidrocarburo que influyen grandemente en la modelización.

Mediante la simulación del comportamiento del contaminante en un medio con características específicas, es posible prevenir los desastres, ya que son el primer paso para la investigación y elaboración de técnicas de control e incluso de construcción de tanque de almacenamiento más seguros, además permite definir el tiempo de vida útil de cada uno. En la mayoría de los casos, es factible tener pozos de control en zonas indicadas por el programa para tener un seguimiento constante de las condiciones normales del acuífero y del suelo.

El programa con que se trabaja en este proyecto es el Hydrocarbon Spill Screening Model para Windows, el cual trabaja con los parámetros de cada medio en el que el hidrocarburo se desplaza, teniendo en cuenta las propiedades del mismo. Es un programa sencillo cuyos resultados gráficos permiten conocer rápidamente las concentraciones de BTEX existentes en tiempos definidos por el usuario.

3.1 APLICACIÓN DEL PROGRAMA HSSM-WINDOWS

El Programa Hydrocarbon Spill Screening Model para Windows simula el comportamiento de combustibles o hidrocarburos liberados en un sistema homogéneo del subsuelo y estima el impacto del contaminante sobre los acuíferos, facilitando la programación de fases de investigación y de creación de tanques de almacenamiento.

Los hidrocarburos al ser liberados en superficie migran a través de la zona vadosa hasta la tabla de agua, y si son menos densos que ésta forman una lente sobre la superficie del acuífero. El programa considera que el hidrocarburo (LNAPL) esta formado por dos componentes importantes: el primero es el combustible en sí, como por ejemplo: fuel oil, gasolina, gasóleo, etc., y el segundo es el constituyente químico de interés, como por ejemplo: benceno, tolueno, etilbenceno, etc., los cuales pueden disolverse en agua y ser transportados por el acuífero.

3.2 DESCRIPCION DEL AREA DE ESTUDIO

El emplazamiento era una antigua Instalación Portuaria construida hace veinticinco años. Dicha instalación está fuera de servicio desde hace cinco años. Todos los elementos mecánicos de la instalación han sido desguazados. Su actividad consistió en el almacenamiento temporal, previo a su distribución de los siguientes tipos de combustible: fuel-oil, splinde-oil, petróleo corriente, gasóleos A, B y C, y gasolinas de 90, 96 y 98 octanos.

En la Instalación existen cargaderos para camiones cisterna y un acceso ferroviario hasta el cargadero de vagones cisterna. El suelo está constituido por tierra compacta, sin recubrimiento artificial. Solamente hay hormigón en la zona de los cargaderos de camiones cisterna. En el emplazamiento existían veintiseis tanques de almacenamiento y quince tanques de servicio, actualmente todos los tanques se encuentran desmantelados.

3.3 DESCRIPCION DEL PROGRAMA

Cuando el LNAPL es derramado en la superficie, éste fluye a través de la zona vadosa debido a las fuerzas de gravedad y capilaridad hasta alcanzar la tabla de agua y su viaje se acelera debido al empuje del agua de lluvia infiltrada.

El programa asume que el LNAPL fluye de manera unidimensional desde la superficie del suelo hacia el acuífero, siendo afectado por las características del suelo, porosidad, densidad, permeabilidad, entre otras. Una vez en contacto con el agua, el contaminante forma una lente cuyo tamaño y flujo es determinado por el programa, basándose en las propiedades del hidrocarburo y características del acuífero.

Los constituyentes químicos de interés ingresan al acuífero por procesos de advección y dispersión, las concentraciones de los mismos se determinan tomando en cuenta puntos de control en el terreno.

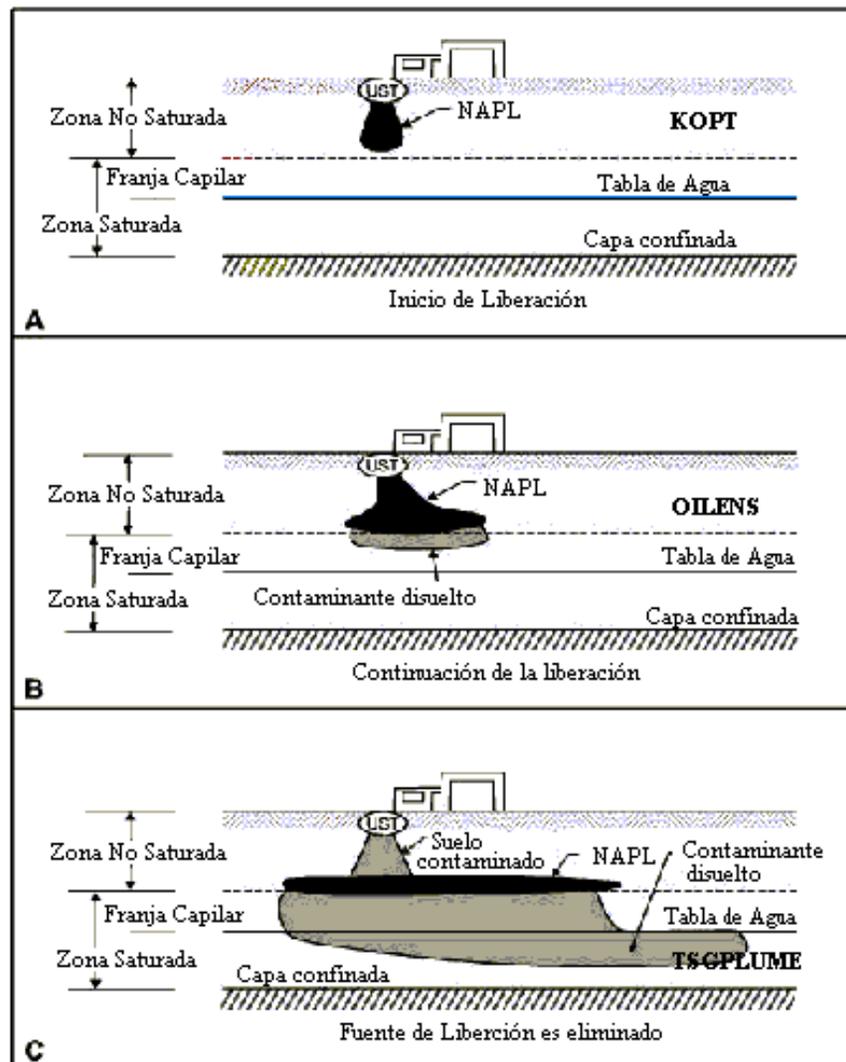
3.3.1 COMPONENTES DEL MODELO

El HSSM-WIN contiene tres módulos que permiten analizar cada parte del comportamiento del contaminante una vez liberado en el subsuelo, estos son: **Kinematic Oily Pollutant Transport (KOPT)**, **OILENS** y **Transient Source Gaussian Plume (TSGPLUME)**.

3.3.1.1 Módulo KOPT

Este módulo simula el flujo del contaminante en la zona vadosa de una manera unidimensional y sin tener en cuenta la dispersión lateral. Se asume que el suelo es uniforme y por ende la cantidad de cada fluido que contenga se expresará como saturación (S), que se define como la fracción del espacio poroso lleno de dicho fluido.

En este módulo, el LNAPL esta compuesto por dos únicos constituyentes, cuyas propiedades son consideradas constantes y cuyo transporte esta influenciado por las propiedades del suelo en el caso del NAPL y a procesos de advección y dispersión en el caso del constituyente químico de interés.



Source: EPA, 1991

Figura 11 Fases del comportamiento del hidrocarburo relacionado a los módulos del programa HSSM-WIN

3.3.1.2 Módulo OILENS

Una vez que el hidrocarburo entra en contacto con el agua, la manera en que éste se mueve en la superficie del acuífero es determinada por el módulo OILENS asumiendo una diseminación radial, es decir que la pendiente regional de la tabla de agua es lo suficientemente pequeña para que no afecte el movimiento de la lente.

El espesor de la lente es determinado por flotabilidad y su forma viene dada por las suposiciones de Dupuit pero las dimensiones son afectadas por las propiedades del LNAPL, como por ejemplo: densidad, viscosidad, entre otras.

3.3.1.3 Módulo TSGPLUME

El TSGPLUME simula el comportamiento del hidrocarburo cuando es transportado a través del acuífero para ello se basa en dos soluciones promedio bidimensionales de la ecuación de advección-dispersión. Este módulo asume una distribución de concentración gaussiana en la sección de la lente y fija su límite, su diámetro, a una distancia a 4σ (cuatro veces la desviación típica de la distribución).

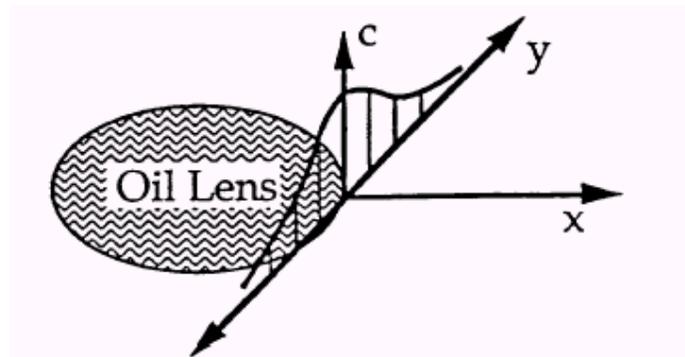


Figura 12 Distribución Gaussiana tomada como límite de la lente

3.3.2 PARAMETROS DE ENTRADA

Dentro del programa existen cuatro recuadros necesarios para ejecutar los módulos descritos anteriormente, estos son:

- Parámetros Generales del Modelo (General Model Parameters).
- Parámetros Hidrológicos (Hydrologic Parameters).
- Parámetros del Hidrocarburo (Hydrocarbon Phase Parameters).
- Parámetros de Simulación (Simulation Parameters).

3.3.2.1 Parámetros Generales del Modelo

En este recuadro (figura 13) existen tres apartados de los cuales, el primero solicita el título (Run Titles) que va a ser usado por el programa para nominar cada resultado del problema. Este título consiste de tres líneas que sirven para identificar al contaminante (BTEX) del combustible (gasolina, fuel oil, entre otros) a analizar, conocer el porcentaje en peso del contaminante de dicho hidrocarburo, y conocer el tipo de suelo del caso a estudiar.

En el segundo apartado se encuentran las opciones generales del programa como:

- Crear los archivos de salida (esta opción permite tener los resultados del programa).
- Solo imprimir datos (si no se desean ejecutar los módulos del programa y tan solo tener los datos impresos).
- Ejecución del modelo (genera los archivos de salida gráficos basándose en los datos ingresados).
- Ejecución del KOPT (permite ejecutar la parte del programa HSSM-KO y simula la parte de infiltración del hidrocarburo en la zona vadosa, este debe ser seleccionado si se desea ejecutar los otros dos módulos del programa).
- Ejecución del OILENS (esta opción ordena simular la diseminación del hidrocarburo sobre la superficie del acuífero).

- Ingresar archivos al TSGPLUME (permite ingresar los datos generados en los dos módulos anteriores para simular el transporte del constituyente químico de interés en el acuífero).

En el último apartado aparecerán los nombres de los archivos con sus respectivos directorios, que se generarán una vez ejecutados el HSSM-KO y el TSGPLUME.

General Model Parameters

Run Titles:

Benzene transport from 1500 gal gasoline spill
 1.15% benzene in gasoline
 sandy soil, properties from Carsel and Parrish

Printing switches

Create output files
 Echo print data only
 Run models

Module switches

Run KOPT
 Run OILENS
 Write HSSM-T input file

File names

NOTE: These filenames will be used if the data file is saved under a new name with the "SaveAs" option.

C:\HSSM\X2BT.DAT	HSSM-KO input file
C:\HSSM\X2BT.HSS	HSSM-KO output file
C:\HSSM\X2BT.PL1	HSSM-KO plot file 1
C:\HSSM\X2BT.PL2	HSSM-KO plot file 2
C:\HSSM\X2BT.PL3	HSSM-KO plot file 3
C:\HSSM\X2BT.PMI	HSSM-T input file
C:\HSSM\X2BT.TSG	HSSM-T output file
C:\HSSM\X2BT.PMP	HSSM-T plot file

OK
Cancel

Figura 13 Recuadro de los Parámetros Generales

3.3.2.2 Parámetros Hidrogeológicos

En este recuadro (figura 14) existen dos apartados de interés fundamental ya que definen el suelo y el acuífero que influyen a su vez en la movilidad del hidrocarburo, el primer apartado trata las propiedades hidrogeológicas y el segundo las propiedades del suelo. Tanto los datos hidrogeológicos como los del suelo requeridos para el programa son definidos a continuación.

- Viscosidad dinámica del agua, μ_w , (cp), se trabaja con 1 centipoise para agua pura a 20 °C.
- Densidad del agua, ρ_w , (g/cm^3), cuyo valor es 1 para el agua pura a 20 °C.
- Tensión superficial del agua, σ_{aw} , (dina/cm), se trabaja con 65 que es recomendado para suelos contaminados.
- Permeabilidad relativa máxima del agua durante la infiltración, $K_{rw(\text{max})}$, que se define mediante la siguiente relación:

$$K_{rw} = \frac{K_{ew}}{K_{sw}} \quad (21)$$

Donde K_{ew} es la conductividad efectiva del agua y K_{sw} es la conductividad saturada de agua; se la requiere para considerar el aire atrapado durante la infiltración, pues resulta que ese aire influye en la conductividad hidráulica del suelo disminuyéndola en comparación con la conductividad saturada. El valor típico a usar está entre 0.4 a 0.6, se recomienda usar 0.5.

- Recarga, se presentan dos alternativas para escoger: la tasa de recarga anual promedio (q_w) en metros por día o la saturación $S_{w(\text{max})}$. Con el primer dato, el programa determina la saturación de agua y con el segundo, se determina el flujo de agua asociado.
- Modelo de la Curva de Presión Capilar, el programa presenta dos modelos el de Brooks & Corey y el de Van Genuchten que es transformado al modelo de Brooks & Corey por el propio programa.

El modelo de Brooks & Corey relaciona la saturación S_w y la presión capilar, como se muestra en la siguiente relación:

$$\left(\frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right) = \left(\frac{h_{ce}}{h_e} \right)^\lambda \quad (22)$$

Donde S_{wr} es la saturación irreducible o la saturación de agua residual, h_{ce} es la altura de entrada de aire y λ el índice de distribución del tamaño de poro; cada uno

de estos parámetros es determinado por medio de la curva de presión capilar agua / aire.

El modelo de Van Genuchten se basa en los contenidos de agua en el suelo como se muestra en la siguiente relación:

$$\left(\frac{\theta_w - \theta_{wr}}{\theta_m - \theta_{wr}} \right) = \left(\frac{1}{1 + (\alpha h)^n} \right)^m \quad (23)$$

Donde θ_{wr} es el contenido residual volumétrico de agua, θ_m es el contenido máximo volumétrico de agua, α y n son parámetros del modelo.

- Conductividad hidráulica vertical saturada, K_s , (m/d), se define como la conductividad del agua de acuerdo a la ley de Darcy:

$$q_w = -K_s \frac{dh}{dl} \quad (24)$$

Donde q_w es el flujo de agua, K_s es la conductividad hidráulica y $-dh/dl$ es el gradiente hidráulico.

- Tasa de conductividad hidráulica horizontales / vertical, el programa usa esta tasa junto con la conductividad hidráulica para tomar en cuenta la anisotropía posible en el medio geológico.
- Porosidad (η) se ingresa la porosidad del acuífero.
- Densidad volumétrica, ρ_b , (g/cm^3), es la densidad del suelo.
- Espesor saturado del acuífero, (m), se ingresa el espesor del acuífero.
- Profundidad de la tabla de agua, (m), se ingresa la profundidad a la que se encuentra la tabla de agua siendo su ápice la fuente de liberación.
- Parámetro de espesor capilar, (m), este parámetro permite que el modelo construya un borde capilar antes que ocurra el avance del LNAPL sobre la tabla de agua, el valor recomendado es 0.01 m.

- Gradiente del acuífero, (m/m), es usado en el TSGPLUME, estos valores van entre 0.005 a 0.02.
- Dispersividad del acuífero longitudinal, transversal horizontal y transversal vertical, A_L , A_T , A_V , se las define como:

$$A_L = D_L / v; A_T = D_T / v; A_V = D_V / v \quad (25)$$

Donde D_L , D_T , D_V , son los coeficientes de dispersión longitudinal, transversal horizontal y transversal vertical respectivamente, y v la velocidad en la dirección del flujo principal.

HYDROLOGIC PROPERTIES		Data file:	OK
Water dynamic viscosity (cp)	1.000	C:\HSSM\X2BT.DAT	Cancel
Water density (g/cm ³)	1.000	<input checked="" type="checkbox"/> Enable range checking	
Water surf. tension (dynes/cm)	65.00		
Maximum kw during infiltration	5000		
Recharge		POROUS MEDIUM PROPERTIES	
<input checked="" type="radio"/> Average recharge rate (m/d)	value: 1.400E-02	Sat'd vert. hydraulic cond. (m/d)	7.100
<input type="radio"/> Saturation		Ratio of horz/vert hyd. cond.	2.500
Capillary pressure curve model		Porosity4300
<input type="radio"/> Brooks and Corey		Bulk density (g/cm ³)	1.510
<input checked="" type="radio"/> van Genuchten		Aquifer saturated thickness (m)	15.00
Brooks and Corey's lambda		Depth to water table (m)	10.00
Air entry head (m)		Capillary thickness parameter (m)1000E-01
Residual water saturation	1.000	Groundwater gradient (m/m)1000E-01
van Genuchten's alpha (1/m)	4.500	Longitudinal dispersivity (m)	10.00
van Genuchten's n	2.680	Transverse dispersivity (m)	1.000
		Vertical dispersivity (m)1000

Figura 14 Recuadro de los Parámetros Hidrogeológicos

3.3.2.3 Parámetros del Hidrocarburo

Dentro de las propiedades requeridas dentro del programa, se diferencian dos partes importantes de la naturaleza de la fase del LNAPL, la del hidrocarburo y la del constituyente químico contaminante (figura 15), además se especifican las condiciones en

que fue liberado el hidrocarburo dentro de los cuatro casos que se detallarán en esta sección.

Las propiedades del hidrocarburo solicitados por el programa son:

- Densidad del LNAPL, ρ_o , (g/cm^3) es necesaria para la simulación en el módulo OILENS y debe ser menor que la densidad del agua, para casos de DNAPL dicho módulo no funciona.
- Viscosidad dinámica del LNAPL, μ_o , (cp) es necesaria para la simulación en el módulo HSSM-KO y le permite junto con los datos de densidad y viscosidad del agua hallar la conductividad hidráulica saturada del LNAPL.
- Solubilidad del LNAPL, (mg/L), se define como la solubilidad de todos los componentes del hidrocarburo excepto la del constituyente químico de interés, su valor tiene que ser mayor a cero si el módulo OILENS quiere ser ejecutado.
- Saturación residual del LNAPL en el acuífero, S_{ors} , corresponde a la cantidad de hidrocarburo que se encuentra en el acuífero y se estima que esta entre 0.15 – 0.50.
- Saturación residual del LNAPL en la zona vadosa, S_{orv} , valores típicos de esta saturación esta en los rangos de 0.10 a 0.20.
- Coeficiente de reparto suelo/agua, (L/Kg), se define como la relación entre las concentraciones del hidrocarburo en el suelo y en el agua.
- Tensión superficial del hidrocarburo, σ_{ao} , (dina/cm), se ingresa la tensión del combustible, estos datos generalmente están tabulados.

Las propiedades del constituyente disuelto requeridas en el programa son:

- Concentración inicial del constituyente en el NAPL, C_o (ini), (mg/L), se ingresa la concentración del compuesto que se está estudiando en el NAPL aplicando la siguiente fórmula:

$$C_b = f_b \rho_g \quad (26)$$

Donde, C_b es la concentración del compuesto químico de interés en el hidrocarburo, f_b es porcentaje en masa del constituyente químico en el hidrocarburo y ρ_g es la densidad del hidrocarburo, luego se convierte C_b (mg/L) a C_b (mg/L) convirtiéndose en la concentración inicial del constituyente en el NAPL:

$$C_b (mg / L) = C_b (g / cm^3) \left(\frac{1000 cm^3}{L} \right) \left(\frac{1000 mg}{g} \right) = C_{0(ini)} \quad (27)$$

- Coeficiente de partición NAPL / agua, K_o , como se lo ha definido en capítulos anteriores, el coeficiente de partición es la relación entre la concentración del constituyente químico del NAPL y del agua.
- Coeficiente de partición Suelo / agua, K_d , (L/Kg), se define como la relación entre las concentraciones del suelo y agua del constituyente, se lo determina generalmente como una relación directa entre la fracción del carbón orgánico y el coeficiente de partición de carbón orgánico, como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\bullet \quad K_d = f_{oc} K_{oc} \quad (28)$$

- Solubilidad del constituyente, s_k , (mg/L), esta solubilidad es usada por el HSSM para definir la concentración en el agua durante la contaminación en el acuífero con el NAPL.
- Vida media del constituyente en el acuífero (d), seleccionar esta opción permite que el programa en el módulo TSGPLUME defina el tiempo que el constituyente químico está presente en el acuífero y modifique las curvas de concentraciones resultantes durante la migración del contaminante. Esta opción esta especialmente indicada para aquellos casos en el que el compuesto sea biodegradable o inestable en las condiciones físico-químicas del medio.

Para la limitación de las condiciones de liberación del hidrocarburo, el programa presenta cuatro casos que son:

1. Flujo específico.- si se conoce el flujo liberado constante dentro de un tiempo dado.
2. Volumen / área específica.- se aplica cuando se conoce el volumen por unidad de área que ha sido liberado sobre una cierta profundidad.
3. Altura constante de estancamiento.- se usa cuando se conoce la altura de estancamiento de hidrocarburo para un tiempo específico.
4. Estancamiento variable después de un período de altura constante de estancamiento.- se aplica cuando la altura de estancamiento constante de hidrocarburo después de una duración específica decrece a cero.

Para estos cuatro casos, los parámetros usados son:

- Flujo del LNAPL, q_0 , (m/d), es el flujo constante del hidrocarburo en metros por día.
- Tiempo inicial, (d), se ingresa el tiempo de inicio de liberación, generalmente el valor usado es cero.
- Tiempo final, (d), se ingresa el tiempo final de liberación en días o el tiempo final de la altura constante de estancamiento.
- Altura de estancamiento, H_s (m), se define como la altura constante a la que se encuentra el hidrocarburo.
- Volumen / área de hidrocarburo, (m^3/m^2), se define como la relación entre el volumen del hidrocarburo por unidad de superficie que ocupa en el terreno.
- Profundidad de la zona LNAPL, (m), es la profundidad de la base de la zona contaminada.

HYDROCARBON PHASE PROPERTIES	
NAPL density (g/cm ³)	.7200
NAPL dynamic viscosity (cp)	.4500
Hydrocarbon solubility (mg/L)	10.00
Aquifer residual NAPL saturation	.1500
Vadose zone residual NAPL sat'n	.5000E-01
Soil/water partition coeff. (L/kg)	.8300E-01
NAPL surface tension (dyne/cm)	35.00

DISSOLVED CONSTITUENT PROPERTIES	
<input checked="" type="checkbox"/> Dissolved constituent exists	
Initial constit. conc. in NAPL (mg/L)	8208.
NAPL/water partition coefficient	311.0
Soil/water partition coeff. (L/kg)	.8300E-01
Constituent solubility (mg/L)	1750.
<input type="checkbox"/> Constit. 1/2-life in aquifer (d)	

HYDROCARBON RELEASE	
<input checked="" type="radio"/> Specified flux	
<input type="radio"/> Specified volume/area	
<input type="radio"/> Constant head ponding	
<input type="radio"/> Variable ponding after const head period	
NAPL flux (m/d)	.4522
Beginning time (d)	.0000
Ending time (d)	1.000
Ponding depth (m)	
NAPL volume/area (m)	
Lower depth of NAPL zone (m)	

Data file: C:\HSSM\X2BT.DAT

Enable range checking

OK Cancel

Figura 15 Recuadro de los Parámetros del Hidrocarburo

3.3.2.4 Parámetros de Simulación

Dentro de este apartado (figura 16) existen diálogos que comprenden la simulación desde su liberación en superficie, la simulación del transporte de hidrocarburo en la zona vadosa de manera unidimensional, los parámetros requeridos son:

- Radio de la lente de hidrocarburo desde la fuente, R_s , (m), es el radio de la fuente contaminante en metros, si esta opción no es llenada, el módulo OILENS no puede ser ejecutado y el programa asume un radio de 0.5642 metros para obtener un área de 1 m².
- Factor de multiplicación del radio, (RMF); es sugerido el valor 1.001 para multiplicar el radio inicial una vez ejecutado el módulo OILENS.
- Saturación máxima del NAPL en la lente del hidrocarburo, $S_{o(max)}$ es determinada mediante la utilidad NTHICK que viene en el programa HSSM DOS y permite usando los datos de los parámetros hidrogeológicos junto con el modelo de Brooks & Corey determinar la saturación máxima del LNAPL.

- Tiempo de simulación final, (d), se ingresa el tiempo en días para que termine la simulación de la contaminación, siempre debe ser especificado aunque exista otra opción seleccionada que detenga la operación.
- Paso de tiempo máximo para la solución, (d), es el intervalo de tiempo máximo para el cual el programa comienza la simulación, se recomienda tomar los valores más altos posibles aunque a tamaños de pasos muy grandes el error es mayor.
- Tiempo mínimo entre pasos de tiempo impresos chequeos de balance de masas, (d), este parámetro no afecta la simulación en sí...

El módulo HSSM-KO tiene el módulo OILENS que simula el comportamiento del hidrocarburo en la zona vadosa, es en este apartado donde se especifica cuando se va a detener la simulación, para ello el programa presenta cuatro casos, que se exponen a continuación:

- Tiempo especificado por el usuario donde la simulación se detiene al indicar un tiempo límite.
- Detener el avance de la lente de NAPL, esta elección hace que la simulación se detenga en el tiempo especificado aún así no se haya formado la lente. Hay que tener en cuenta que la solubilidad del NAPL no sea cero porque sino la simulación continúa indefinidamente.
- Flujo de masa del contaminante máximo en el acuífero, permite detener la simulación cuando se llega al máximo del flujo del constituyente químico de interés.
- Fracción de masa del contaminante bajo un valor de fracción de la masa total de la lente, detiene la simulación cuando la fracción de masa del contaminante químico de interés esta por debajo de un valor especificado por el usuario. La fracción de masa remanente que se recomienda en este apartado es de 0.02 o menor.

Para la simulación del TSGPLUME los valores requeridos son:

- Porcentaje máximo de radio contaminante, debido a que el radio de la lente cambia constantemente durante su transporte, el programa trata de acercarlo lo más posible al radio donde existe el máximo flujo de masa para ello necesita un porcentaje máximo de radio contaminante, para la selección automática de dicho radio se ingresa el valor 101.
- Concentración mínima de salida, (mg/L), se ingresa la concentración mínima para la cual el TSGPLUME incluya los resultados en los archivos de salida. La concentración típica es 0.001 mg/L.
- Tiempo inicial, (d), se ingresa el tiempo en que comienza la simulación del TSGPLUME.
- Tiempo final, (d), se ingresa el tiempo final para la simulación del TSGPLUME.
- Tiempo de incremento, (d), se ingresa el tiempo de incremento entre los tiempos de inicio y fin de la simulación, se recomienda un incremento de 50 a 100 días, aunque el programa recomienda el incremento durante la ejecución del módulo.

Dentro de la simulación se trabajan con un número de perfiles que dan las concentraciones en la zona vadosa en varios tiempos durante la simulación e incluso la configuración de la lente, tal es así que requiere: el número de perfiles y los tiempos en días.

Además se utilizan pozos de observación cuyo número no debe ser mayor de 6 y deben incluir las concentraciones del contaminante para la modelización del TSGPLUME, es necesario ingresar su ubicación en metros en el eje de coordenadas X que debe estar a lo largo de la dirección del flujo de agua y en el eje de coordenadas Y perpendicular al X.

Simulation Parameters

SIMULATION CONTROL PARAMETERS

Data file: C:\HSSM\X2BT.DAT OK

Enable range checking Cancel

Radius of NAPL lens source (m) 2.000

Radius multiplication factor 1.001

Max NAPL saturation in NAPL lens3260

Simulation ending time (d) 2500.

Maximum solution time step (d) 20.00

Minimum time between printed time steps (d) 1.000

OILENS Simulation ending criterion

User-specified time

NAPL lens spreading stops

Max contaminant mass flux into aquifer

Contaminant leached from lens

Fraction of mass remaining 1.000E-01

NAPL LENS PROFILES

Enter time (d) for each of up to 10 profiles

1	25.00
2	50.00
3	75.00
4	100.0
5	125.0
6	150.0
7	200.0
8	
9	
10	

Number of profiles 7

HSSM-T MODEL PARAMETERS

Percent max. contam't radius (%) 101.0

Minimum output conc'n (mg/L) 1.000E-02

Beginning time (d) 100.0

Ending time (d) 5000.

Time increment (d) 50.00

RECEPTOR WELL LOCATIONS

Enter coordinates for each of up to 6 wells

	X (m)	Y (m)
1	25.00	.0000
2	50.00	.0000
3	75.00	.0000
4	100.0	.0000
5	125.0	.0000
6	150.0	.0000

Number of wells 6

Figura 16 Recuadro de los Parámetros de Simulación

3.3.3 MODULOS HSSM-KO, TSG-PLUME Y RESULTADOS GRAFICOS

Una vez ingresados los datos para cada uno de los componentes del modelo, es posible ejecutar el módulo HSSM-KO que comprende dos componentes el KOPT y el OILENS, el primero simula el comportamiento del hidrocarburo en la zona vadosa y el segundo modeliza el comportamiento del contaminante cuando ha alcanzado la tabla de agua.

Los archivos de salida generados son tablas y curvas, de manera esquemática se presenta en la tabla 4 el contenido ya sea cálculos, gráficas o resúmenes de cada tabla generada en el programa:

TABLA 4 ARCHIVOS DE SALIDA DEL MODULO HSSM-KO

Título de la Tabla	Contenido
Datos de entrada	Selección de impresión de datos de entrada Parámetros calculados directamente de los datos de entrada. Curvas de presión capilar agua / aire y LNAPL/ aire usadas en el modelo.
Ubicación del frente de crudo	Posición del frente del NAPL durante la simulación.
Ubicación del constituyente	Posición del constituyente químico de interés durante la simulación
Descripción de la lente	Descripción de la lente NAPL durante la simulación.
Contaminantes acuosos	Descripción de la extensión de contaminantes acuosos durante la simulación.
Perfil de saturación y concentración	Variación con la profundidad de las saturaciones y concentraciones en la zona vadosa en un tiempo especificado por el usuario.
Perfil radial a través de la lente	Variación con los radios del tope y base del OILENS en un tiempo especificado por el usuario.
Post - procesamiento KOPT/OILENS	Resumen de la información de la simulación.
Información del HSSM	Información de las técnicas numéricas usadas en la simulación.

Fuente: The Hydrocarbon Spill Screening Model. Volumen 1". EPA

Este módulo TSG-PLUME ofrece las concentraciones del contaminante en el acuífero en cada uno de los pozos de observación ubicados de acuerdo a las coordenadas dadas en los parámetros de simulación anteriormente especificados.

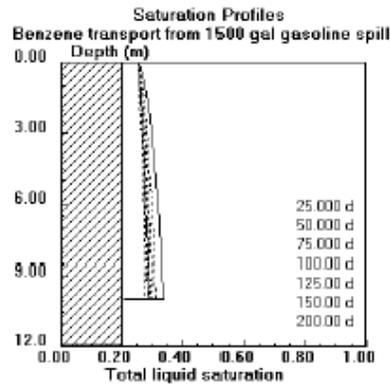
Basándose en el tiempo indicado como punto de observación se obtiene una concentración definida anteriormente.

3.3.4 REPRESENTACION GRAFICA

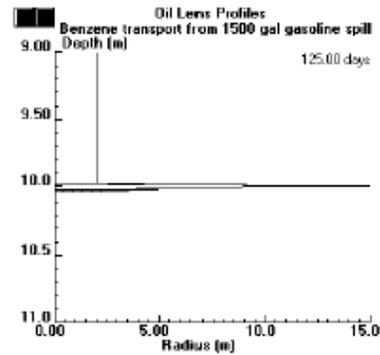
Además de las concentraciones e información que puedan brindar los módulos en forma de tablas, estos ofrecen una visualización de dichos archivos de salida de manera gráfica (figura 17). A continuación se explican cada uno de los gráficos mostrados en el programa.

- Perfiles de saturación muestran las saturaciones existentes en la zona vadosa a medida que pasa el tiempo con respecto a la profundidad. La región rayada es la saturación de agua especificada en los datos hidrogeológicos, el resto de curvas corresponden a las saturaciones desde los últimos días hasta los primeros.
- Perfiles de las lentes del NAPL muestra el comportamiento de la lente con respecto al tiempo, dos ejes cortan esta gráfica, la horizontal que representa la tabla de agua y la vertical que representa la contaminación en la zona vadosa debido a la fuente contaminante. La zona rayada indica la región de la zona vadosa y saturada donde existe NAPL residual.
- Curva del flujo de masa contaminante representa el flujo de masa del contaminante con respecto al tiempo especificado en el módulo HSSM-T, si de acuerdo a dichas condiciones, la curva presenta un efecto cola, eso indica que la caída del flujo de masa con respecto al tiempo fue truncada.
- Curva del Radio del NAPL, esta curva muestra el radio de la lente en función del tiempo, esta curva tenderá a un valor límite, se acotará.
- Balance de Masa del contaminante en la lente del NAPL muestra la cantidad de contaminante químico de interés dentro de la lente del NAPL con respecto al tiempo y también muestra la masa que se ha disuelto en el acuífero.

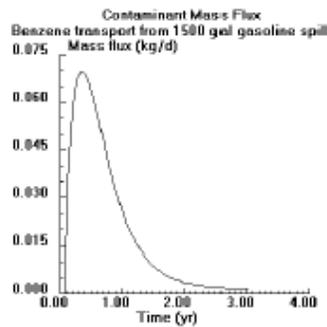
- Curva de concentración en los receptores es un juego de curvas que muestran las concentraciones en los pozos de observación de acuerdo al tiempo.



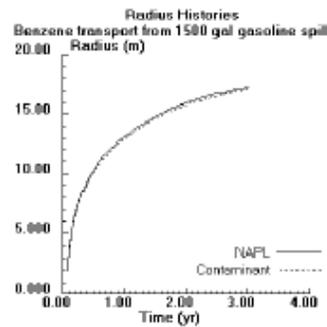
Perfiles de Saturación Típica



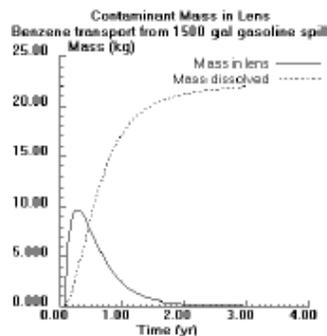
Perfil de la lente del NAPL



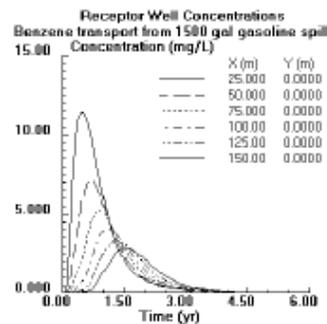
Curva de Flujo de Masa del Contaminante



Curva del Radio de la lente del NAPL



Balance de masa del contaminante NAPL



Curvas de concentración en los receptores

Figura 17 Resultados Gráficos del Programa HSSM-WINDOWS

3.3.5 MODELIZACION DEL PROBLEMA

De acuerdo a las características del área de estudio establecido en este problema y a los datos obtenidos de las muestras en los sondeos de observación, se ha podido complementar los requisitos para la modelización con el programa HSSM-WIN. Las propiedades del suelo se mantienen constantes, ya que se trabaja con un medio homogéneo, en cuanto al acuífero sus características provenientes de los sondeos muestran un comportamiento similar en toda el área de estudio, otra fuente de información corresponde a la base de datos que adjunta el programa de simulación.

3.3.5.1 Parámetros Generales del Problema

El primer caso a tratar es el transporte de benceno debido a la ruptura de un tanque de gasolina en un cubeto, se desea obtener los archivos de salida por lo que se activan los módulos KOPT, OILENS y TSGPLUME. (Figura 18)

Para el segundo caso es el transporte de los BTEX, específicamente del tolueno, los archivos de salida serán creados y los módulos ejecutados, manteniendo ciertas propiedades del acuífero y de la gasolina, únicamente cambia las propiedades del constituyente químico de interés. (Figura 19)

El tercer caso es el transporte de etilbenceno, al igual que en los casos anteriores se selecciona la opción de crear los archivos de salida y de que el programa ejecute los tres módulos, utilizando las características del constituyente correspondiente. (Figura 20)

General Model Parameters

Run Titles:

Benceno en tanques de gasolina
 1.81% en peso de benceno en gasolina
 Suelo arenoso (70%)

OK
 Cancel

Printing switches

Create output files
 Echo print data only
 Run models

Module switches

Run KOPT
 Run OILENS
 Write HSSM-T input file

File names

NOTE: These filenames will be used if the data file is saved under a new name with the "SaveAs" option.

C:\HSSMWIN\BENCENO.DAT	HSSM-KO input file
C:\HSSMWIN\BENCENO.HSS	HSSM-KO output file
C:\HSSMWIN\BENCENO.PL1	HSSM-KO plot file 1
C:\HSSMWIN\BENCENO.PL2	HSSM-KO plot file 2
C:\HSSMWIN\BENCENO.PL3	HSSM-KO plot file 3
C:\HSSMWIN\BENCENO.PMI	HSSM-T input file
C:\HSSMWIN\BENCENO.TSG	HSSM-T output file
C:\HSSMWIN\BENCENO.PMP	HSSM-T plot file

Figura 18 Parámetros Generales para el Benceno

General Model Parameters

Run Titles:

Tolueno en tanque de gasolina
 12.265% en peso de Tolueno
 Suelo arenoso (70%)

OK
 Cancel

Printing switches

Create output files
 Echo print data only
 Run models

Module switches

Run KOPT
 Run OILENS
 Write HSSM-T input file

File names

NOTE: These filenames will be used if the data file is saved under a new name with the "SaveAs" option.

C:\HSSMWIN\TOLUENO.DAT	HSSM-KO input file
C:\HSSMWIN\TOLUENO.HSS	HSSM-KO output file
C:\HSSMWIN\TOLUENO.PL1	HSSM-KO plot file 1
C:\HSSMWIN\TOLUENO.PL2	HSSM-KO plot file 2
C:\HSSMWIN\TOLUENO.PL3	HSSM-KO plot file 3
C:\HSSMWIN\TOLUENO.PMI	HSSM-T input file
C:\HSSMWIN\TOLUENO.TSG	HSSM-T output file
C:\HSSMWIN\TOLUENO.PMP	HSSM-T plot file

Figura 19 Parámetros Generales para el Tolueno

General Model Parameters

Run Titles:

Etibenceno en tanque de gasolina

1.595% en peso de etibenceno en la gasolina

Suelo arenoso (70%)

Printing switches:

Create output files

Echo print data only

Run models

Module switches:

Run KOPT

Run OILENS

Write HSSM-T input file

File names:

NOTE: These filenames will be used if the data file is saved under a new name with the "SaveAs" option.

C:\HSSMWIN\ETILBEN.DAT	HSSM-KO input file
C:\HSSMWIN\ETILBEN.HSS	HSSM-KO output file
C:\HSSMWIN\ETILBEN.PL1	HSSM-KO plot file 1
C:\HSSMWIN\ETILBEN.PL2	HSSM-KO plot file 2
C:\HSSMWIN\ETILBEN.PL3	HSSM-KO plot file 3
C:\HSSMWIN\ETILBEN.PMI	HSSM-T input file
C:\HSSMWIN\ETILBEN.TSG	HSSM-T output file
C:\HSSMWIN\ETILBEN.PMP	HSSM-T plot file

Figura 20 Parámetros Generales para el Etibenceno

El cuarto y último caso es el transporte del xileno-o, cuyas propiedades de partición y solubilidad fueron obtenidas de los sondeos realizados, se realiza el mismo procedimiento que en los casos anteriores. (Figura 21)

General Model Parameters

Run Titles:

Xileno en tanque de gasolina

1.77% en peso de xileno en la gasolina

Suelo arenoso (70%)

Printing switches:

Create output files

Echo print data only

Run models

Module switches:

Run KOPT

Run OILENS

Write HSSM-T input file

File names:

NOTE: These filenames will be used if the data file is saved under a new name with the "SaveAs" option.

C:\HSSMWIN\XILENO.DAT	HSSM-KO input file
C:\HSSMWIN\XILENO.HSS	HSSM-KO output file
C:\HSSMWIN\XILENO.PL1	HSSM-KO plot file 1
C:\HSSMWIN\XILENO.PL2	HSSM-KO plot file 2
C:\HSSMWIN\XILENO.PL3	HSSM-KO plot file 3
C:\HSSMWIN\XILENO.PMI	HSSM-T input file
C:\HSSMWIN\XILENO.TSG	HSSM-T output file
C:\HSSMWIN\XILENO.PMP	HSSM-T plot file

Figura 21 Parámetros Generales del Xileno

3.3.5.2 Parámetros Hidrogeológicos del Problema

Como valores estándares en los tres casos se consideran la viscosidad dinámica del agua (cp), la densidad del agua (g/cm^3), la tensión superficial del agua (dina/cm) y la permeabilidad relativa máxima del agua durante la infiltración, todos estos datos son recomendados en el manual guía del programa HSSM para Windows.

Los parámetros hidrogeológicos serán los mismos para todos los casos expuestos ya que son características de la zona de estudio y no variarán durante todo el proceso, excepto en la tasa de recarga promedio que varía para cada BTEX. Dichos datos se muestran en la tabla 5.

TABLA 5 PARAMETROS HIDROGEOLÓGICOS DEL PROBLEMA

Parámetro	Valor
Densidad el agua (g/cm^3)	1
Viscosidad del agua (cp)	1
Tensión superficial del agua (dina/cm)	65
K_{rw} máxima durante la infiltración	0,5000
Modelo de la Curva de Presión Capilar	Brooks & Corey
Saturación residual de agua	0,1252
Valor de Lamda (λ)	0,4700
Valor de la altura de aire (h_{ce})	0,1503

En las figuras 22, 23, 24, 25 se muestran los parámetros hidrogeológicos para cada constituyente químico de interés, los cuales presentan diferentes valores de recarga

Hydrologic Parameters

HYDROLOGIC PROPERTIES

Water dynamic viscosity (cp) 1

Water density (g/cm³) 1

Water surf. tension (dyne/cm) 65

Maximum krw during infiltration 0.5

Recharge

Average recharge rate (m/d) value: 0.00169863

Saturation

Capillary pressure curve model

Brooks and Corey

van Genuchten

Brooks and Corey's lambda 0.47

Air entry head (m) 0.1503

Residual water saturation 0.1252

van Genuchten's alpha (1/m) 0

van Genuchten's n 0

Data file: C:\HSSMWIN\BENCENO.DAT

Enable range checking

OK Cancel

POROUS MEDIUM PROPERTIES

Sat'd vert. hydraulic cond. (m/d) 2.86992

Ratio of horz/vert hyd. cond. 1.098

Porosity 0.38

Bulk density (g/cm³) 1.7

Aquifer saturated thickness (m) 3

Depth to water table (m) 1.8

Capillary thickness parameter (m) 0.01

Groundwater gradient (m/m) 0.0125

Longitudinal dispersivity (m) 7.6

Transverse dispersivity (m) 0.76

Vertical dispersivity (m) 0.076

Figura 22 Parámetros Hidrogeológicos para el Benceno

TABLA 6 PARAMETROS HIDROGEOLÓGICOS PROPIEDADES DEL SUELO

Propiedad	Valor
Conductividad hidráulica vertical saturada	2,8699
Tasa de conductividad hidráulica horizontal/ vertical	1,0980
Porosidad	0,3800
Densidad volumétrica (g/cm ³)	1,7000
Espesor del acuífero saturado (m)	3,000
Profundidad de la Tabla de agua (m)	1,8000
Parámetro de espesor capilar	0,0100
Gradiente del acuífero	0,0125
Dispersividad longitudinal (m)	7,6000
Dispersividad transversal	0,7600
Dispersividad vertical	0,0760

HYDROLOGIC PROPERTIES		Data file:	OK
Water dynamic viscosity (cp)	1	C:\HSSMWIN\TOLUENO.DAT	Cancel
Water density (g/cm ³)	1	<input checked="" type="checkbox"/> Enable range checking	
Water surf. tension (dyne/cm) . . .	65		
Maximum krw during infiltration . . .	0.5		
Recharge		POROUS MEDIUM PROPERTIES	
<input checked="" type="radio"/> Average recharge rate (m/d)	value:	Sat'd vert. hydraulic cond. (m/d) . .	2.86992
<input type="radio"/> Saturation	0.00369863	Ratio of horz/vert hyd. cond.	1.098
Capillary pressure curve model		Porosity	0.38
<input checked="" type="radio"/> Brooks and Corey		Bulk density (g/cm ³)	1.7
<input type="radio"/> van Genuchten		Aquifer saturated thickness (m) . . .	3
Brooks and Corey's lambda	0.47	Depth to water table (m)	1.8
Air entry head (m)	0.1503	Capillary thickness parameter (m) . .	0.01
Residual water saturation	0.1252	Groundwater gradient (m/m)	0.0125
van Genuchten's alpha (1/m)	0	Longitudinal dispersivity (m)	7.6
van Genuchten's n	0	Transverse dispersivity (m)	0.76
		Vertical dispersivity (m)	0.076

Figura 23 Parámetros Hidrogeológicos para el Tolueno

HYDROLOGIC PROPERTIES		Data file:	OK
Water dynamic viscosity (cp)	1	C:\HSSMWIN\TOLUENO.DAT	Cancel
Water density (g/cm ³)	1	<input checked="" type="checkbox"/> Enable range checking	
Water surf. tension (dyne/cm) . . .	65		
Maximum krw during infiltration . . .	0.5		
Recharge		POROUS MEDIUM PROPERTIES	
<input checked="" type="radio"/> Average recharge rate (m/d)	value:	Sat'd vert. hydraulic cond. (m/d) . .	2.86992
<input type="radio"/> Saturation	0.00369863	Ratio of horz/vert hyd. cond.	1.098
Capillary pressure curve model		Porosity	0.38
<input checked="" type="radio"/> Brooks and Corey		Bulk density (g/cm ³)	1.7
<input type="radio"/> van Genuchten		Aquifer saturated thickness (m) . . .	3
Brooks and Corey's lambda	0.47	Depth to water table (m)	1.8
Air entry head (m)	0.1503	Capillary thickness parameter (m) . .	0.01
Residual water saturation	0.1252	Groundwater gradient (m/m)	0.0125
van Genuchten's alpha (1/m)		Longitudinal dispersivity (m)	7.6
van Genuchten's n		Transverse dispersivity (m)	0.76
		Vertical dispersivity (m)	0.076

Figura 24 Parámetros Hidrogeológicos para el Etilbenceno

HYDROLOGIC PROPERTIES

Data file:

Enable range checking

Water dynamic viscosity (cp) 1

Water density (g/cm³) 1

Water surf. tension (dyne/cm) 65

Maximum krw during infiltration 0.5

Recharge

Average recharge rate (m/d) value: 0.00657534

Saturation

Capillary pressure curve model

Brooks and Corey

van Genuchten

Brooks and Corey's lambda 0.47

Air entry head (m) 0.1503

Residual water saturation 0.1252

van Genuchten's alpha (1/m)

van Genuchten's n

POROUS MEDIUM PROPERTIES

Sat'd vert. hydraulic cond. (m/d) 2.86992

Ratio of horz/vert hyd. cond. 1.098

Porosity 0.38

Bulk density (g/cm³) 1.7

Aquifer saturated thickness (m) 3

Depth to water table (m) 1.8

Capillary thickness parameter (m) 0.01

Groundwater gradient (m/m) 0.0125

Longitudinal dispersivity (m) 7.6

Transverse dispersivity (m) 0.76

Vertical dispersivity (m) 0.076

Figura 25 Parámetros Hidrogeológicos para el Xileno

3.3.5.3 Parámetros del Hidrocarburo del Problema

El combustible a trabajar será la gasolina y los constituyentes químicos serán analizados en el siguiente orden: benceno, tolueno, etilbenceno y xileno. Las propiedades de cada BTEX son mostradas en las tablas 7, 8, 9 y 10, y su respectiva presentación en el programa en las figuras 26, 27, 28, 29; estos datos provienen de muestras analizadas en laboratorio, de información tabula en la bibliografía especializada y de los cálculos que se muestran en este apartado.

A continuación se muestran las propiedades de la gasolina con que se trabajarán en todos los casos, de igual forma aparecen las condiciones de liberación del combustible, en este caso, se trata de la ruptura de un tanque cuyo volumen es conocido, de igual forma el área que ha contaminado, además de la profundidad de la zona contaminada en metros.

TABLA 7 PROPIEDADES DE LA GASOLINA

Propiedad	Valor
Densidad de la gasolina (g/cm ³)	0,750
Viscosidad dinámica de la gasolina (cp)	0,450
Solubilidad del hidrocarburo (mg/L)	100
Saturación residual de la gasolina en el acuífero	0,150
Saturación residual de la gasolina en la zona vadosa	0,050
Coefficiente de partición suelo / agua (L/Kg)	0,589
Tensión superficial de la gasolina (dina /cm)	26
Liberación de la Gasolina	Volumen / área especificada
Volumen / área (m)	267,380
Profundidad de la base de la zona con gasolina (m)	1,820

TABLA 8 PROPIEDADES DEL BENCENO

Propiedad	Valor
Concentración inicial en la gasolina	13575
Coefficiente de partición gasolina / agua	311
Coefficiente de partición suelo / agua (L/Kg)	0.589
Solubilidad del constituyente (mg/L)	1750

Hydrocarbon Phase Parameters

HYDROCARBON PHASE PROPERTIES

Data file: C:\HSSMWIN\BENCENO.DAT

Enable range checking

HYDROCARBON RELEASE

Specified flux

Specified volume/area

Constant head ponding

Variable ponding after const head period

NAPL density (g/cm³) 0.75

NAPL dynamic viscosity (cp) 0.45

Hydrocarbon solubility (mg/L) 100

Aquifer residual NAPL saturation 0.15

Vadose zone residual NAPL sat'n 0.05

Soil/water partition coeff. (L/kg) 0.589

NAPL surface tension (dyne/cm) 26

DISSOLVED CONSTITUENT PROPERTIES

Dissolved constituent exists

Initial constit. conc. in NAPL 13575

NAPL/water partition coefficient 311

Soil/water partition coeff. (L/kg) 0.589

Constituent solubility (mg/L) 1750

Constit. ½-life in aquifer (d) 0.0

NAPL flux (m/d) 0

Beginning time (d) 0

Ending time (d) 0

Ponding depth (m) 0

NAPL volume/area (m) 267.38

Lower depth of NAPL zone (m) 1.22

OK Cancel

Figura 26 Parámetros del Hidrocarburo para el Benceno

TABLA 9 PROPIEDADES DEL TOLUENO

Propiedades	Valor
Concentración inicial en la gasolina	91987,5
Coefficiente de partición gasolina / agua	311
Coefficiente de partición suelo / agua (L/Kg)	1,82
Solubilidad del constituyente (mg/L)	526

Hydrocarbon Phase Parameters

HYDROCARBON PHASE PROPERTIES

Data file: C:\HSSMWIN\TOLUENO.DAT

Enable range checking

HYDROCARBON RELEASE

Specified flux

Specified volume/area

Constant head ponding

Variable ponding after const head period

NAPL density (g/cm³) 0.75

NAPL dynamic viscosity (cp) 0.45

Hydrocarbon solubility (mg/L) 10.0

Aquifer residual NAPL saturation 0.15

Vadose zone residual NAPL sat'n 0.05

Soil/water partition coeff. (L/kg) 1.82

NAPL surface tension (dyne/cm) 26

DISSOLVED CONSTITUENT PROPERTIES

Dissolved constituent exists

Initial constit. conc. in NAPL 91987

NAPL/water partition coefficient 311

Soil/water partition coeff. (L/kg) 1.82

Constituent solubility (mg/L) 526

Constit. ½-life in aquifer (d) 0.0

NAPL flux (m/d) 0

Beginning time (d) 0

Ending time (d) 0

Ponding depth (m) 0

NAPL volume/area (m) 267.38

Lower depth of NAPL zone (m) 1.22

OK Cancel

Figura 27 Parámetros del Hidrocarburo para el Tolueno

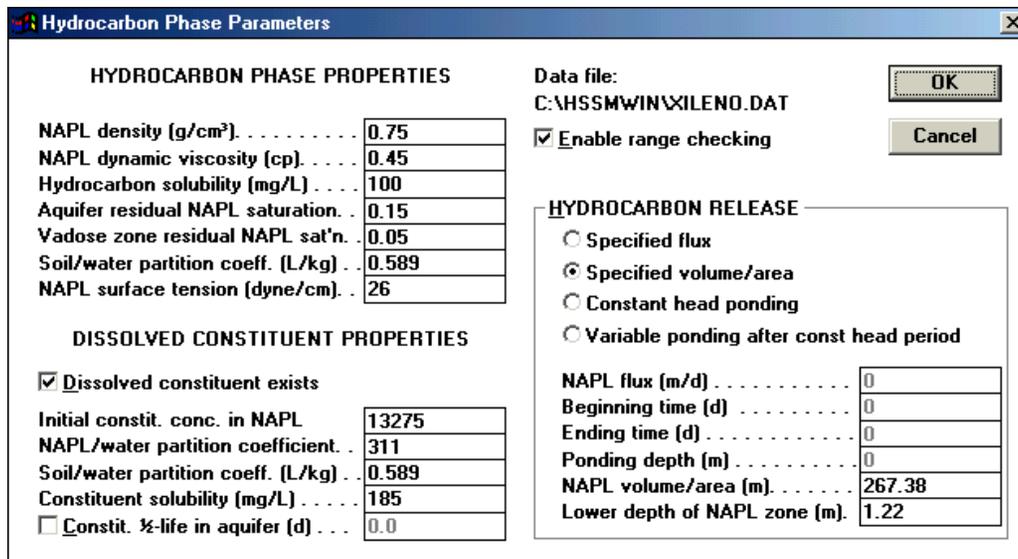
TABLA 10 PROPIEDADES DEL ETILBENCENO

Propiedad	Valor
Concentración inicial en la gasolina	11962.5
Coefficiente de partición gasolina / agua	311
Coefficiente de partición suelo / agua (L/Kg)	3.63
Solubilidad del constituyente (mg/L)	169

Figura 28 Parámetros del Hidrocarburo para el Etilbenceno

TABLA 11 PROPIEDADES DEL XILENO

Propiedad	Valor
Concentración inicial en la gasolina	13275
Coefficiente de partición gasolina / agua	311
Coefficiente de partición suelo / agua (L/Kg)	4.07
Solubilidad del constituyente (mg/L)	185



HYDROCARBON PHASE PROPERTIES

NAPL density (g/cm ³)	0.75
NAPL dynamic viscosity (cp)	0.45
Hydrocarbon solubility (mg/L)	100
Aquifer residual NAPL saturation	0.15
Vadose zone residual NAPL sat'n	0.05
Soil/water partition coeff. (L/kg)	0.589
NAPL surface tension (dyne/cm)	26

DISSOLVED CONSTITUENT PROPERTIES

Dissolved constituent exists

Initial constit. conc. in NAPL	13275
NAPL/water partition coefficient	311
Soil/water partition coeff. (L/kg)	0.589
Constituent solubility (mg/L)	185
<input type="checkbox"/> Constit. ½-life in aquifer (d)	0.0

Data file: C:\HSSM\WIN\XILENO.DAT

Enable range checking

HYDROCARBON RELEASE

Specified flux

Specified volume/area

Constant head ponding

Variable ponding after const head period

NAPL flux (m/d)	0
Beginning time (d)	0
Ending time (d)	0
Ponding depth (m)	0
NAPL volume/area (m)	267.38
Lower depth of NAPL zone (m)	1.22

Figura 29 Parámetros del Hidrocarburo para el Xileno

3.3.5.4 Parámetros de Simulación de Problema

El problema se desarrolló por la ruptura de un tanque de gasolina en un cubeto, se simulará la ruptura a partir del año 18 de vida del establecimiento, es decir que hasta su desmantelación habrán transcurrido dos años (730 días) de liberación, se estudiarán las concentraciones alcanzadas en la actualidad, cubriendo un tiempo de 7 años desde la liberación, como se muestra en la tabla a continuación.

TABLA 12 DATOS DE SIMULACIÓN DEL PROBLEMA

Parámetro	Valor
Radio de la lente de hidrocarburo desde la fuente (m)	2
Factor de multiplicación del radio	1,001
Saturación máxima de la gasolina en la lente	0,5
Tiempo de simulación final (d)	1725
Paso de tiempo máximo para la solución (d)	25
Tiempo mínimo entre pasos de tiempo y chequeo de balances de masas	0,1

Criterio de finalización de la simulación-OILENS	Flujo máximo
Parámetros del HSSM-T	
Porcentaje máximo de radio contaminante	101
Concentración mínima de salida (mg/L)	0,001
Tiempo inicial (d)	10
Tiempo final (d)	2455
Tiempo de incremento (d)	10
Perfiles de la lente de gasolina	10
Primer perfil (d)	150
Segundo perfil (d)	135
Tercer perfil (d)	120
Cuarto perfil (d)	105
Quinto perfil (d)	90
Sexto perfil (d)	75
Séptimo perfil (d)	60
Octavo perfil (d)	45
Noveno perfil (d)	30
Décimo perfil (d)	15
Pozos de observación	6
Primer pozo (m; m)	(25; 0)
Segundo pozo (m; m)	(50; 0)
Tercer pozo (m; m)	(75; 0)
Cuarto pozo (m; m)	(100; 0)
Quinto pozo (m; m)	(125; 0)
Sexto pozo (m; m)	(150; 0)

Simulation Parameters

SIMULATION CONTROL PARAMETERS

Radius of NAPL lens source (m) . . . 2

Radius multiplication factor 1.001

Max NAPL saturation in NAPL lens . . . 0.5

Simulation ending time (d) 1725

Maximum solution time step (d) 20

Minimum time between printed time steps (d) 0.1

OILENS Simulation ending criterion

User-specified time

NAPL lens spreading stops

Max contaminant mass flux into aquifer

Contaminant leached from lens

Fraction of mass remaining 0.01

HSSM-T MODEL PARAMETERS

Percent max. contam't radius (%) . . . 101

Minimum output conc'n (mg/L) 0.001

Beginning time (d) 10

Ending time (d) 2455

Time increment (d) 25

Data file: C:\HSSMWIN\BENCENO.DAT

Enable range checking

NAPL LENS PROFILES

1	150
2	135
3	120
4	105
5	90
6	75
7	60
8	45
9	30
10	15

Enter time (d) for each of up to 10 profiles

Number of profiles 10

RECEPTOR WELL LOCATIONS

	X (m)	Y (m)
1	25	0
2	50	0
3	75	0
4	100	0
5	125	0
6	150	0

Enter coordinates for each of up to 6 wells

Number of wells 6

OK

Cancel

Figura 30 Parámetros de Simulación del Problema

3.3.6 RESULTADOS GRAFICOS DEL PROBLEMA

Una vez ejecutados los módulos se obtienen los gráficos de la modelización, el primer gráfico representa las saturaciones existentes en la zona vadosa con respecto al tiempo del constituyente químico de interés a medida que se avanza en profundidad. Lo primero a destacar es la gran región rayada en todas las gráficas de perfiles de saturación para los BTEX, esto se debe a que ese valor de saturación asume el programa de acuerdo a los datos de recarga y al modelo de Brooks & Corey.

El segundo gráfico muestra una secuencia del comportamiento de la lente con respecto al tiempo y se puede observar el avance en la zona vadosa caracterizado por una línea vertical perpendicular a la tabla de agua, note además que el radio a la que se encuentra esta línea es el ingresado en los parámetros de simulación (2 metros). El avance de la lente una vez que

llega a la lámina de agua es detallado cada 15 días y su comportamiento creciente es similar en todos los BTEX, cabe recalcar que la curva bajo y sobre la lente cuya área esta rayada indica la región de la zona vadosa y saturada donde permanece el combustible residual que debido a fuerzas capilares queda atrapado entre los poros del medio.

La curva del flujo de masa contaminante es la tercera gráfica y representa la masa de hidrocarburo con respecto al tiempo que es transportado en el acuífero. El valor máximo alcanzado en esta curva representa el máximo incremento del radio de la lente en el acuífero, el descenso ocurre por la lixiviación del contaminante en el acuífero, hay que recalcar el efecto cola que tiene esta curva debido al remanente de hidrocarburo en la zona vadosa que termina de llegar al acuífero.

La curva del radio del combustible muestra el incremento del radio con respecto al tiempo durante el avance de la lente, en la mayoría de los casos tiende a un límite, se estabiliza hasta un radio específico, es la máxima capacidad del combustible al extenderse por la superficie del acuífero.

La quinta gráfica es el balance de masa del contaminante, muestra la masa del constituyente químico y del combustible dentro de la lente en función del tiempo. A medida que la masa de la lente disminuya, así mismo la masa del contaminante incrementa en el acuífero, la cantidad y rapidez dependerá de las propiedades del constituyente químico.

Por último se tiene la curva de concentración de los receptores que permite predecir la concentración del constituyente químico en cada pozo de observación dispuestos por el usuario en función del tiempo. Algunos de los gráficos pueden estar truncados debido a que las trazas de ese contaminante en el medio han desaparecido esto probablemente ocurra por la alta solubilidad en el agua que tenga el constituyente químico. Todos los resultados gráficos del programa se encuentran en los anexos.

3.4 ANALISIS DE LOS RESULTADOS

Para los primeros gráficos (ver anexos) sobre los perfiles de saturación de los BTEX, se destaca que la invasión del hidrocarburo en la zona vadosa es vertiginosa, ya que en los primeros quince días de ocurrido el derrame, la saturación total de fluidos sube de 0,44 a 0,52 (0,08%), pero a medida que se llega al quinto mes, su saturación crece en la misma proporción (0,08%) por mayor cantidad de días (135 días). Para los cuatro constituyentes, el comportamiento es similar con un avance al final de los 150 días más alto para el xileno, ya que el porcentaje de saturación supera el 0.6%.

Los perfiles de la lente del hidrocarburo muestran el avance continuo durante esos 5 meses, los primeros 15 días la lente es de 5 metros de radio; a los 3 meses de ocurrido el derrame, el radio es de 8,6 metros, y llegado los 5 meses supera los 9,5 metros.

En cuanto a las dimensiones del combustible residual en la zona vadosa y en la zona de saturación, a medida que la lente avanza, en longitud y se acorta en vertical, parte de la zona saturada y vadosa que estuvo ocupada por la lente queda saturada de hidrocarburo que debido a las fuerzas capilares del medio no puede desplazarse.

Al primer mes, el radio del hidrocarburo residual en la zona saturada es de 4,25 metros poco a poco la zona ocupada por el hidrocarburo móvil deja el rastro de su avance en el acuífero tal es así que al quinto mes el radio del combustible residual es de 7,5 metros aproximadamente.

La curva del comportamiento del radio de la lente es similar tanto para el combustible como para los BTEX, este radio crece rápidamente antes del primer año con un valor de 12 metros, para luego alcanzar el límite a los 4 años aproximadamente con un radio de 14 metros.

En la tercera gráfica, el crecimiento rápido del flujo de masa del benceno se debe al rápido crecimiento el radio de la lente alcanzando 0,049 Kg/día antes del primer año (216 días), la

lixiviación del benceno en el acuífero es alto entre el primer y tercer año, el efecto cola ocurre en el 4° año. La máxima cantidad de flujo de masa en el benceno aparece a los 182 días siendo de 0,048 Kg/ día, para el tolueno es de 0,47 Kg/ día a los 219 días. En el caso del etilbenceno, la máxima cantidad de masa es de 0,525 Kg/día en 182 días y finalmente para el xileno, ocurre en 146 días siendo su flujo máximo de 0,072 Kg/ día.

La curva de balance de masas recalca una vez más el proceso de liberación del benceno en el acuífero a partir del primer año donde existe una igualdad de masa disuelta y masa en la lente de 14 Kg., después el comportamiento del benceno es creciente hasta alcanzar una cota de 30 Kg., de masa liberada, en cambio la masa de combustible se reduce a cero.

Para el tolueno esta igualdad de masas ocurre más pronto a los 292 días con 85 Kg., después de los 6 años todo el constituyente ha sido liberado, la masa total de tolueno en el acuífero es de 200 kilogramos.

En el caso del etilbenceno, la máxima cantidad de combustible es de 20Kg., durante los 73 días para luego decrecer hasta los 292 días con una masa de 11 Kg., es en este punto donde la masa disuelta supera en los días siguientes a la del combustible hasta superar las 3 años con una masa aproximada de 23 kilogramos. En ultimo punto tenemos al xileno cuyo comportamiento es similar al del etilbenceno en cuanto a las cantidades liberadas con la excepción que a los tres años la masa liberada es de 28 kilogramos aproximadamente.

Finalmente, para las concentraciones en los sondeos de observación, tan solo hasta el pozo a 100 metros de la fuente se podrán registrar trazas del benceno hasta el cuarto año. En cuanto al pozo de 25 metros su concentración alcanza el máximo de 20 mg/L después del primer año para decrecer hasta el cuarto; para el sondeo a 50 metros su máximo será de 9 mg/L; para los otros dos últimos sondeos de 75 y 100 metros, sus concentraciones son de 3 mg/L y 0,5 mg/L respectivamente, pasado los tres años y medio.

El sondeo con mayor historia en cuanto a concentraciones del tolueno será el de 25 metros que registra unos 65 mg/L como valor máximo a los 2 años de ocurrido el derrame, y

perderse lentamente las concentraciones de tolueno a los seis años donde el pozo a 50 metros de la fuente presenta una concentración de 22,5 mg/L.

En el caso del etilbenceno se aprecia que en el sondeo de observación a 25 metros la máxima concentración es de 20 mg/L en primer del derrame, para descender hasta los 3 años manteniendo una concentración elevada hasta dicho tiempo, ocurre una situación diferente en los otros pozos, como por ejemplo: ya que a 50 metros de la fuente tiene una concentración máxima de 8 mg/L, en los otros sondeos las concentraciones bajan y se vuelven pobres para el análisis. Para el xileno, su caso es similar y no se aprecian concentraciones pasados los 75 metros de la fuente, el pozo a 25 metros indica un máximo que ocurre al año y medio con 20 mg/L.

4 VALORIZACION DEL RIESGO

Actualmente, la tendencia general es hacia una legislación ambiental que controle el riesgo. A efectos prácticos, esta tendencia se traduce en que ya son muchos los países que han introducido el análisis del riesgo como método legal para decidir cuando un suelo está o no está contaminado. El análisis de riesgos tiene como consecuencia inmediata el que no existan valores legales a partir de los cuales un terreno se considere como contaminado, independientemente de su naturaleza y de su uso.

En todo caso lo que algunas legislaciones están adoptando son valores de referencia por debajo de los cuales el terreno se considera como no contaminado y ya no sería necesario proseguir con ningún tipo de estudios. Estos valores se establecen para cada uno de los diferentes tipos de suelo, desde un tipo de vista geoquímico, existentes en el territorio. En aquellos casos en los que los valores obtenidos sobrepasen estos valores de referencia será necesario realizar un análisis del riesgo antes de determinar si se considera el terreno como contaminado o no contaminado.

Las metodologías de análisis del riesgo exigen tener en cuenta la exposición real de aquello que se quiere proteger. Ello implica que es necesario, por un lado, definir el objeto de protección que pueden ser, por ejemplo, las personas o el ecosistema; pero también requiere definir y tener en cuenta el uso a que va a destinarse el terreno. En efecto no es lo mismo que el terreno se vaya a dedicar al cultivo que a un uso residencial. En el primer caso el riesgo es que los contaminantes pasen a los cultivos y de ellos, por ingestión, a las personas; mientras que en el caso de un uso residencial el riesgo puede ser bien por inhalación o por ingestión directa, en el caso de los niños pequeños que jueguen con el suelo.

El resultado más inmediato de este tipo de enfoque, en lo que al proyecto se refiere se traduce en el hecho de que no existiría un valor inicial a partir del cual se pudiese considerar el terreno como contaminado. Sería necesario definir un uso, en este caso industrial o residencial, y el objeto de protección, en este caso la salud de las personas. Una

vez fijadas estas premisas sería necesario calcular las dosis de exposición que recibirían las personas a partir del contenido de cada uno de los compuestos contaminantes presentes en el suelo. A partir de esta estimación de la dosis, se procedería a evaluar el riesgo y a

Una vez realizados los estudios del avance del contaminante, es necesario conocer el riesgo que estas concentraciones presentes en el agua y el suelo pueden ocasionar a los seres vivos. Actualmente existen muchos procedimientos que cumplen este fin, los más importantes son los ecotoxicológicos, estos procesos suponen conocer el alcance del contaminante, es decir que conocen el efecto global de los contaminantes presentes en los seres vivos y su biodisponibilidad.

4.1 ESQUEMA GENERAL DE LA VALORACION DE RIESGO

El esquema general de la valorización de riesgos consiste en aplicar diferentes pasos que conduzcan a la toma de decisiones adecuadas para la remediación de la contaminación, estos pasos son: la evaluación de los efectos, evaluación de la exposición y caracterización de riesgos. Dentro de la evaluación de los efectos existen dos puntos importantes que son: la identificación del peligro y la estimación de la relación dosis/ respuesta.

El hecho de identificar el peligro, se trata de conocer las propiedades intrínsecas de la sustancia, esto comprende, tener conocimiento de su toxicidad, bioacumulación y persistencia. Cuando se estima la relación dosis/ respuesta, se estima el nivel de exposición y la gravedad de la afección, es decir que permite conocer la concentración máxima que puede haber en el medio sin que se produzca ningún efecto adverso, esto es conocido como Predicted no-Effect Concentration, PNEC.

El segundo paso es la evaluación de la exposición que se realiza utilizando la concentración que aparece en cada compartimiento del medioambiente y se estima mediante la PEC (Predicted Environmental Concentration), usando información sobre la producción, destino, vías de exposición, propiedades físico químicas, entre otras. El tercer paso es la

caracterización del riesgo al obtener el cociente entre la PEC y la PNEC, cuanto mayor sea la PEC, mayor será el riesgo y obviamente el cociente PEC / PNEC más grande.

4.2 EVALUACIÓN DE LOS EFECTOS

El primer paso para la evaluación de los efectos que puede producir una sustancia son los tests de ecotoxicidad que sirven para valorar suelos contaminados y para valorar el medio acuático. Al realizar el primer nivel de valoración en el medio acuático, se debe establecer tres tests estandarizados: un microcrustáceo (*Daphnia Magna*), un alga (*Chlorella vulgaris*) y un pez (*Onchorhynchus mykiss*). Como cada medio presenta flora y fauna diferente, los bioensayos se pueden realizar con especies distintas pero de similar comportamiento a las mencionadas.

Utilizando estos resultados se decide si la información es suficiente o si se necesita realizar más pruebas en la valoración. Se recomienda seleccionar especies representativas del ecosistema que pretendemos valorar, realizar los bioensayos y disponer de un abanico de información toxicológica que de a conocer la variabilidad de los efectos que pueden ser esperados y determinar cual es el nivel máximo (PNEC) que se puede aceptar de un contaminante, con el fin de que el suelo se proteja de efectos adversos a corto y largo plazo.

La fase líquida del suelo es la más importante en la movilidad de los contaminantes y la mejor vía para la biodisponibilidad de muchos compuestos que tienen más poder de producir efectos tóxicos sobre seres vivos.

Las valorizaciones ecotoxicológicas más completas del suelo son las realizadas con muestras de suelo íntegras sobre las cuales se exponen organismos propios del medio como lombrices, plantas o microorganismos y así la valoración del efecto comprende todas las condiciones propias del suelo. Este proceso es conocido como microcosmos.

Un bioensayo es una prueba experimental realizada con un grupo de organismos o una pequeña población. El objetivo de estos ensayos es determinar la relación concentración

dosis / efecto o porcentaje dilución / efecto. Así se puede observar los diferentes efectos existentes que son: agudos, subagudos y crónicos, estos efectos se basan en la selección de un parámetro de expresión que esta en función de la vía de exposición, naturaleza del contaminante y tipo de efecto esperado.

Para la cuantificación de un efecto en los ensayos agudos se utilizan los siguientes niveles:

LC-50 es la concentración capaz de matar al 50% de los individuos expuestos.

EC-50 es la concentración capaz de causar un efecto de inmovilidad que compromete al 50% de los individuos expuestos.

IC-50% es la concentración capaz de inhibir el crecimiento sobre el 50% de la población.

Para la cuantificación de un efecto en los ensayos de cronicidad se utilizan los siguientes niveles:

NOEC es la concentración máxima de exposición que no produce efecto a largo plazo.

LOEC es la concentración más baja, por encima de la NOEC, a la que se observan efectos.

Un bioensayo debe cumplir con los objetivos propuestos, que la especie sea cosmopolita con una alta sensibilidad y cuyo ciclo vital no sea muy variable y corto, con el fin de que su mantenimiento en laboratorio sea fácil y expresiva.

A la hora de seleccionar la prueba adecuada se deben tener en cuenta los siguientes criterios: reproducibilidad, sencillez, sensibilidad y expresividad.

4.3 ESTIMACIÓN DE LA RELACION DOSIS - RESPUESTA

Una vez realizada la valoración ecotoxicológica y obtenido la información adecuada de los PNEC se puede determinar cuales serán las dosis admisibles para el hombre y que en base a sus efectos se consideran dos grandes grupos de contaminantes: los cancerígenos o carcinogénicos y los no cancerígenos o no carcinogénicos.

Para determinar la dosis diaria admisible de las sustancias no carcinogénicas se usan dos parámetros toxicológicos:

NOEL (No Observed Effect Level) es el nivel cuya dosis máxima observada no produce ningún efecto.

LOEL (Lowest Observed Effect Level) es el nivel cuya dosis mínima observada ha producido un efecto.

Para determinar la dosis diaria admisible de las sustancias carcinogénicas se usan dos parámetros toxicológicos:

- NOAEL (No Observed Adverse Effect Level) es el nivel de dosis máxima observada que no produce ningún efecto adverso.
- LOAEL (Lowest Observed Adverse Effect Level) es el nivel de dosis mínimo observado que produce un efecto adverso.

Las Dosis Diarias Admisibles (DDA) aplicables al hombre se definen dividiendo los parámetros anteriores por los correspondientes Factores de Seguridad (FS).

$$DDA = \frac{NOAEL}{FS} \quad (29)$$

Los Factores de Seguridad (FS) corrigen la incertidumbre de los datos de toxicidad utilizados para ofrecer, así, mayor seguridad. Para determinar los efectos carcinogénicos se usa el FC (Factor Cáncer) que se define como la probabilidad suplementaria, respecto a un sujeto no expuesto, que un individuo tiene de contraer cáncer si se somete a una exposición durante toda su vida a una dosis tóxica.

La cantidad de contaminante a la que un receptor está expuesto puede medirse como la cantidad administrada de contaminante y se expresa en función de la dosis diaria de exposición (DDE) como:

$$DDE_{i,j} = \frac{C_i \cdot Q_j \cdot T \cdot F}{P \cdot T_m} \quad (30)$$

$$DDE = \sum_{i,j} DDE_{i,j} \quad (31)$$

Para calcular el riesgo en sustancias carcinogénicas se realiza el producto de la dosis recibida y el factor de cáncer (FC). A este producto se le denomina ERI, o Exceso de Riesgo Individual:

$$ERI = DDE \cdot FC \quad (32)$$

El ERI se define como la probabilidad para un individuo expuesto a una fuente contaminante de desarrollar cáncer. El riesgo normalmente admitido para las sustancias carcinogénicas esta entre 10^{-4} y 10^{-6} . El riesgo admisible para los efectos de las sustancias no carcinogénicas es mucho mayor, ya que para éstas no es necesario tomar medidas tan estrictas

5 CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

La contaminación por hidrocarburos en el medio geológico, como lo es el suelo, o en el medio acuoso, como lo es el acuífero comprende diferentes procesos que se han podido constatar en el presente proyecto. El primer paso del contaminante durante su liberación, por el deterioro de una instalación de almacenamiento de hidrocarburos, en el suelo es que al atravesarlo se comporta de acuerdo a las características geológicas del mismo, como la porosidad y la permeabilidad, en cuanto a sus propiedades físicas; y pH, materia orgánica y oxidación reducción como propiedades químicas.

Una vez que atraviesa el suelo, llega al acuífero, punto de estudio en este proyecto, el combustible liberado es considerado como un hidrocarburo ligero, es decir que flota sobre la lámina de agua, y en base al gradiente hidráulico y fuerzas de capilaridad, así como la saturación de agua en el medio, el hidrocarburo se verá influenciado en la formación de la lente y su velocidad con que se extenderá.

Otros de los puntos a recalcar son las propiedades del contaminante, su viscosidad y densidad serán otro factor durante su avance por el suelo y el agua, sin dejar de mencionar que de acuerdo a las concentraciones de los BTEX en la gasolina y las características de estos compuestos químicos actuarán de manera principal en el desarrollo de toda la simulación.

Finalmente, la simulación del comportamiento del combustible desde el momento de liberación hasta la actualidad muestran mediante curvas de concentración la gravedad del problema y permite determinar en base a ellos, la valoración de riesgos de la zona afectada y poder decidir la mejor opción para la utilización del terreno sin que afecte en un futuro la vida humana.

Los estudios que se realizaron para determinar la gravedad del daño y modelizar el comportamiento del hidrocarburo en el suelo y el acuífero se basaron en los datos de sondeos y muestras de suelo y agua de un trabajo anterior. Esta información tratada con el

programa HSSM-Windows permitió determinar que la llegada del combustible a la zona de saturación fue vertiginosa, en los primeros quince días de ocurrida la liberación la saturación del hidrocarburo en el medio llega rápidamente al 50% para mantenerse constante y avanzar lentamente en el resto de los meses estudiados. Además, los radios de la lente hasta los cinco meses crecen hasta los 10 metros aproximadamente, este avance a su vez genera una saturación residual del hidrocarburo alrededor del combustible debido a las fuerzas capilares del medio geológico.

La liberación de los BTEX de la lente de gasolina es de comportamiento exponencial, prácticamente a los 6 años de ocurrido el accidente la mayor parte se ha disuelto en el agua, la cantidad de masa de benceno en el acuífero a los 4 años es de aproximadamente 36 kilogramos, para el tolueno la cantidad disuelta en el acuífero a los 6 años es de 200 kilogramos, se recuerda que el porcentaje en peso del tolueno en la gasolina es de 12.265%, esto explica el hecho de una elevada cantidad dentro del agua. Para el etilbenceno y el xileno pasado los 4 años la masa liberada aproximadamente es de 30 kilogramos.

Es lógico esperar que para los sondeos de observación más cerca de la fuente de liberación las concentraciones serán más altas, eso es lo que se refleja en las últimas gráficas de cada compuesto químico, los rastros en los sondeos más lejanos de la fuente como los que están a 75 ó 100 metros comprenden valores de 0.25 mg/L a 5 mg/L.

En base a los resultados obtenidos se puede estimar que en un radio superior a los 100 metros aproximadamente, las trazas de BTEX serán bajas con respecto a los que se encuentran a 50 metros; la mayor parte de estos compuestos químicos han sido disueltos en el acuífero como se observa en las curvas de balances de masas, por lo que el acuífero está contaminado hasta la actualidad con los BTEX, se estima que sus trazas desaparecerán en los próximos años, se recomienda el proceso de modelización para los futuros 10 años, tomando en cuenta las condiciones actuales del medio y las concentraciones obtenidas en los pozos de observación en un nuevo muestreo.

Una vez analizada la contaminación, se recomienda la valoración de riesgos, es decir, en la actualidad, ¿qué tan peligroso resulta para los seres vivos el acuífero con estas concentraciones de BTEX's?, ¿qué riesgo existe para la vida con los valores obtenidos de BTEX's?, pues en base a las normas establecidas por las organizaciones respectivas y en base a los diferentes métodos de análisis de riesgos es posible responder estas preguntas.

En la actualidad existen diferentes y más sofisticados programas para la modelización del desplazamiento de hidrocarburos en un medio, con mayor o menor cantidad de parámetros dentro del problema, esto muestra la importancia de analizar el comportamiento del contaminante en el suelo y en el acuífero ya que facilita el análisis y permite preparar el programa de remediación con facilidad y certeza, además brinda información para otro tipo de análisis y definir la mejor utilidad del terreno estudiado.

6 BIBLIOGRAFIA

- ANDERSON, M.P./WOSSNER, W.W. (1991): “Applied Groundwater Modeling. Simulation of flow and advective transport”. Academic Press (Inc). USA.
- APPELO, C.A.J./ POSTMA, D. (1993): “Geochemistry, groundwater and pollution”. A.A. Balkema Rotterdam. Netherlands.
- CUSTODIO, E/ LLAMAS M.R. (1976): “Hidrogeología Subterránea”. Omega. España.
- FETTER, C.W. (1993): “Contaminant Hydrology”. Mcmillan Publishing Company (Inc). USA.
- GARIN LOPEZ, J.R. (1999): “Recuperación de un suelo contaminado por hidrocarburos”. Escuela Superior Técnica de Ingenieros de Minas de Madrid. España.
- GESTA BRIONES, B. (2000): “Diseño de la metodología para la caracterización de terrenos industriales abandonados”. Escuela Superior Técnica de Ingenieros de Minas de Madrid. España.
- HONORATO PINTO, R. (2000): “Manual de Edafología”. Alfaomega. México.
- IGLESIAS GARCIA, E. (2000): “Valoración de riesgos contaminados. Fundamentos y aplicaciones informáticos”. Escuela Superior Técnica de Ingenieros de Minas de Madrid. España.

- LLAMAS BORCAJO, J.F./GARCIA MARTINEZ, M.J./ FERNÁNDEZ ARROJO, C. (1999): “Comportamiento y Caracterización de contaminantes orgánicos en suelos. Propuestas para un sistema de apoyo a la toma de decisiones (DSS) en la gestión de terrenos abandonados”. Departamento de Ingeniería Química y Combustibles de la Escuela Superior Técnica de Ingenieros de Minas de Madrid. España.
- OSWER National Risk Management Research Laboratory, ORD (1996): “How To Effectively Recover Free Product At Leaking Underground Storage Tank Sites”. EPA. USA.
- WEAVER, J.W./ CHERNABEU, J.R./TAUXE J.D./ LIEN, B.K./ PROVOST, J.B. (1996): “The Hydrocarbon Spill Screening Model. Volume 1”. EPA. USA.

**ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR
DE INGENIEROS DE MINAS**

PROYECTO FIN DE CARRERA

**DEPARTAMENTO DE INGENIERIA QUÍMICA Y
COMBUSTIBLES**

**MODELIZACION DEL DESPLAZAMIENTO DE
BTEX EN UN ACUÍFERO POR LA RUPTURA DE UN
TANQUE DE GASOLINA EN LA ZONA DE
ALICANTE**

DOCUMENTO Nº 3 ESTUDIO ECONOMICO

MARIA LEON CARRERA

NOVIEMBRE 2001

0 INTRODUCCION

Debido a que el presente proyecto a sido analizado desde el punto de vista científico, se realiza un presupuesto de la elaboración del proyecto, en todos los precios presentados se incluye el Impuesto al Valor Añadido del 16%, la unidad monetaria a utilizar es el dólar.

1 CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES

La elaboración del proyecto comprende tres partes: adquisición de información y datos necesarios para su elaboración, esta parte es denominada Recopilación de Datos; la segunda comprende el análisis y tratamiento de los mismos para solucionar el problema, llamada Ejecución y Análisis de Datos; la tercera y última parte, el trabajo en oficina, donde se confecciona el proyecto, denominada Trabajo de Oficina. Cada una de estas partes ha sido realizada siguiendo el cronograma planteado desde el inicio del proyecto, como se muestra en la figura 31.

Actividad	Junio	Julio	Agosto	Septiembre	Octubre
Recopilación de Datos					
Ejecución y Análisis de Datos					
Trabajo de Oficina					

Figura 31 Cronograma de Actividades

3 PRESUPUESTO

Dentro del presupuesto se consideran los siguientes gastos generados:

- Costes de Personal
- Costes de Documentación
- Costes de Equipos

- Costes de Oficina
- Varios

El coste de personal comprende todos los gastos por la necesidad del personal especializado para realizar una función respectiva dentro del cronograma de actividades del proyecto, el personal capacitado corresponde a los siguientes:

- Administrativo que se encarga de la parte logística del proyecto como mecanografiado, edición, encuadernación, diseños gráficos, entre otros. Cobrará un estimado de 1500 dólares al mes.
- Técnico superior novel encargado de la búsqueda de información en centros, empresas, institutos, Internet, entre otros medios; de la recopilación de toda la documentación posible y clasificación del material obtenido para la facilidad de los cálculos y ejecución del cronograma de actividades de manera eficaz. El coste considerado por sus servicios es de 2000 dólares mensuales.
- Técnico superior especialista en contaminación cuyo fin es encaminar el proyecto e interpretar los datos obtenidos por el personal descrito anteriormente, para resolver el problema planteado. Se considerará un coste por sus servicios de 3500 dólares al mes.

Los costes de documentación incluyen todos aquellos generados por la búsqueda de información, todos estos gastos los declara el técnico superior novel, generalmente estos gastos comprenden: fotocopias, uso del Internet, adquisición de folletos, libros, impresión, transporte, etc.

Los gastos debido a la obtención y utilización del equipo necesario para la realización de este proyecto comprenden:

- Ordenador cuyo uso debido a la naturaleza del proyecto por el uso del programa HSSM-Windows y por la labor del Administrativo, tiene un coste de 1800 dólares. Se considera que el ordenador será utilizado durante todo el período informático y de oficina, por 8 horas diarias.

- Impresora, su coste aproximado es de 469 € ó 400 dólares y será utilizada en el transcurso de la parte de adquisición de información como del desarrollo del proyecto.
- Escáner que será utilizado durante los 60 días de gabinete y tiene un coste aproximado de 350 dólares.

Para la confección del informe, es decir, la parte correspondiente a la de gabinete u oficina, los gastos están establecidos en horas para la elaboración, además se incluyen el material necesario para la impresión, disquetes, fotocopias, encuadernación, carpetas, etc. En cuanto a los gastos varios, son todos aquellos imprevistos que han surgido durante la elaboración de este trabajo.

TABLA 13 COSTE DE PERSONAL

PERSONAL	HORAS	PRECIO / HORA	TOTAL (\$)
Administrativo	320	9,3 \$	3000
Técnico superior novel	240	12,5 \$	3000
Técnico superior especialista	480	21,8 \$	10464

TABLA 14 COSTE DEL EQUIPO

MATERIAL	UNIDADES	PRECIO UNITARIO	TOTAL (\$)
Ordenador	1	1800 \$	1800
Impresora	1	400 \$	400
Escáner	1	350 \$	350

TABLA 15 COSTES DE OFICINA

MATERIAL	UNIDADES	PRECIO UNITARIO	TOTAL (\$)
Papel	2 resmas	10 \$	20
Carpetas	6	1 \$	6
Disquetes	20	0,5 \$	10
Internet	200 horas	0,78 \$	156
Encuadernación	3	4 \$	12
Varios	-	-	25

3.1 PRESUPUESTO GENERAL

Una vez establecidos los costes unitarios del material y por el servicio del personal se hará la totalización de cada uno de ellos, exponiendo finalmente, el coste total del proyecto como se muestra en la tabla a continuación.

TABLA 16 PRESUPUESTO GENERAL

PERSONAL	HORAS	TOTAL (\$)
Administrativo	320	3000
Técnico superior novel	240	3000
Técnico superior especialista	480	10464
EQUIPO	UNIDADES	
Ordenador	1	1800
Impresora	1	400
Escáner	1	350
MATERIALES	UNIDADES	
Papel	2 resmas	20
Carpetas	6	6
Disquetes	20	10
Internet	200 horas	156
Encuadernación	3	12
Varios	-	25
TOTAL GENERAL		19243

El coste total del proyecto es de aproximadamente diez y nueve mil doscientos cuarenta y tres dólares (19243 \$).

La simulación del desplazamiento del contaminante permite estimar el impacto del combustible sobre el acuífero, ya que los resultados del programa Hydrocarbon Spill Screening Model permiten hacer el análisis de la contaminación y definir transcurrido un tiempo, los estudios de remediación en la zona de portuaria, incluso a partir de esta información es factible la valorización de riesgos debido a los BTEX presentes en el acuífero, con el fin de determinar las condiciones del medio y poder destinarlo para un uso adecuado sin daños a los seres vivos.

**ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR
DE INGENIEROS DE MINAS**

PROYECTO FIN DE CARRERA

**DEPARTAMENTO DE INGENIERIA QUÍMICA Y
COMBUSTIBLES**

**MODELIZACION DEL DESPLAZAMIENTO DE BTEX EN
UN ACUÍFERO POR LA RUPTURA DE UN TANQUE DE
GASOLINA EN LA ZONA DE ALICANTE**

DOCUMENTO N° 3 ANEXOS

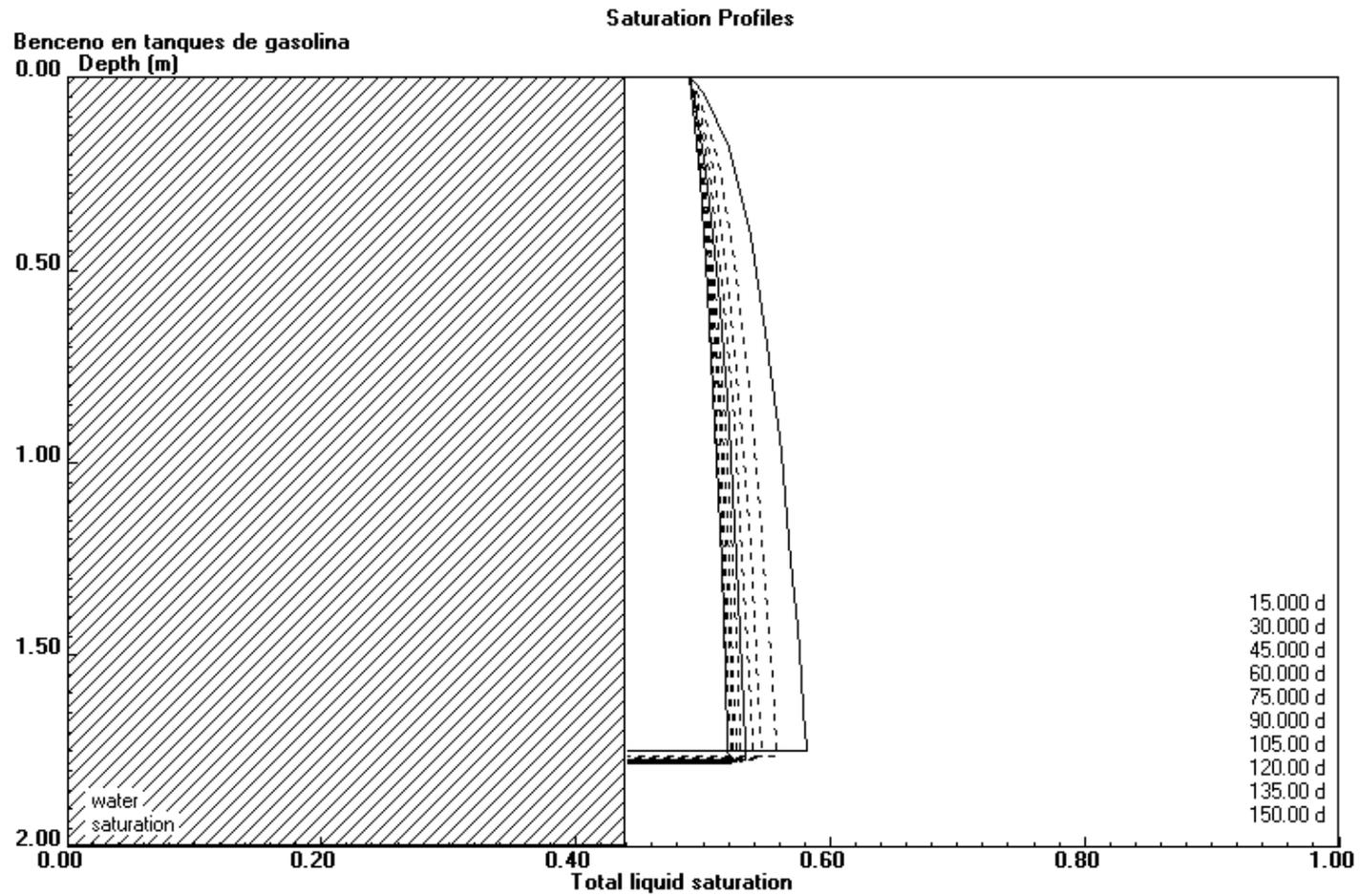
MARIA LEON CARRERA

NOVIEMBRE 2001

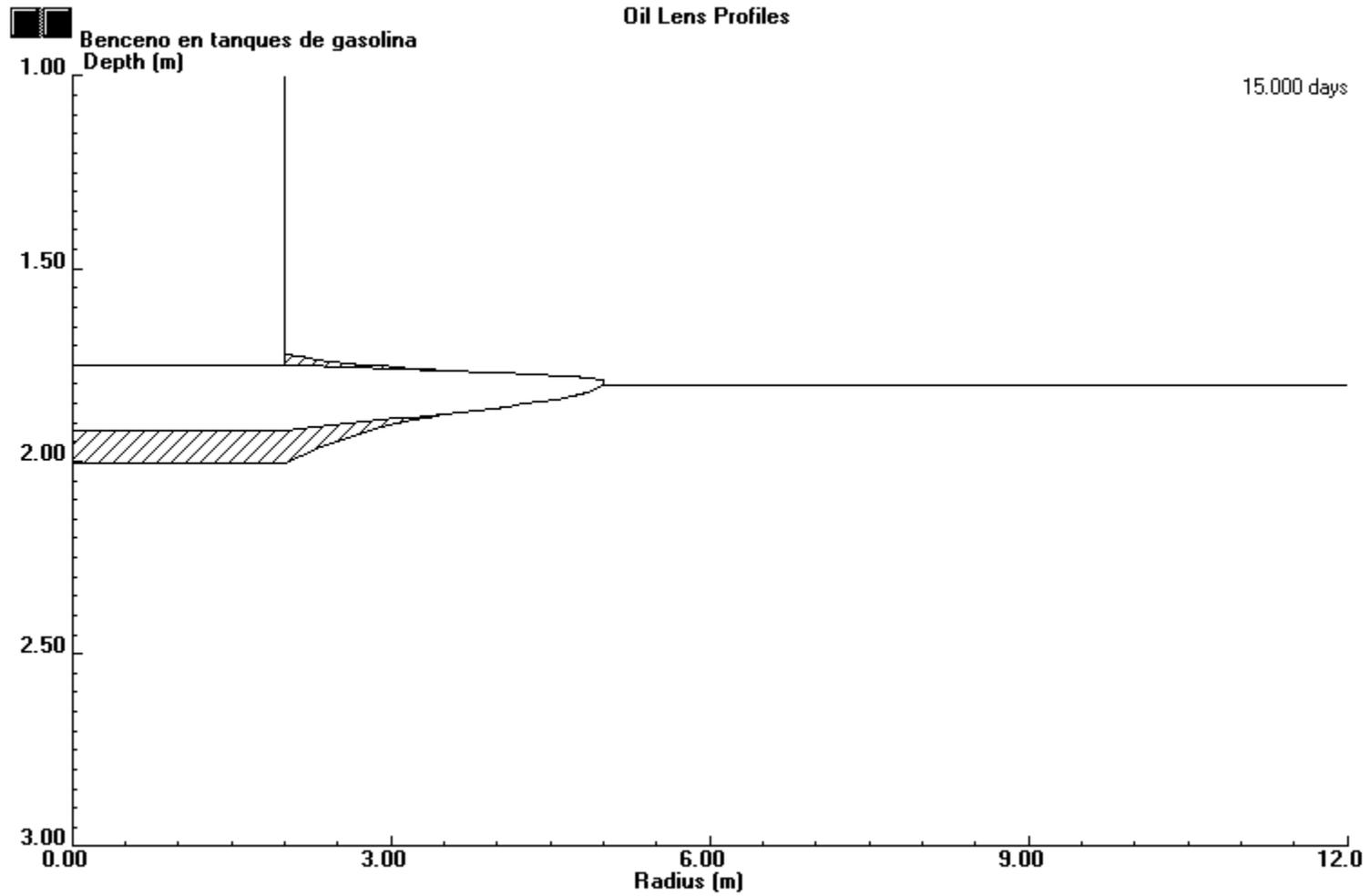
ANEXO A

RESULTADOS GRAFICOS DEL PROGRAMA

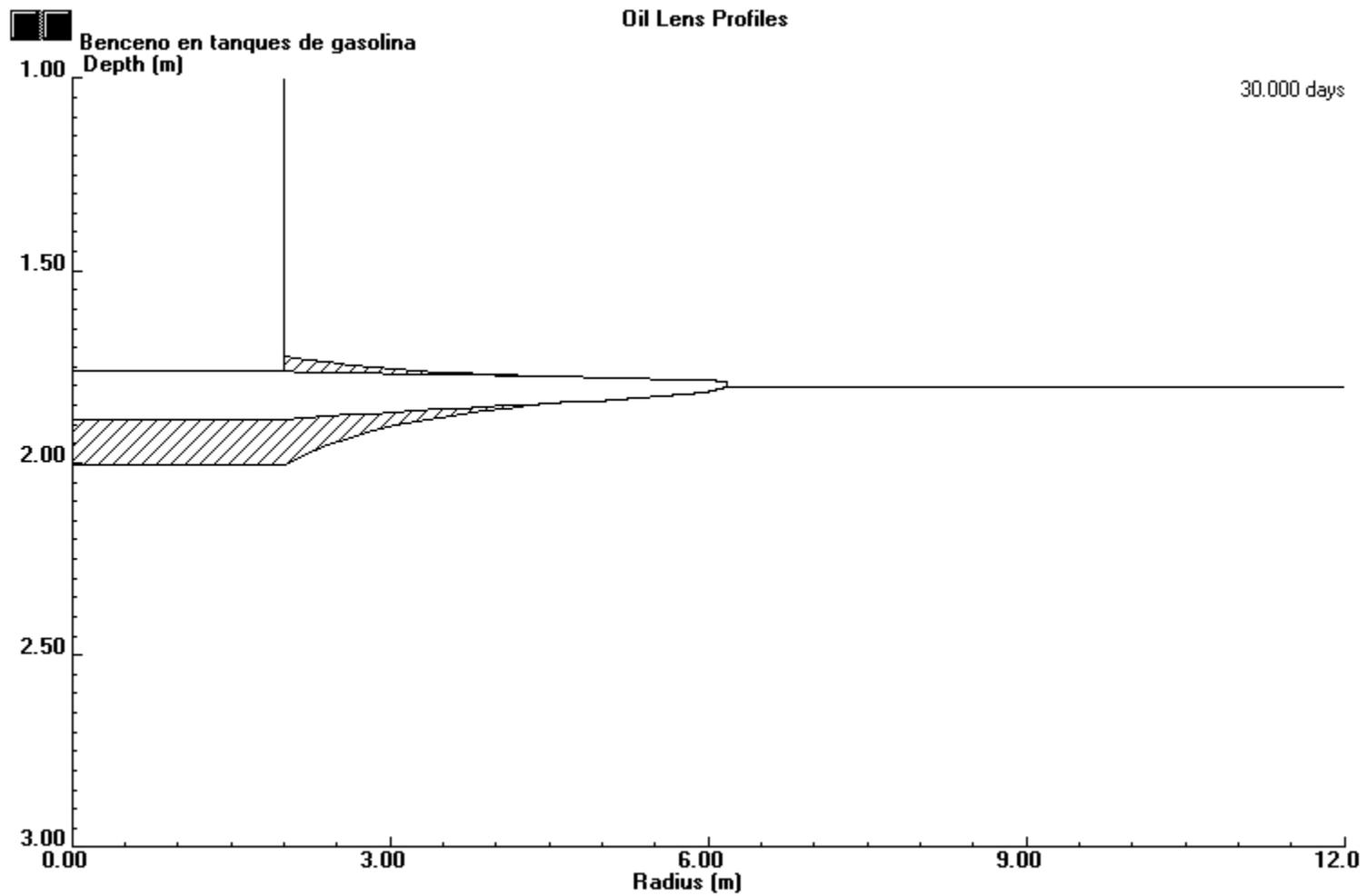
A.1 PERFIL DE SATURACION PARA EL BENCENO



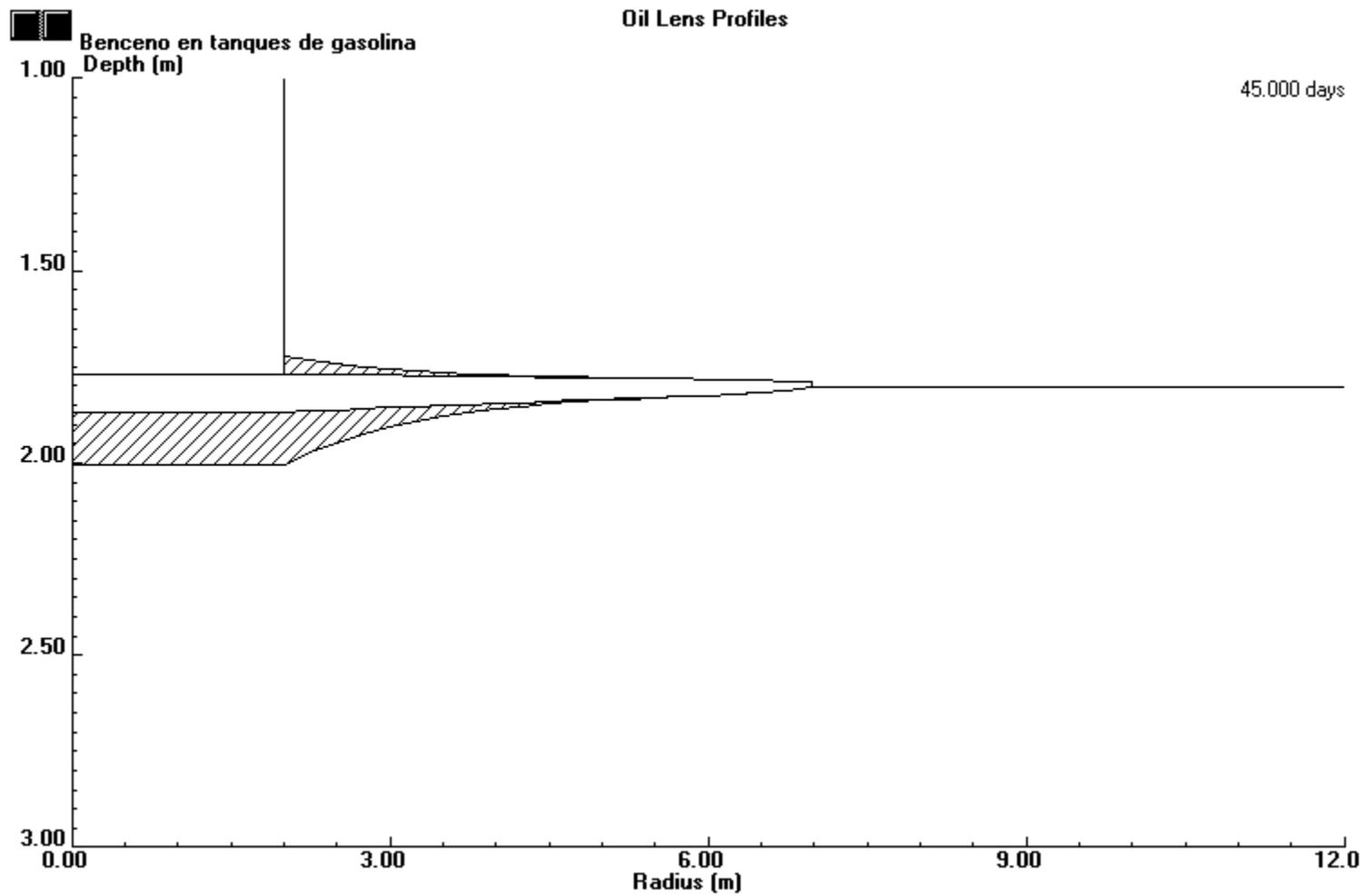
A.2 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 15 DIAS



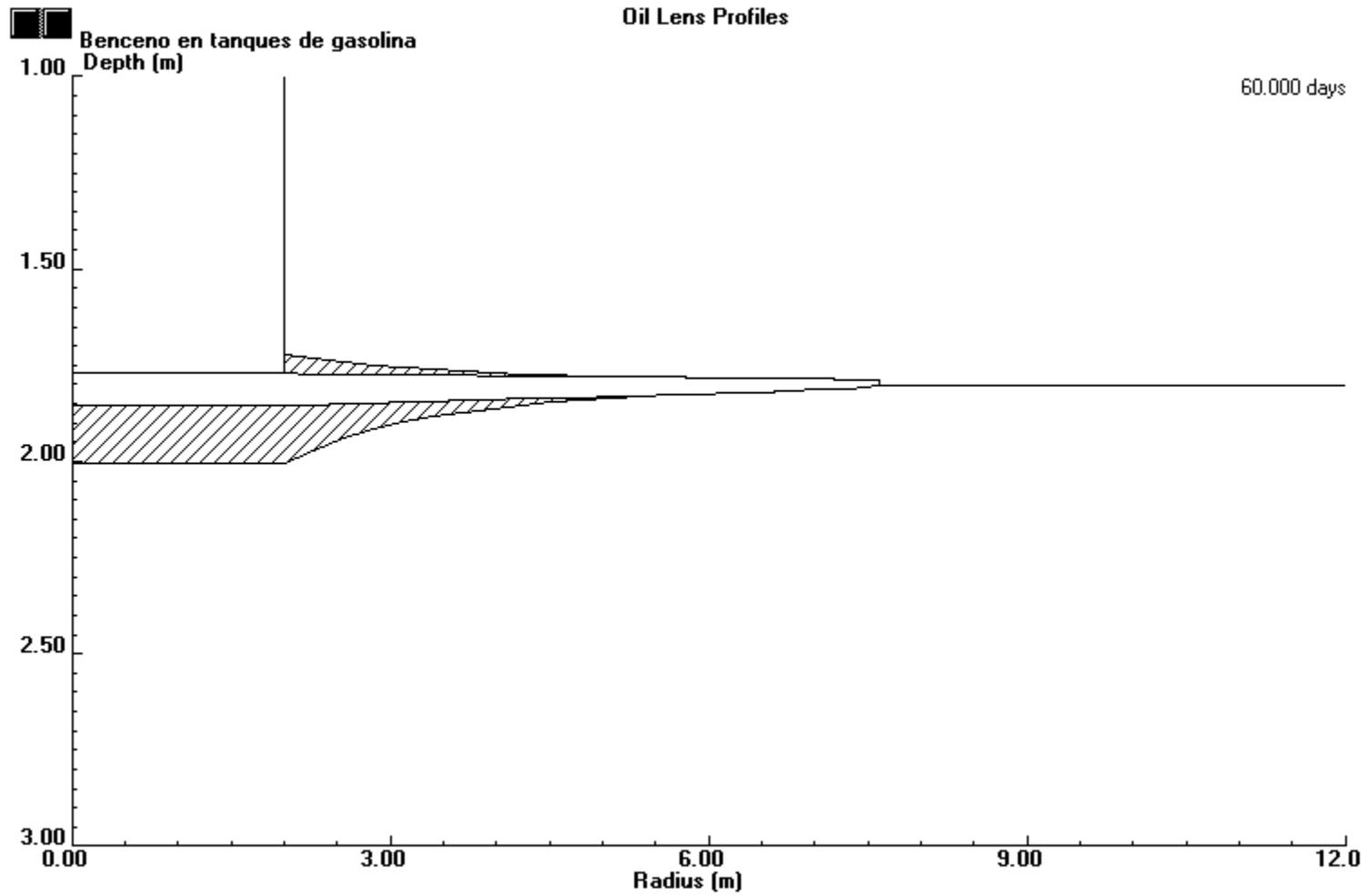
A.3 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 30 DIAS



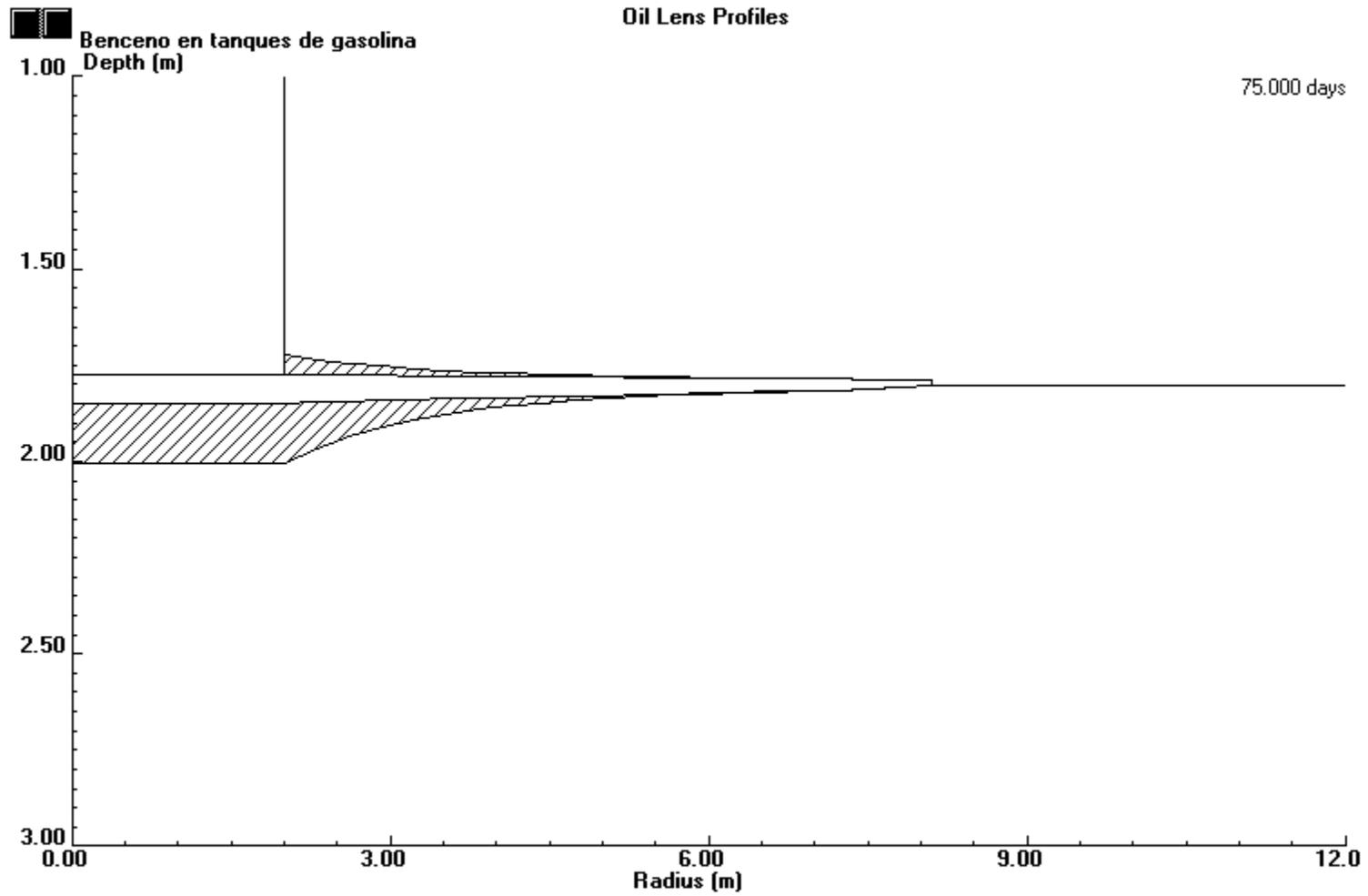
A.4 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 45 DIAS



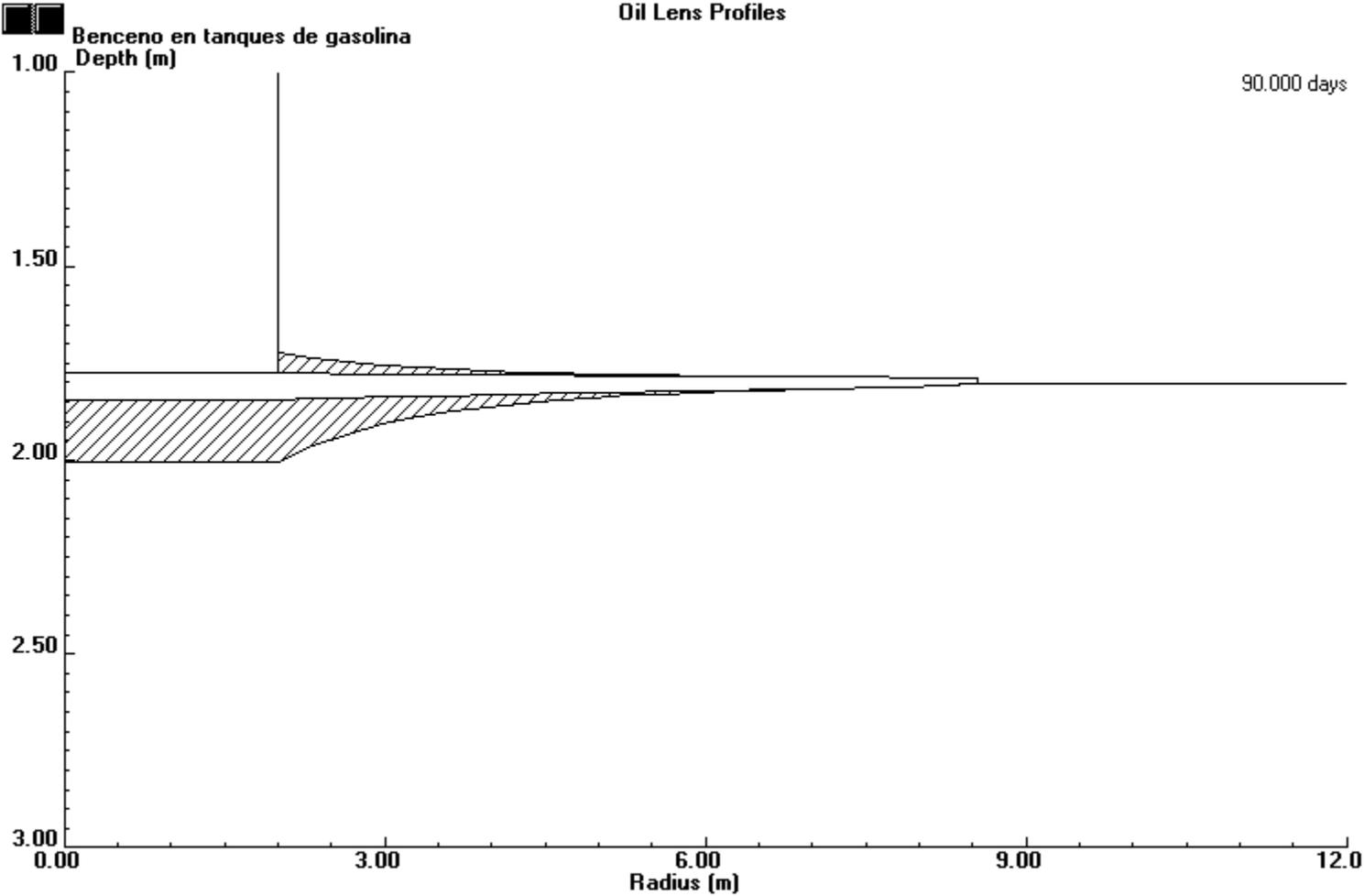
A.5 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 60 DIAS



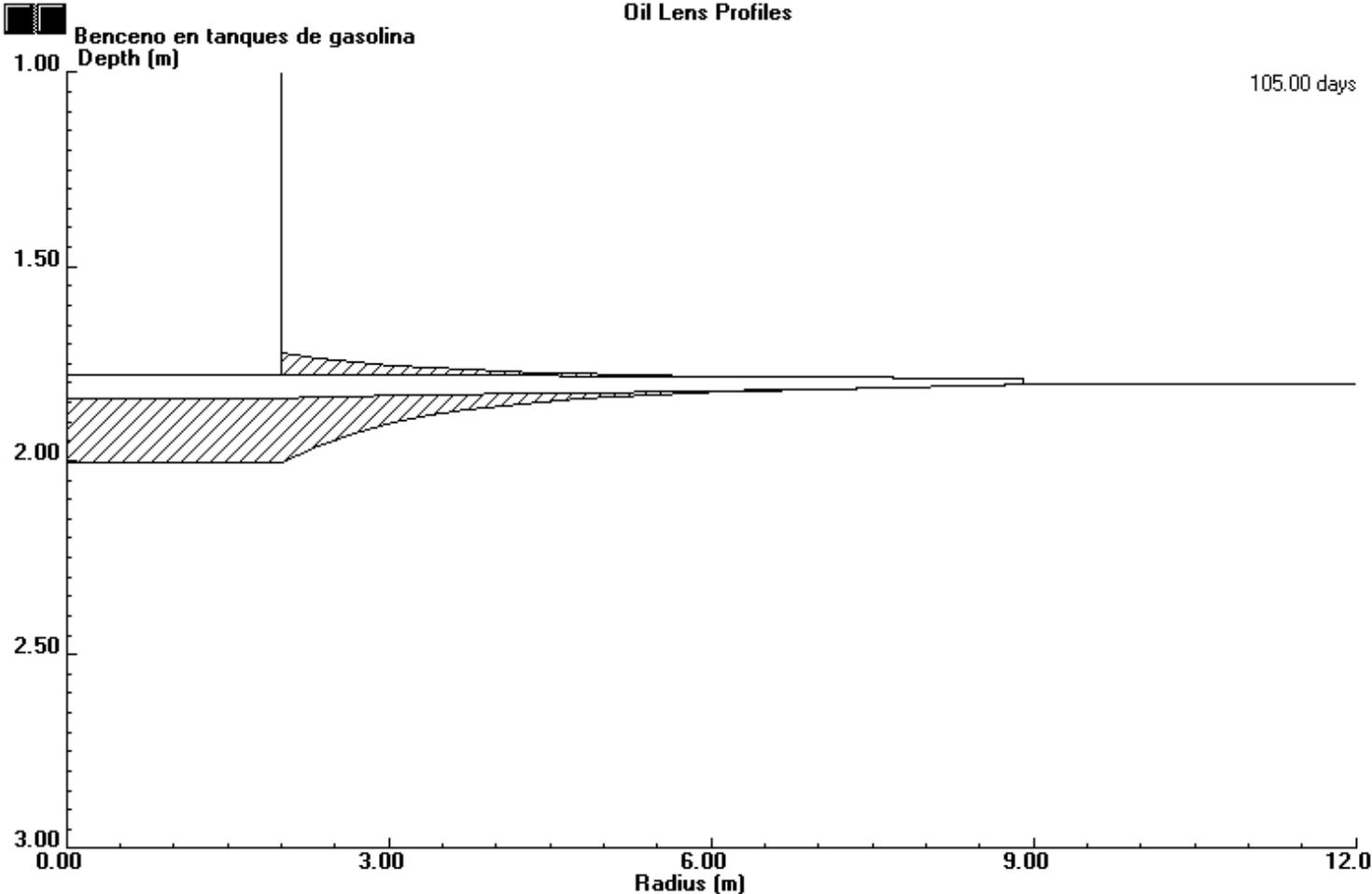
A.6 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 75 DIAS



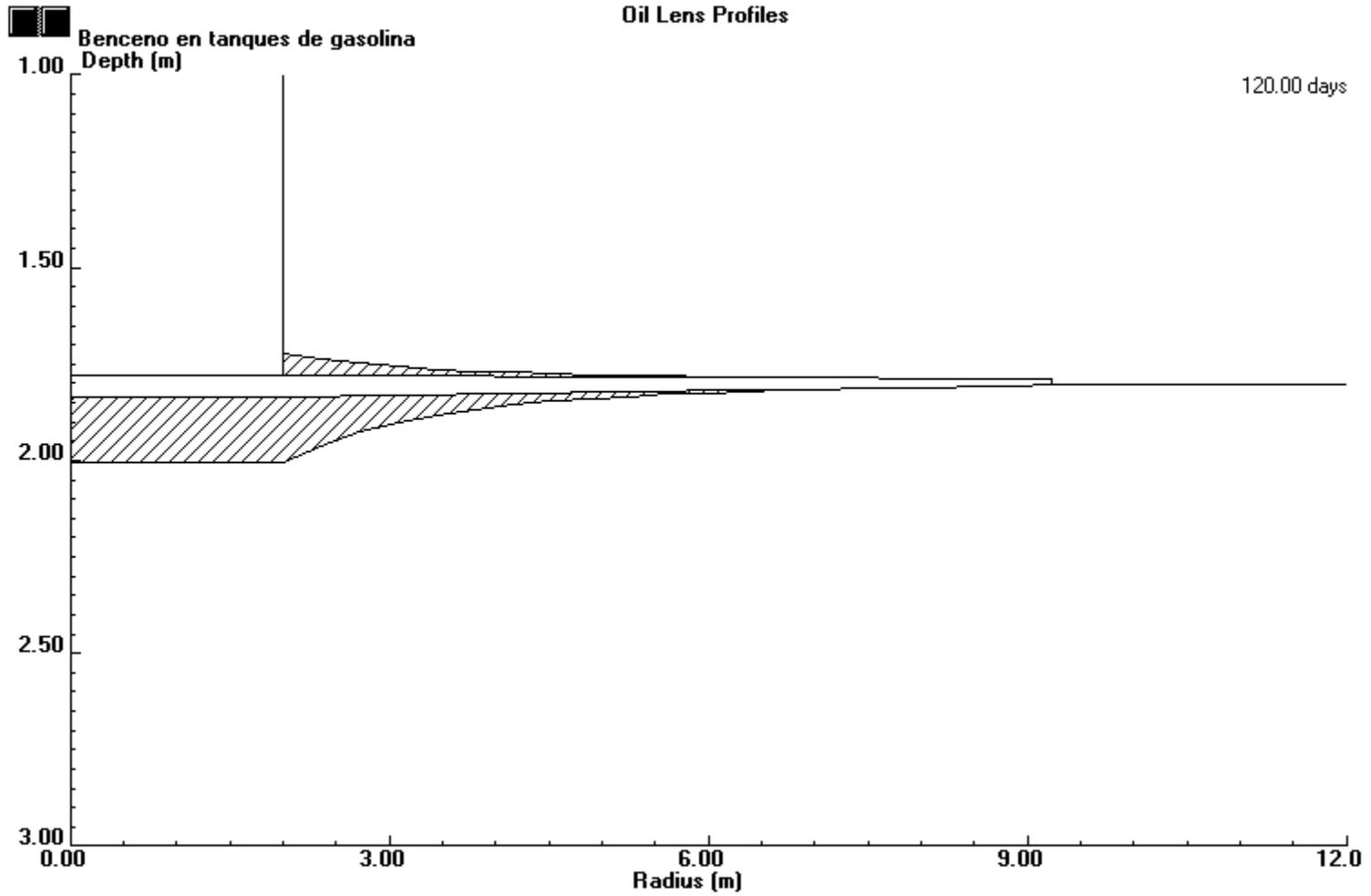
A.7 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 90 DIAS

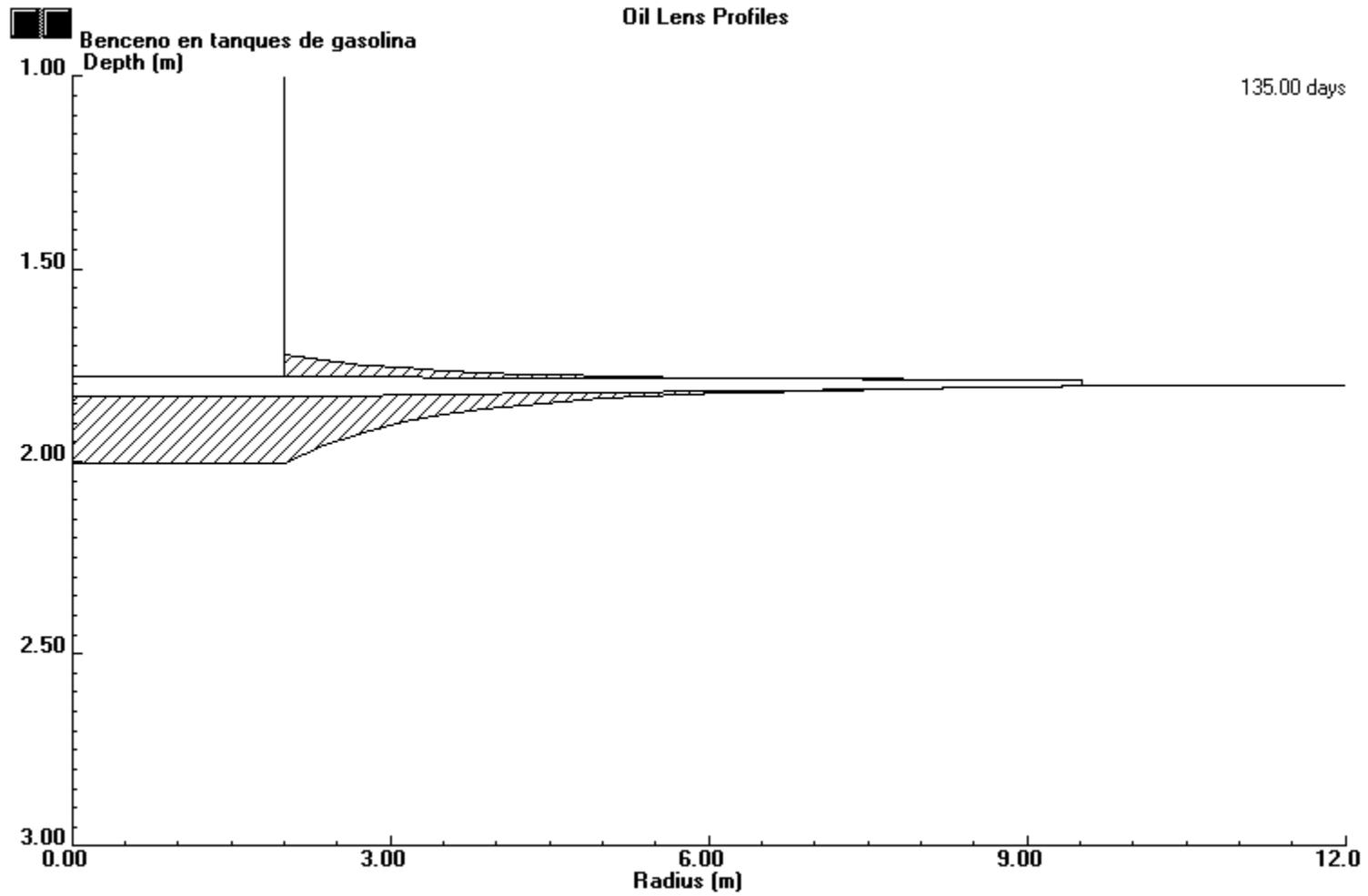


A.8 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 105 DIAS

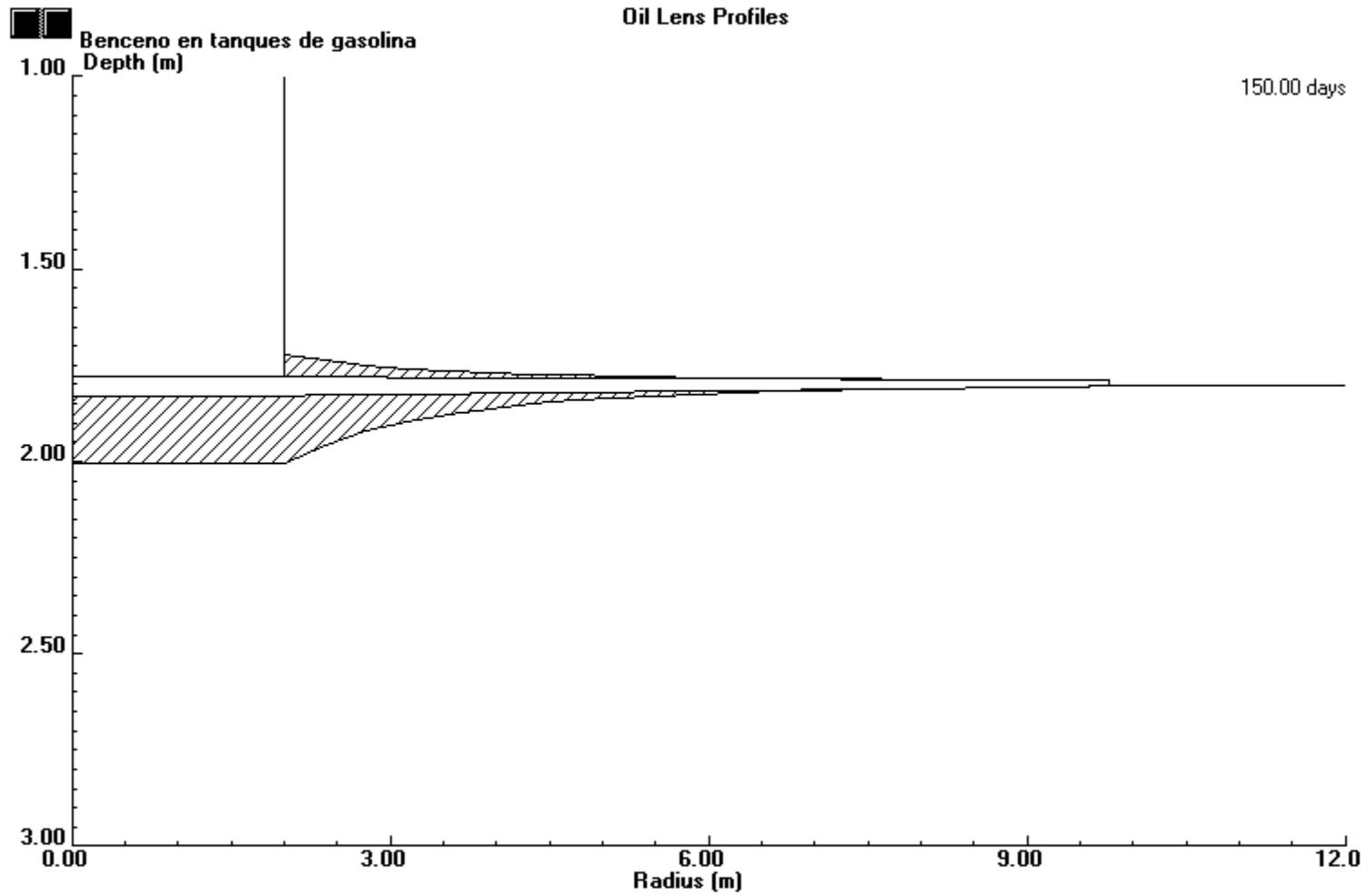


A.9 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 120 DIAS

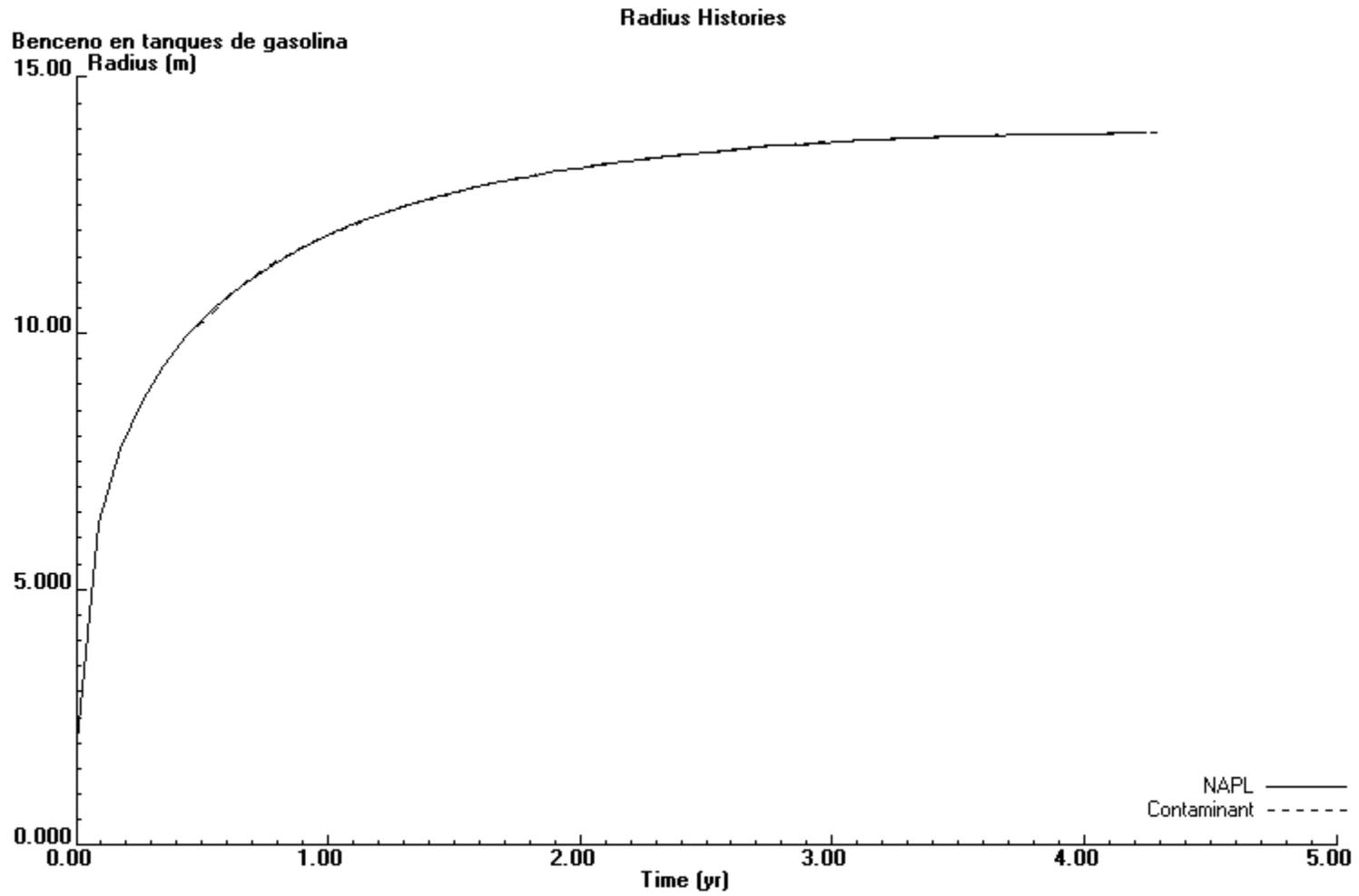


A. 10 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 135 DIAS

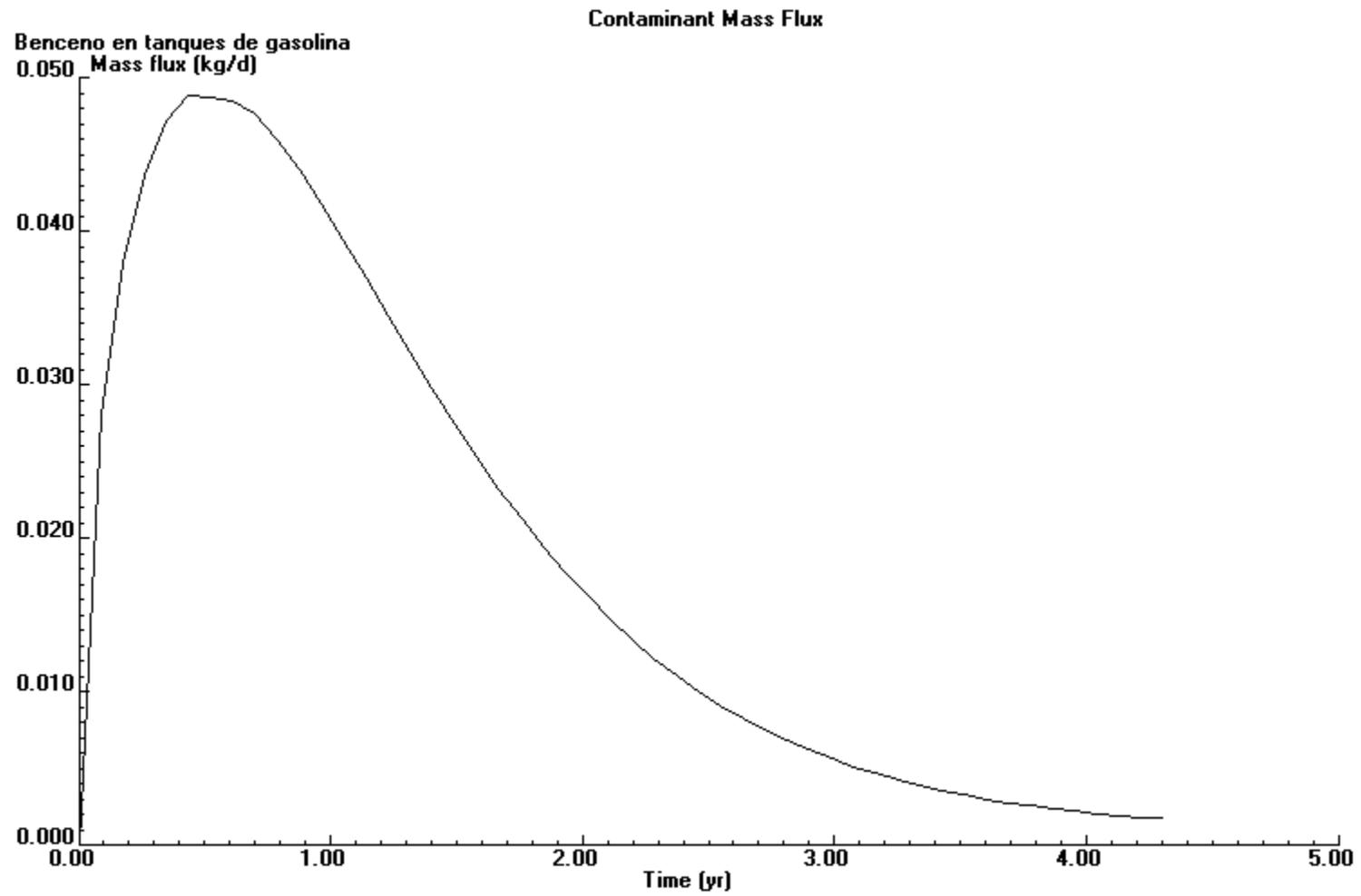
A. 11 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL BENCENO A LOS 150 DIAS



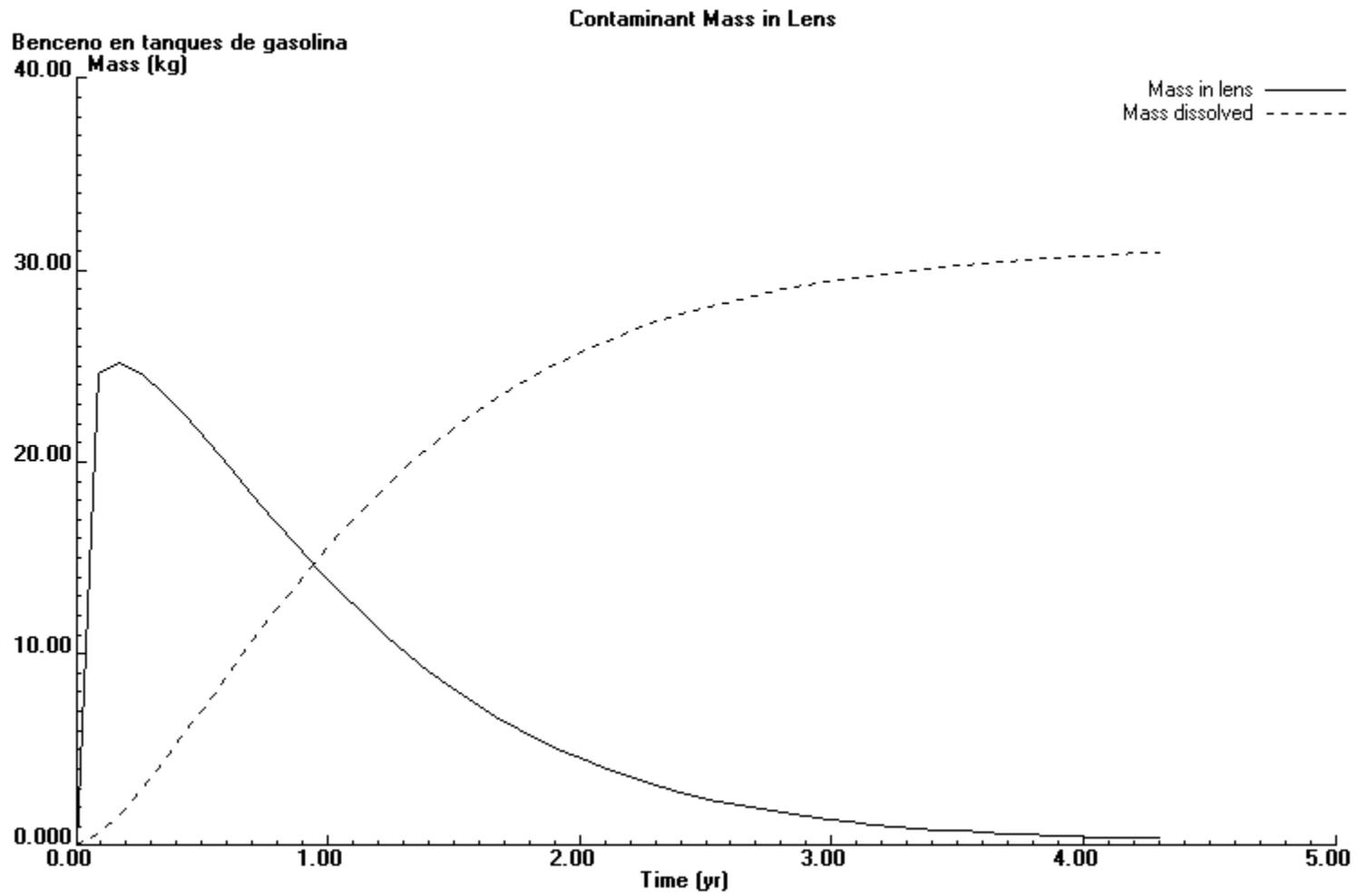
A.12 CURVA DE COMPORTAMIENTO DEL RADIO PARA EL BENCENO



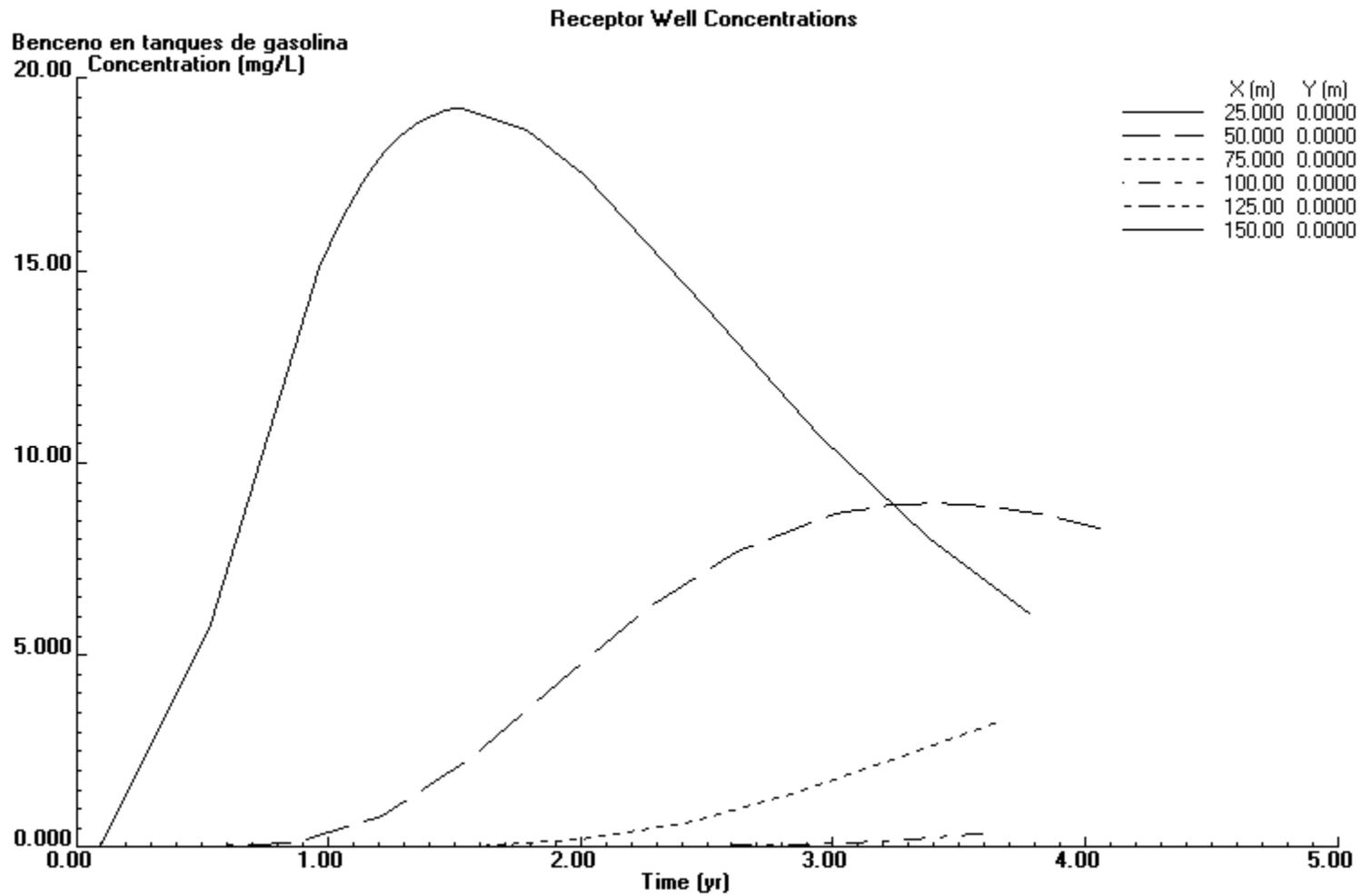
A.13 FLUJO DE LA MASA DEL BENCENO



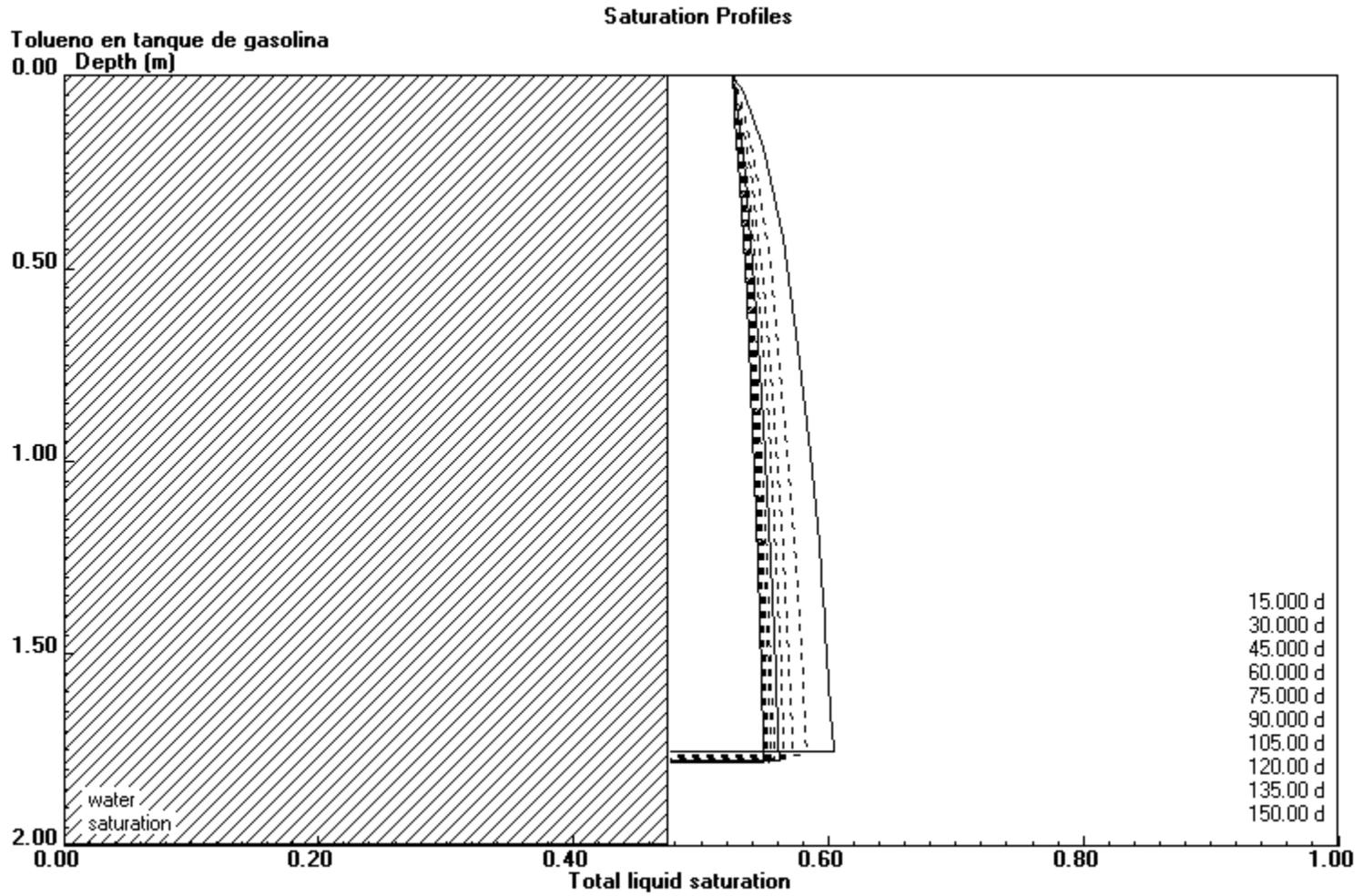
A.14 BALANCE DE MASA EN LA LENTE PARA EL BENCENO

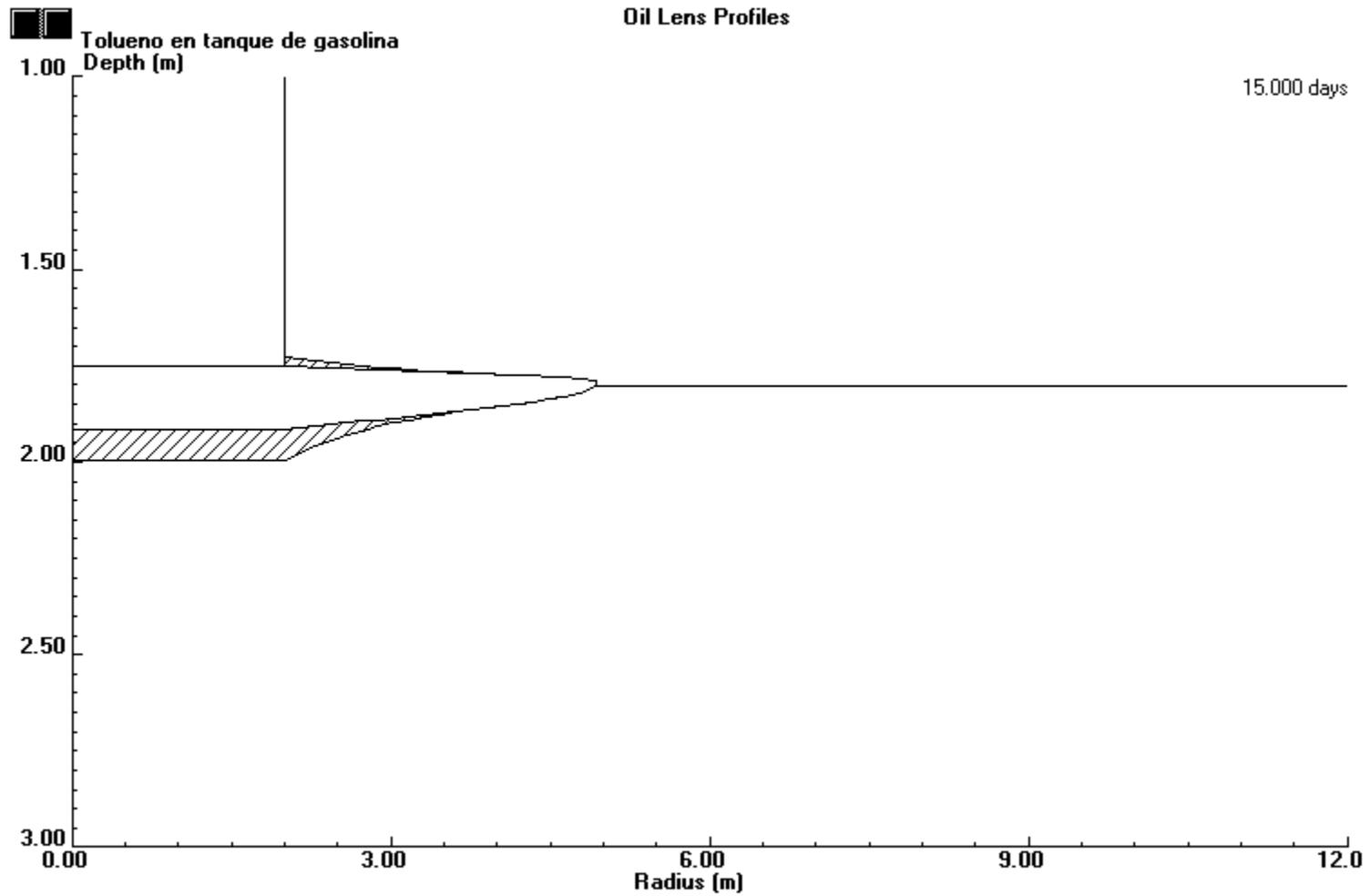


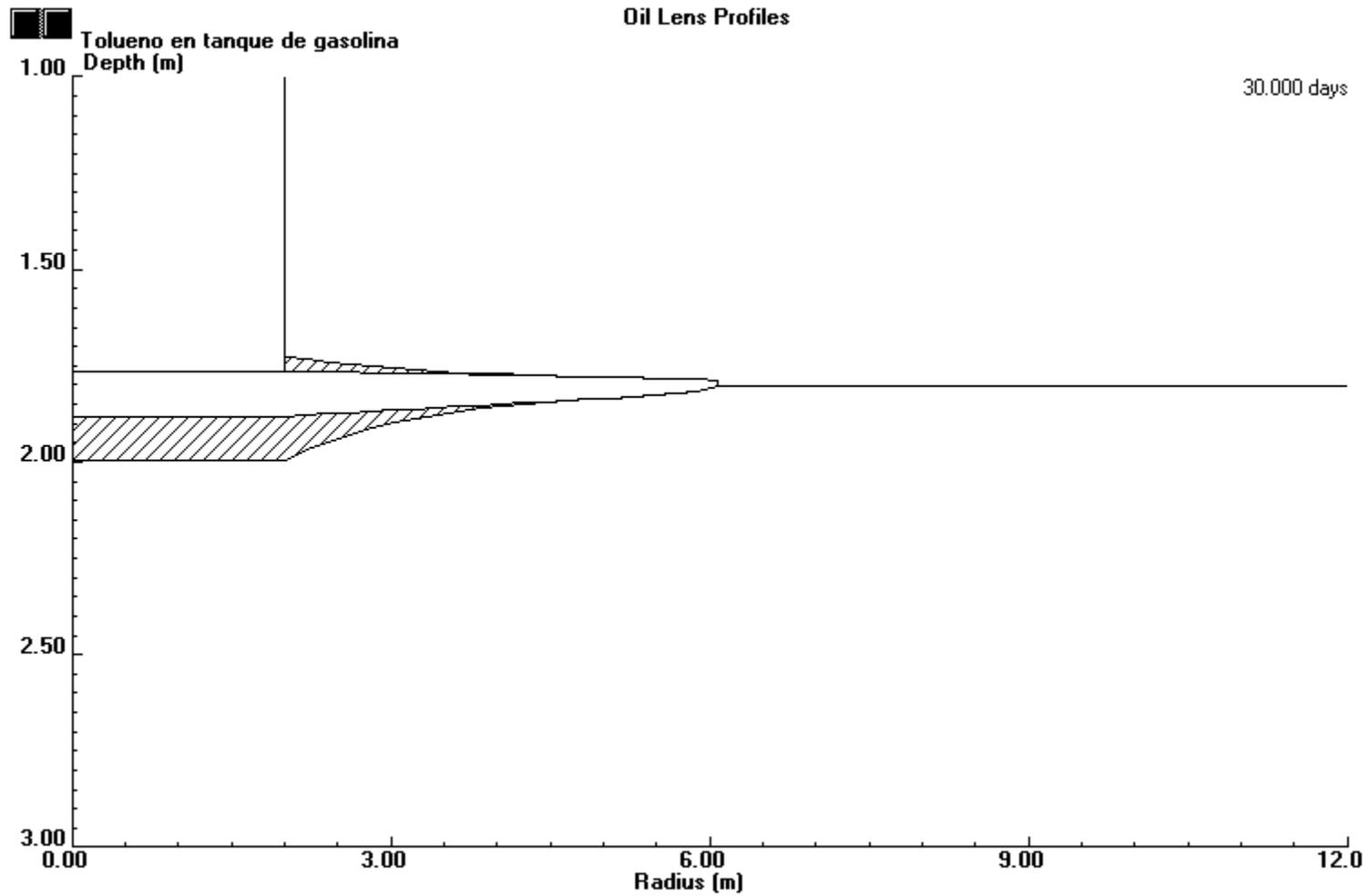
A.15 CONCENTRACIONES EN LOS SONDEOS DE OBSERVACION PARA EL BENCENO



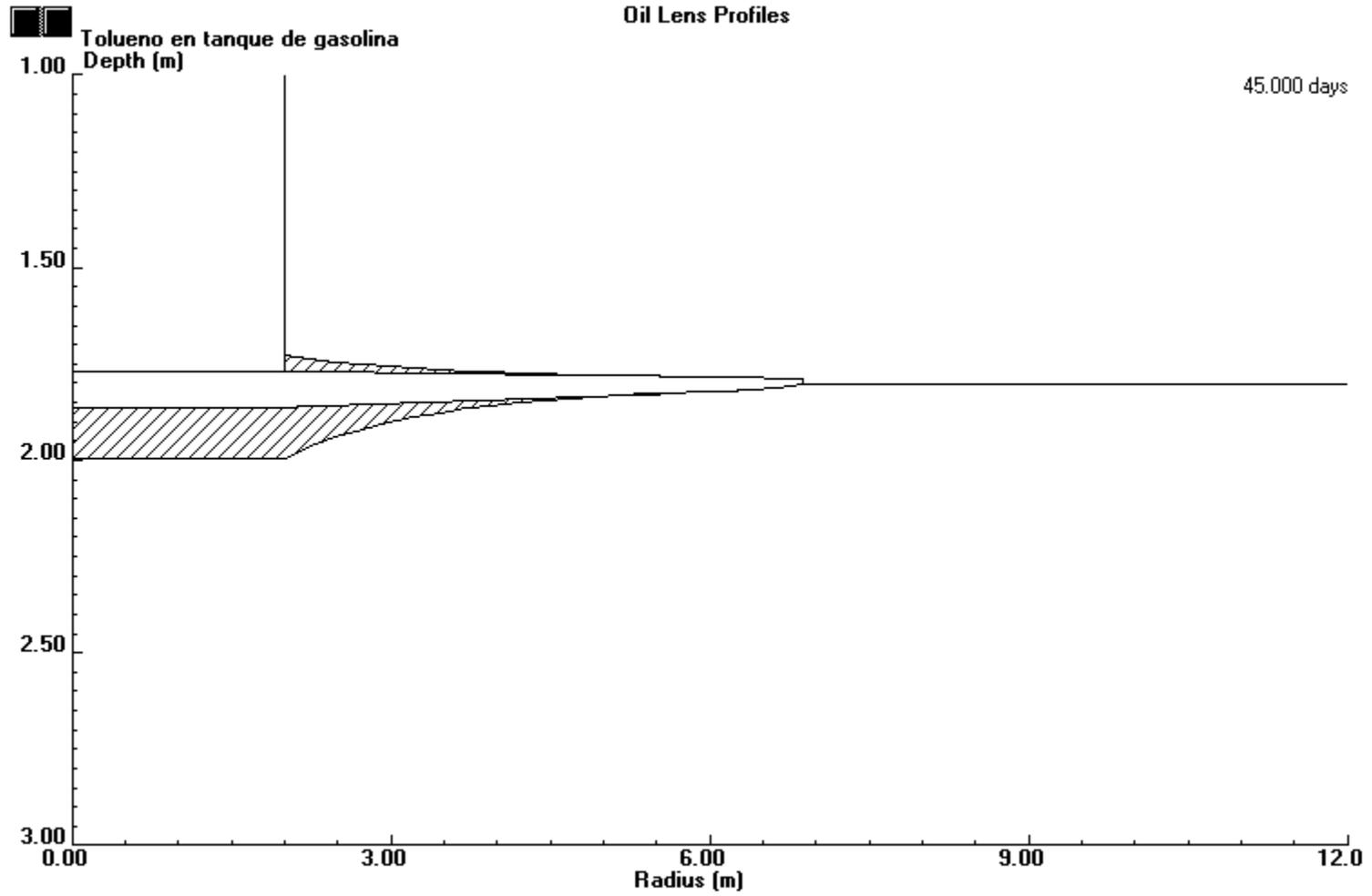
A.16 PERFIL DE SATURACION PARA EL TOLUENO



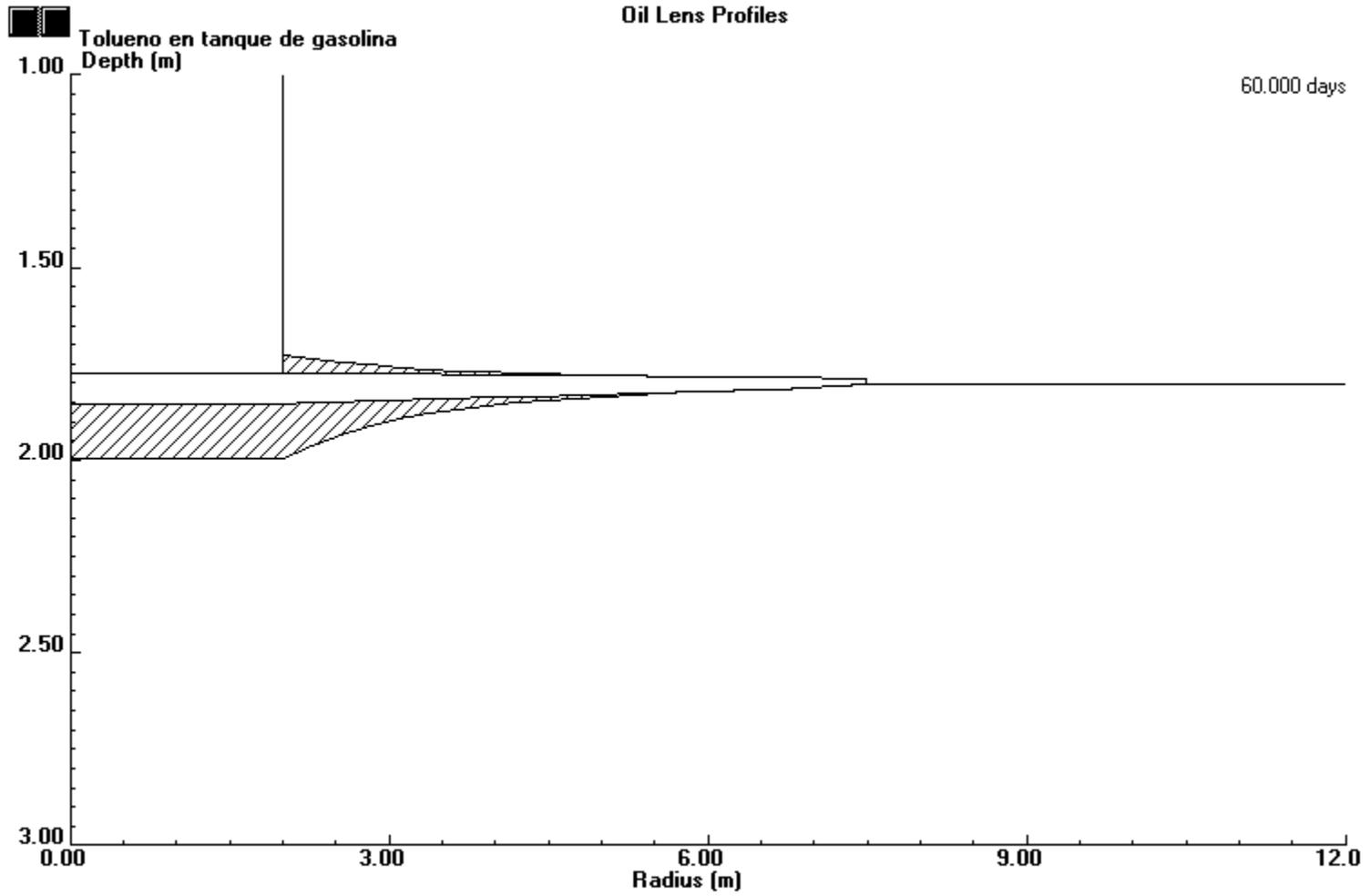
A.17 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 15 DIAS

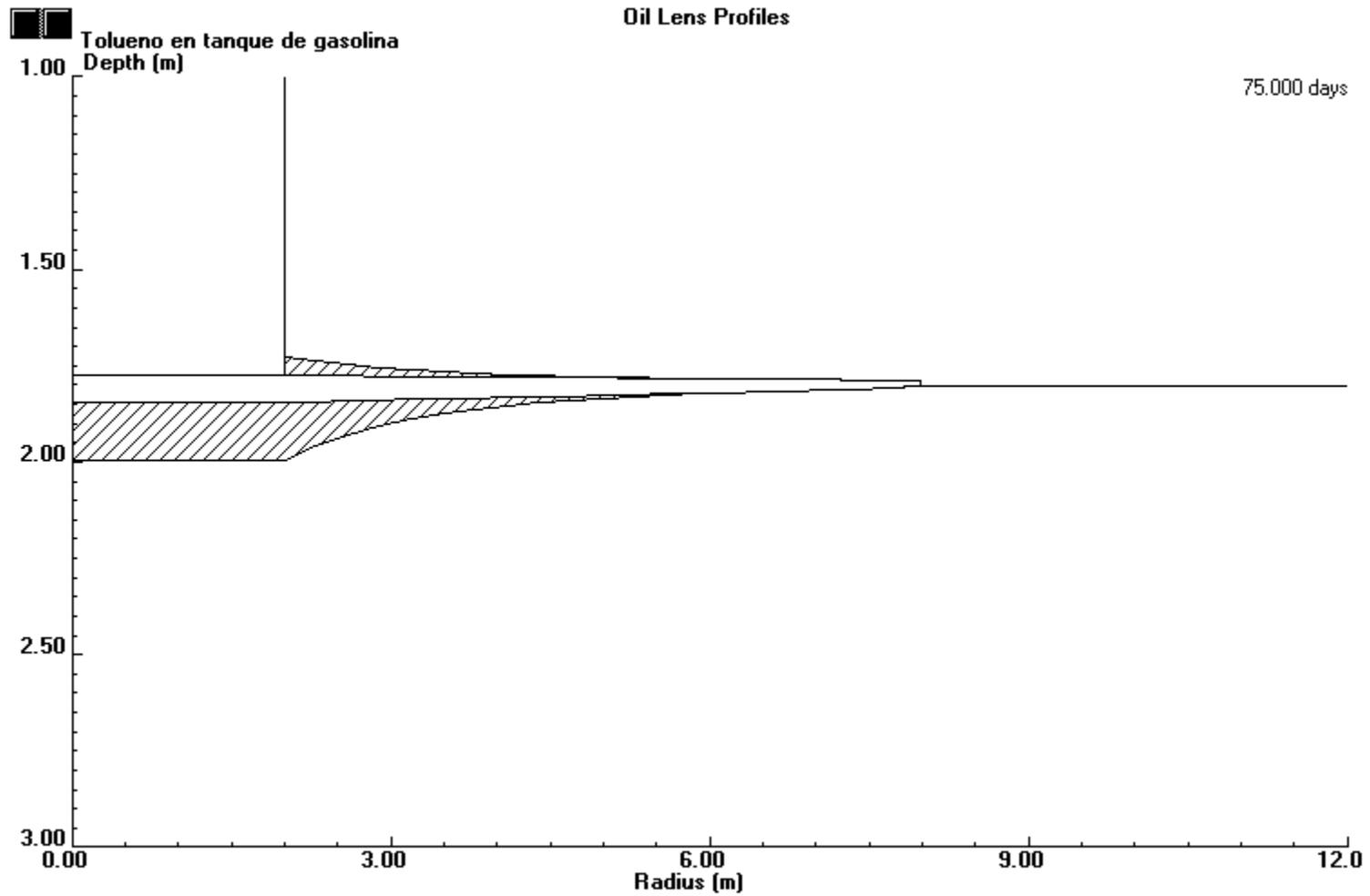
A.18 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 30 DIAS

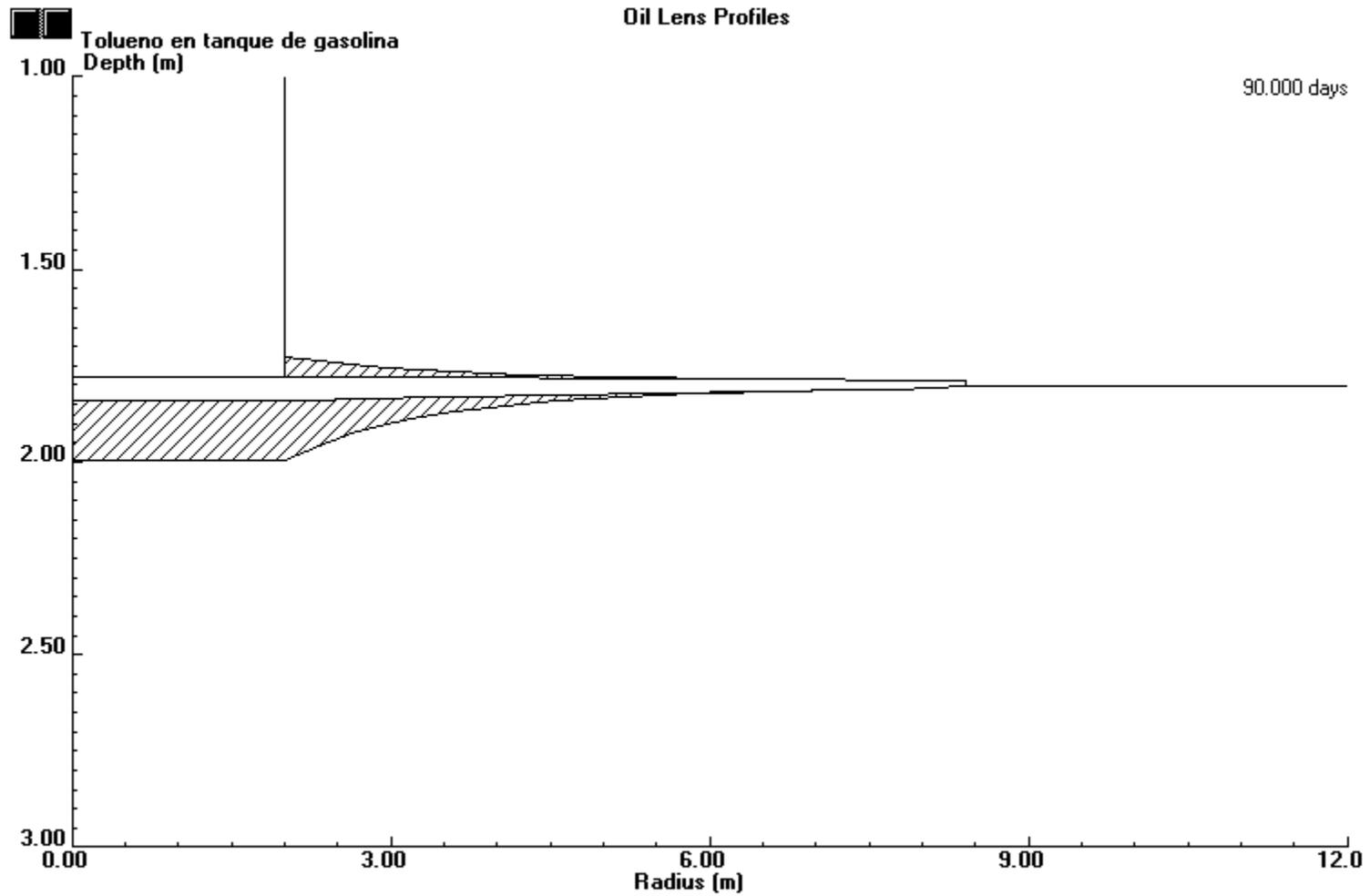
A.19 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 45 DIAS

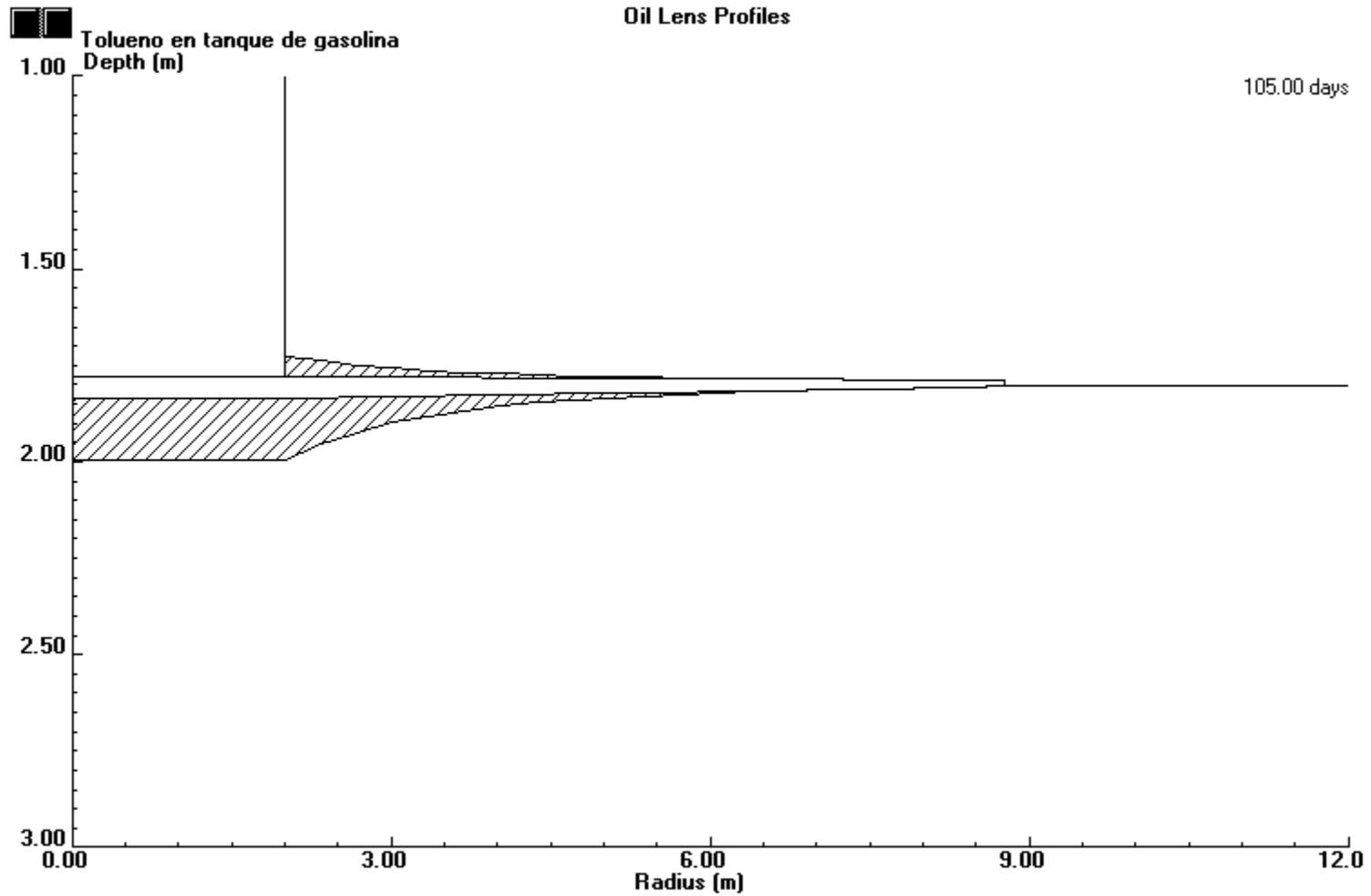


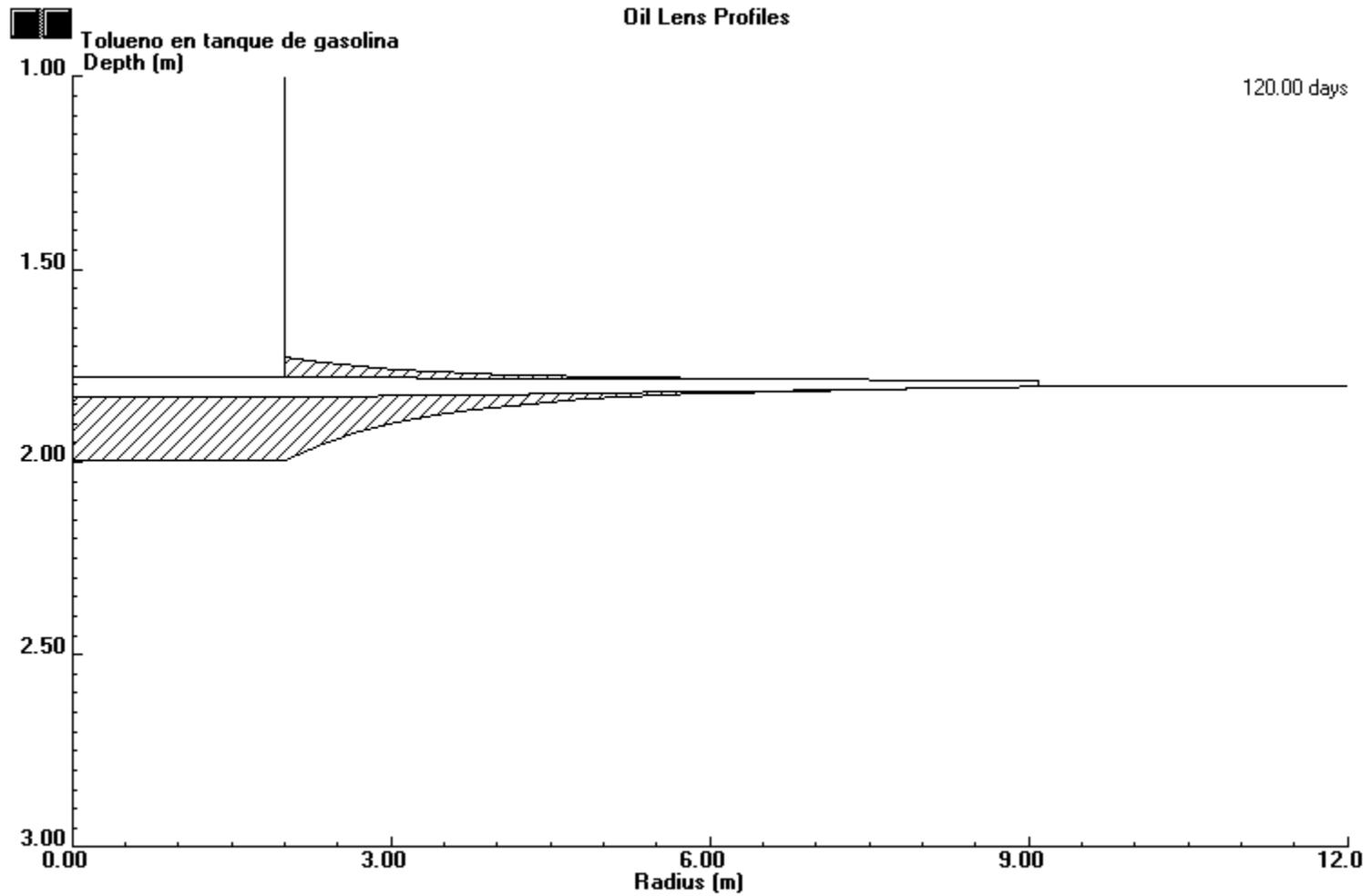
A.20 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 60 DIAS



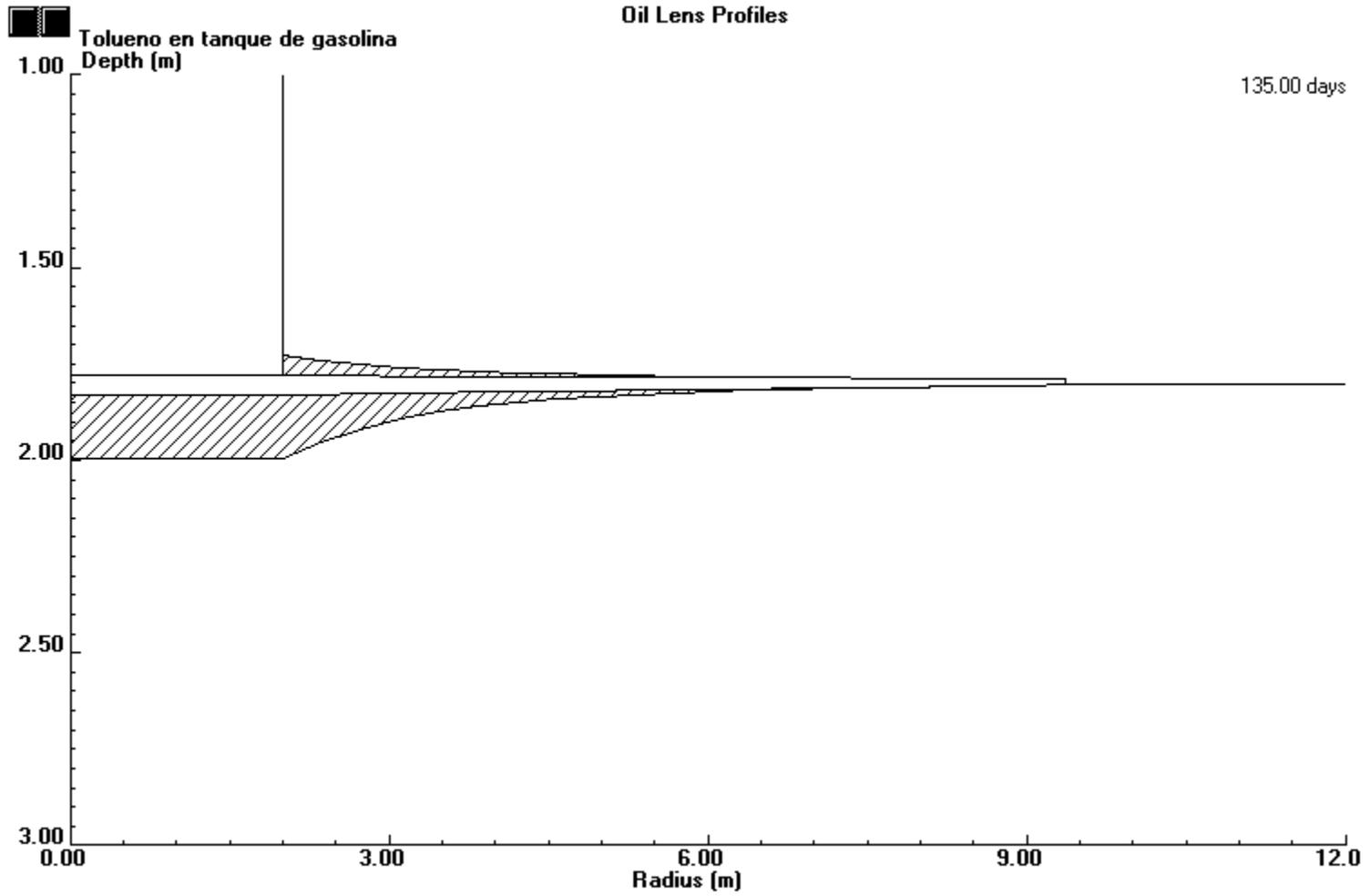
A.21 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 75 DIAS

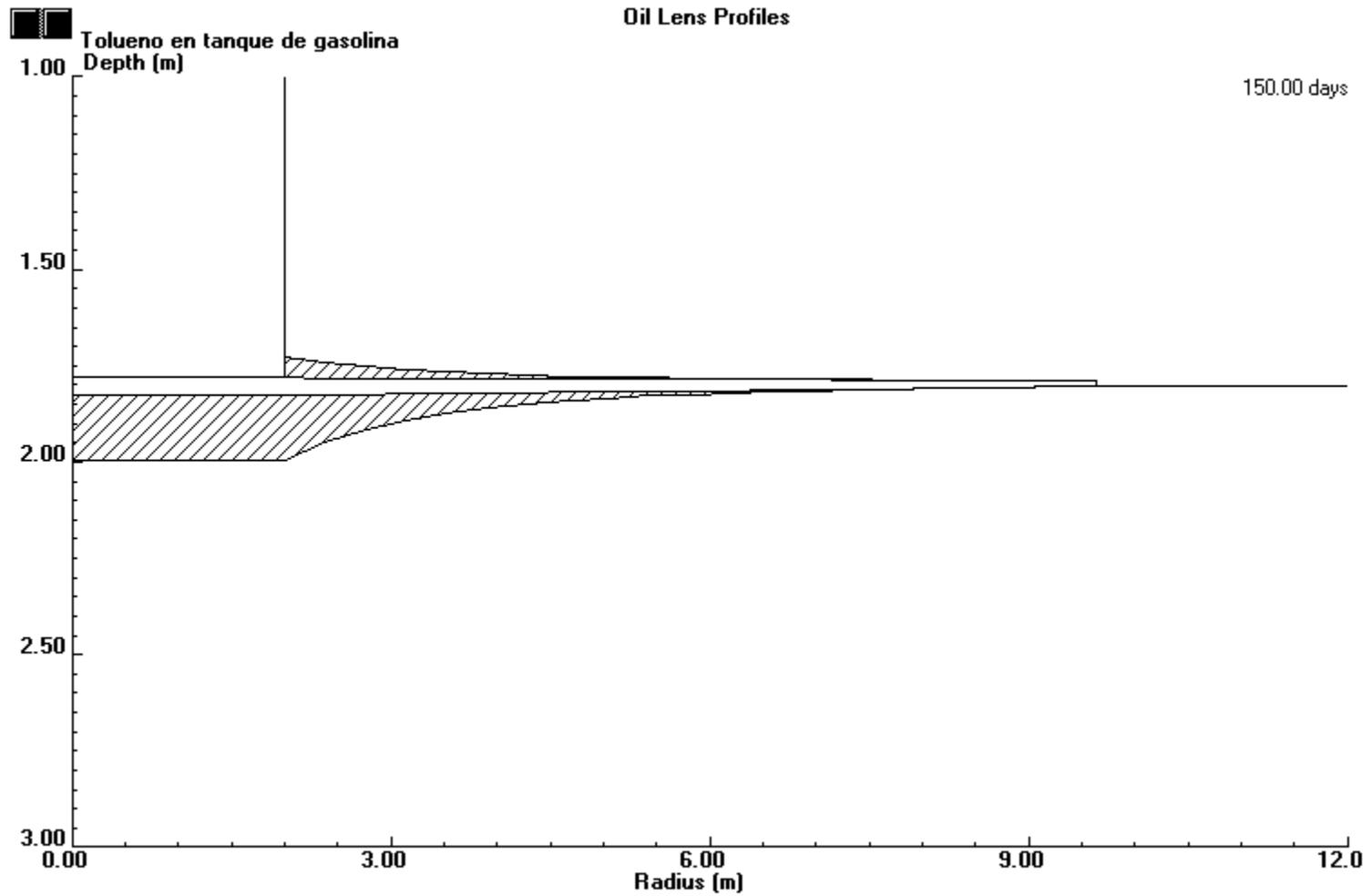
A.22 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 90 DIAS

A.23 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 105 DIAS

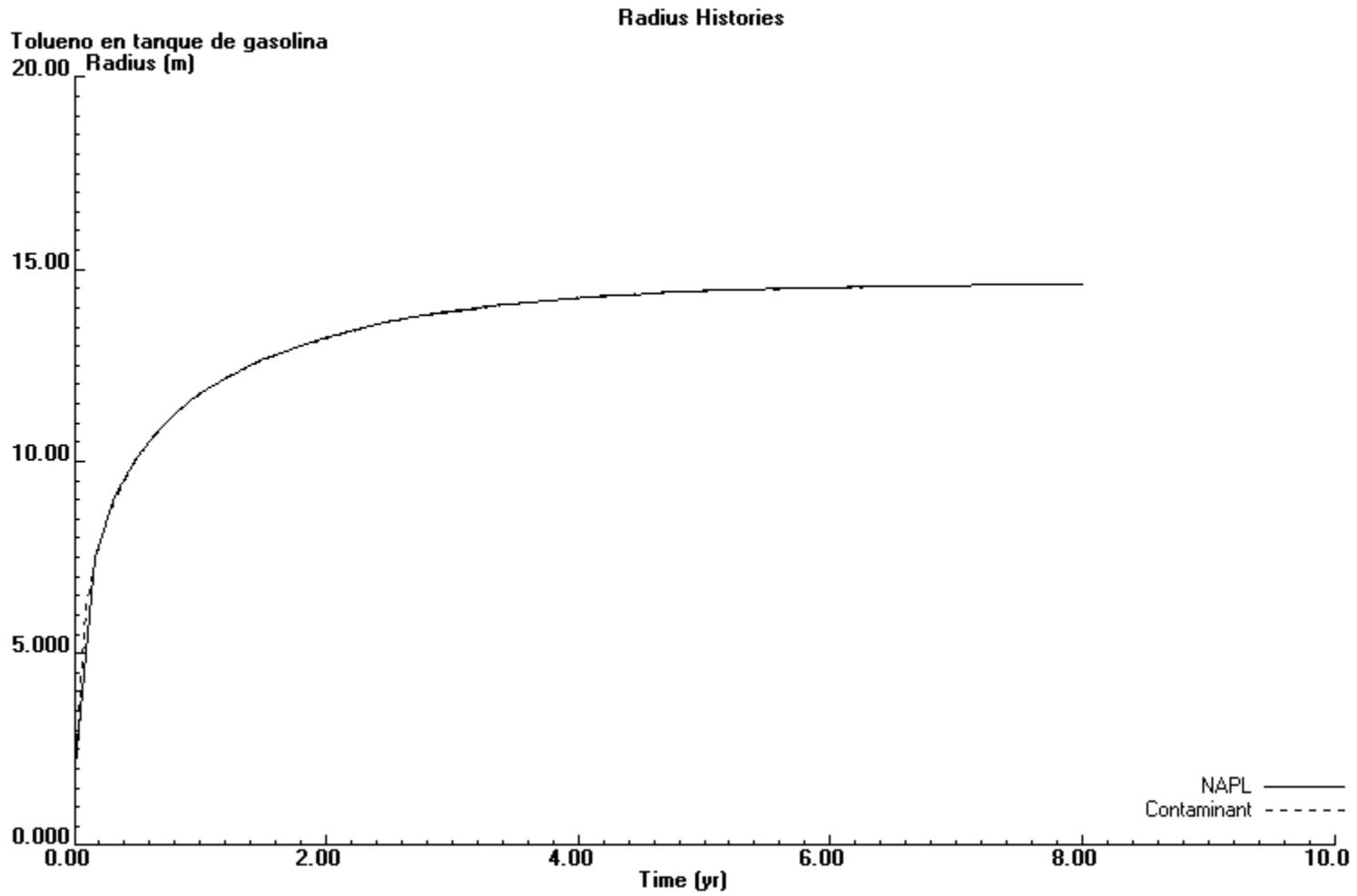
A.24 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 120 DIAS

A.25 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 135 DIAS

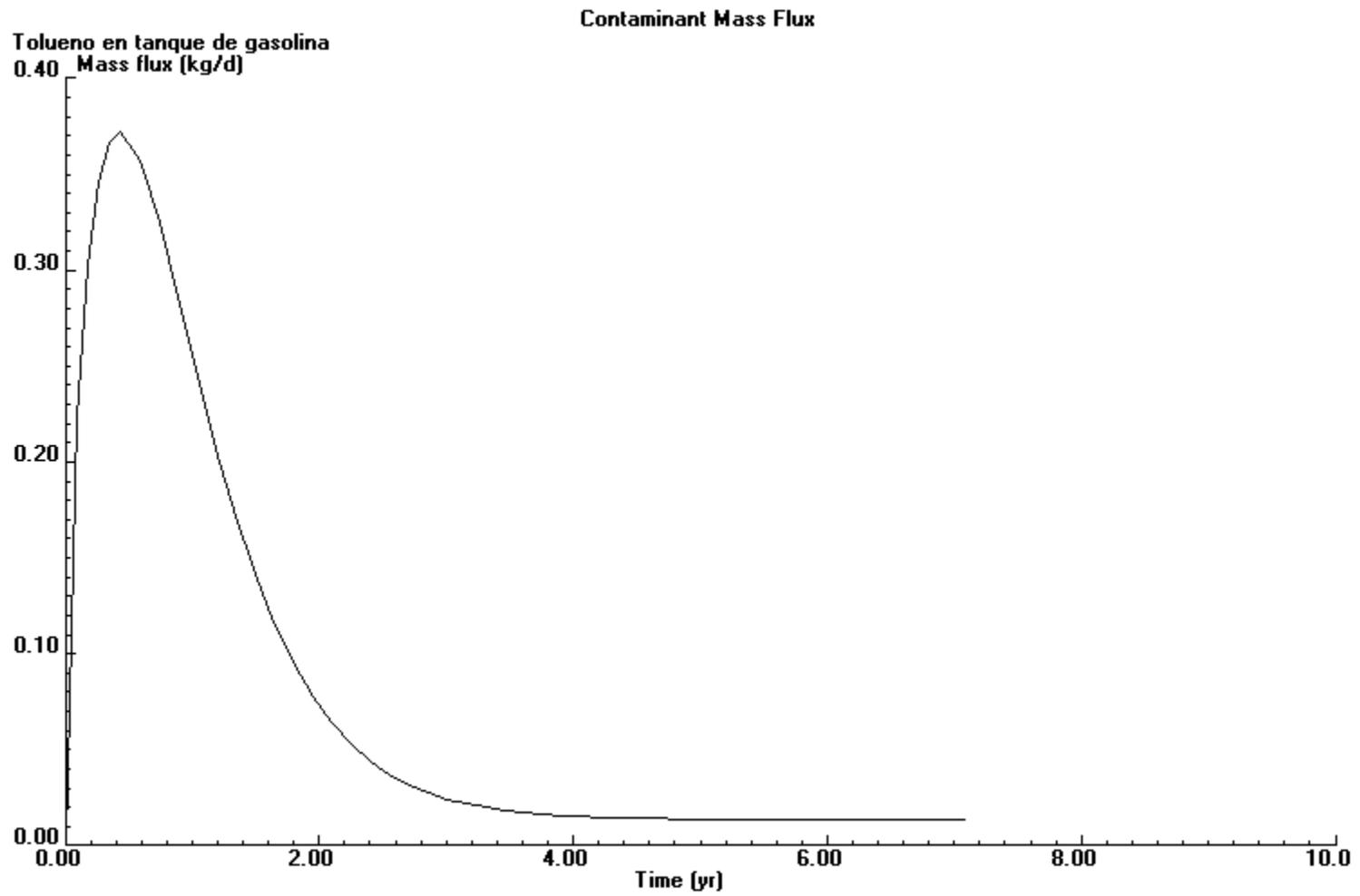


A.26 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL TOLUENO A LOS 150 DIAS

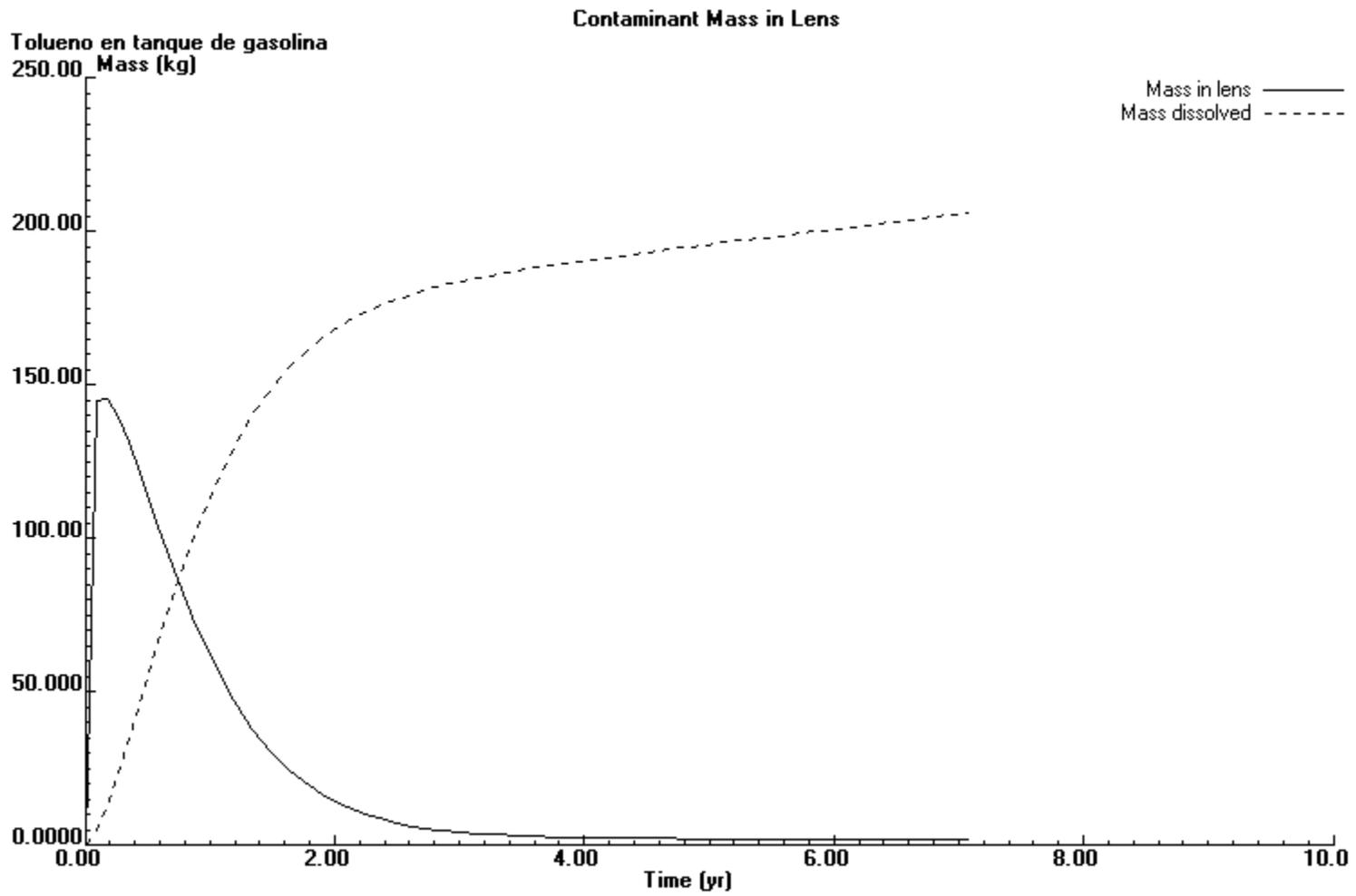
A.27 CURVA DE COMPORTAMIENTO DEL RADIO PARA EL TOLUENO



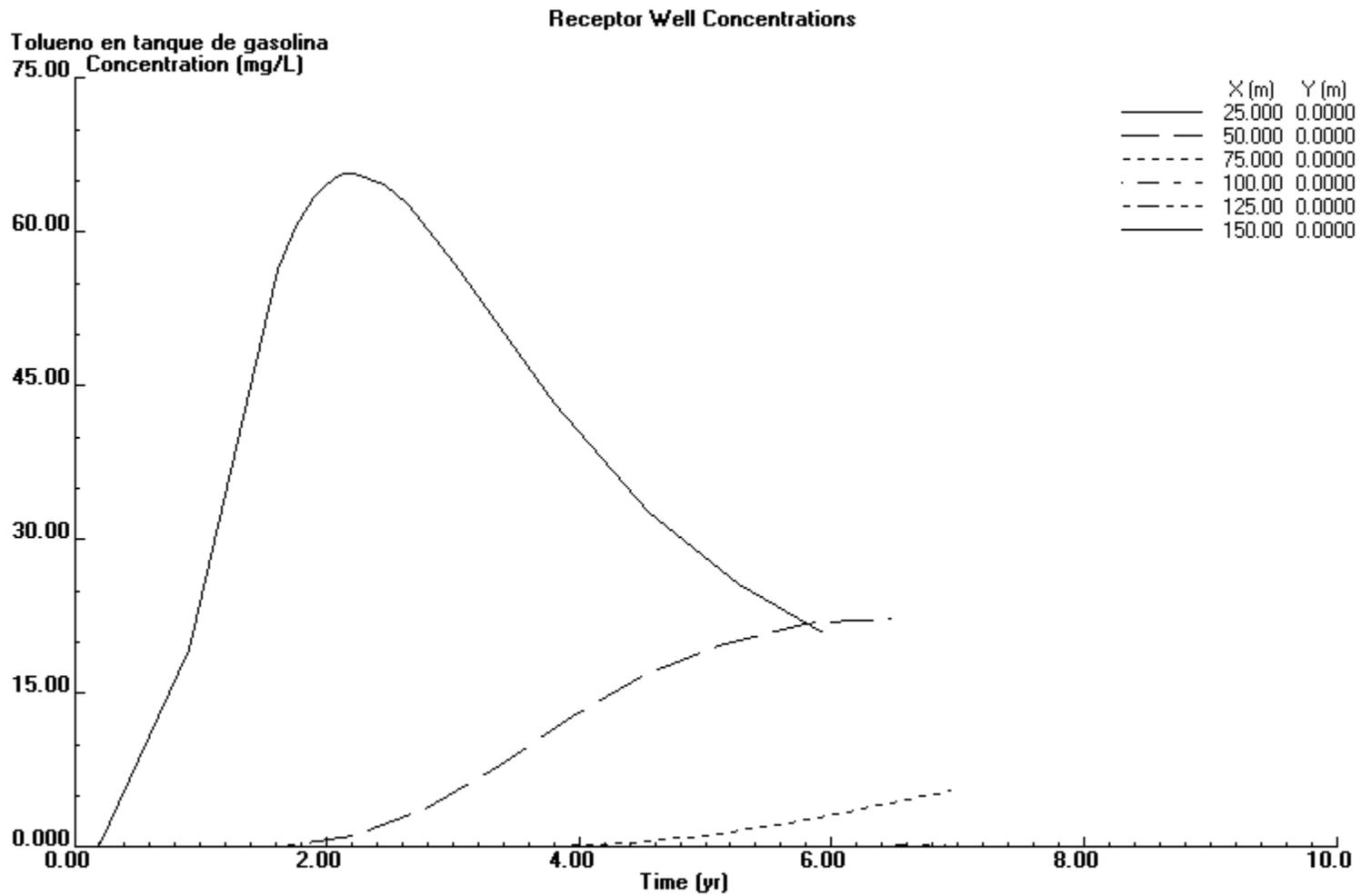
A.28 FLUJO DE LA MASA DEL TOLUENO



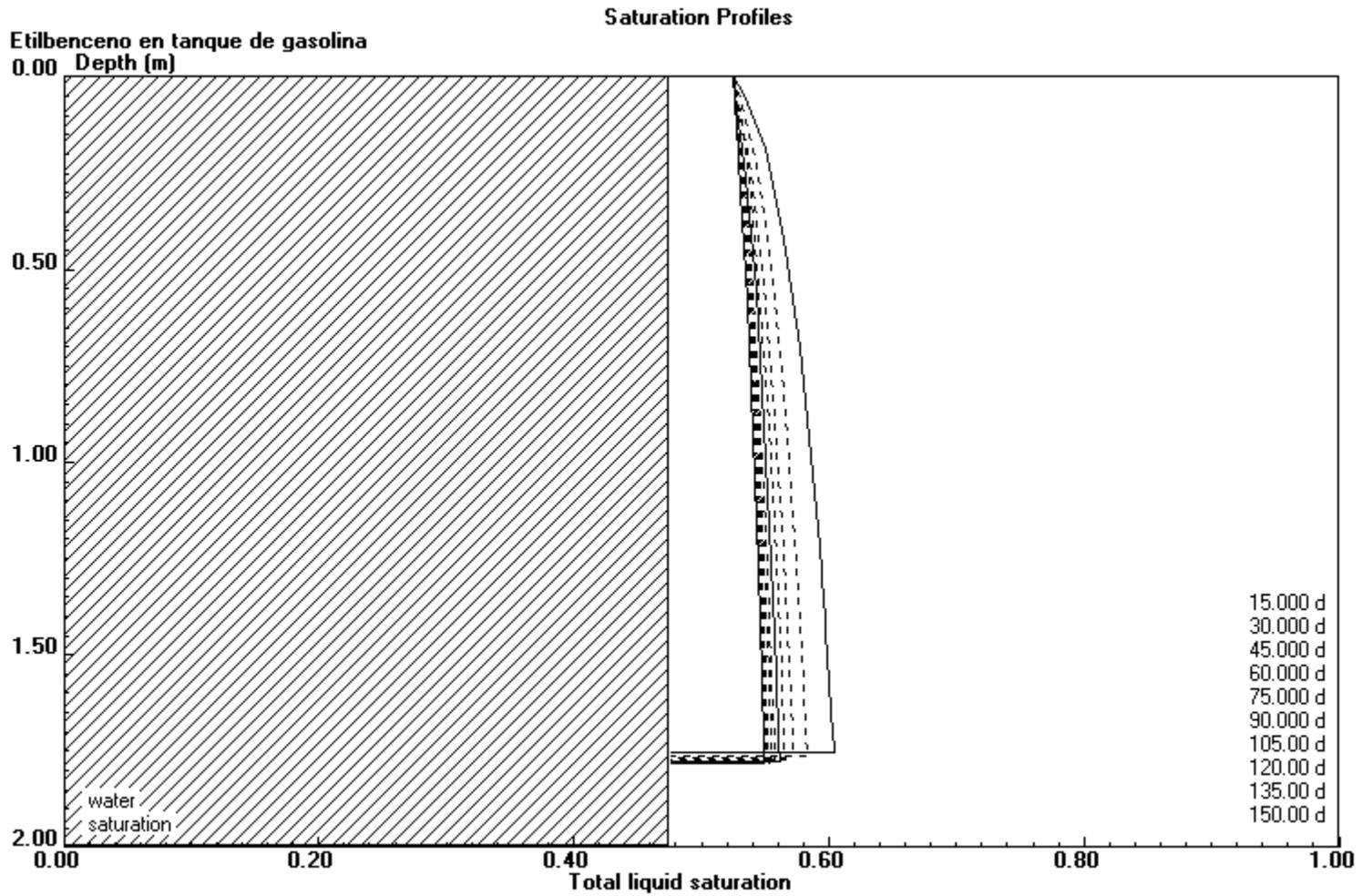
A.29 BALANCE DE MASA EN LA LENTE PARA EL TOLUENO

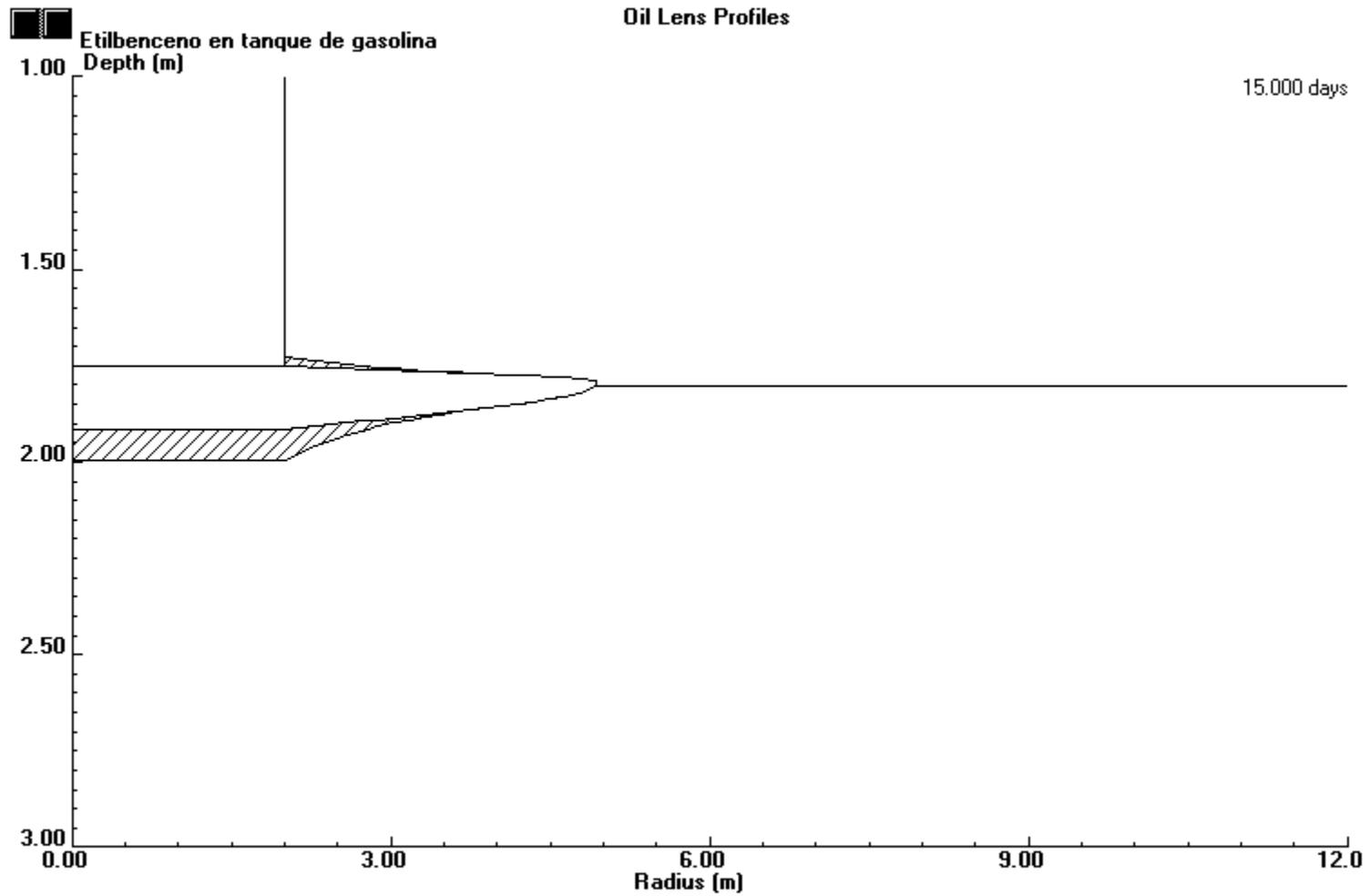


A.30 CONCENTRACIONES EN LOS SONDEOS DE OBSERVACION PARA EL TOLUENO

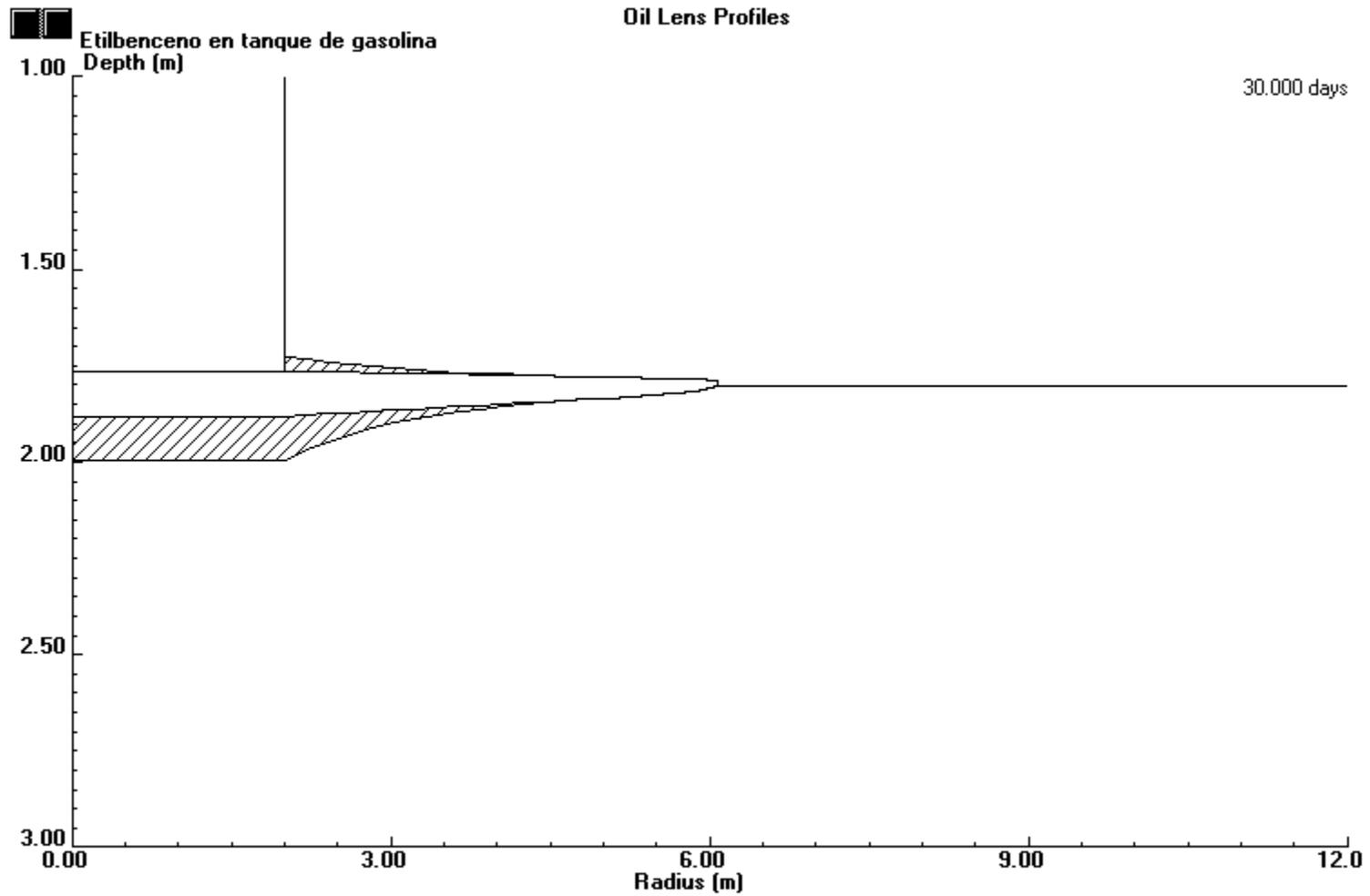


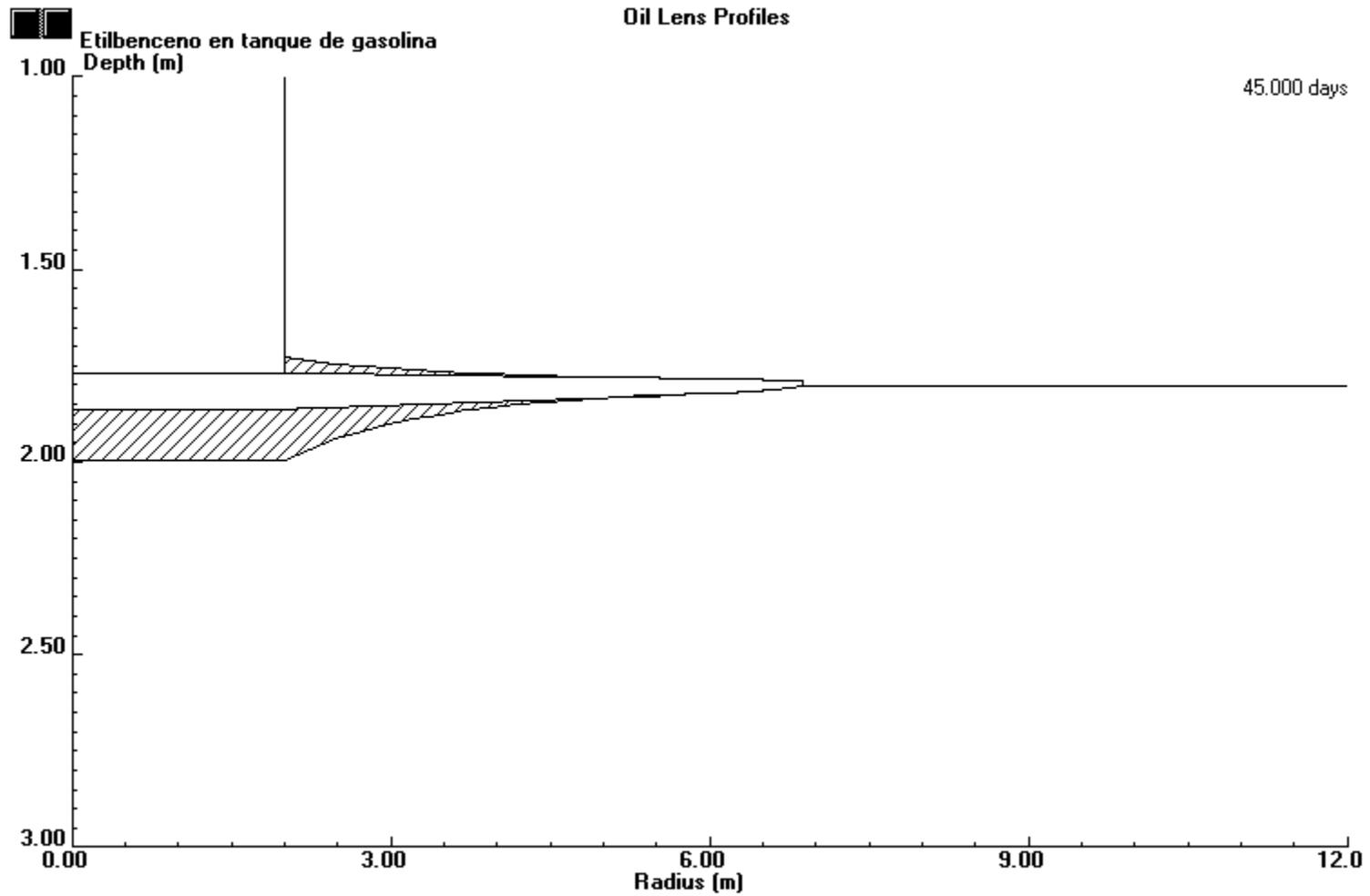
A. 31 PERFIL DE SATURACION PARA EL ETILBENCENO



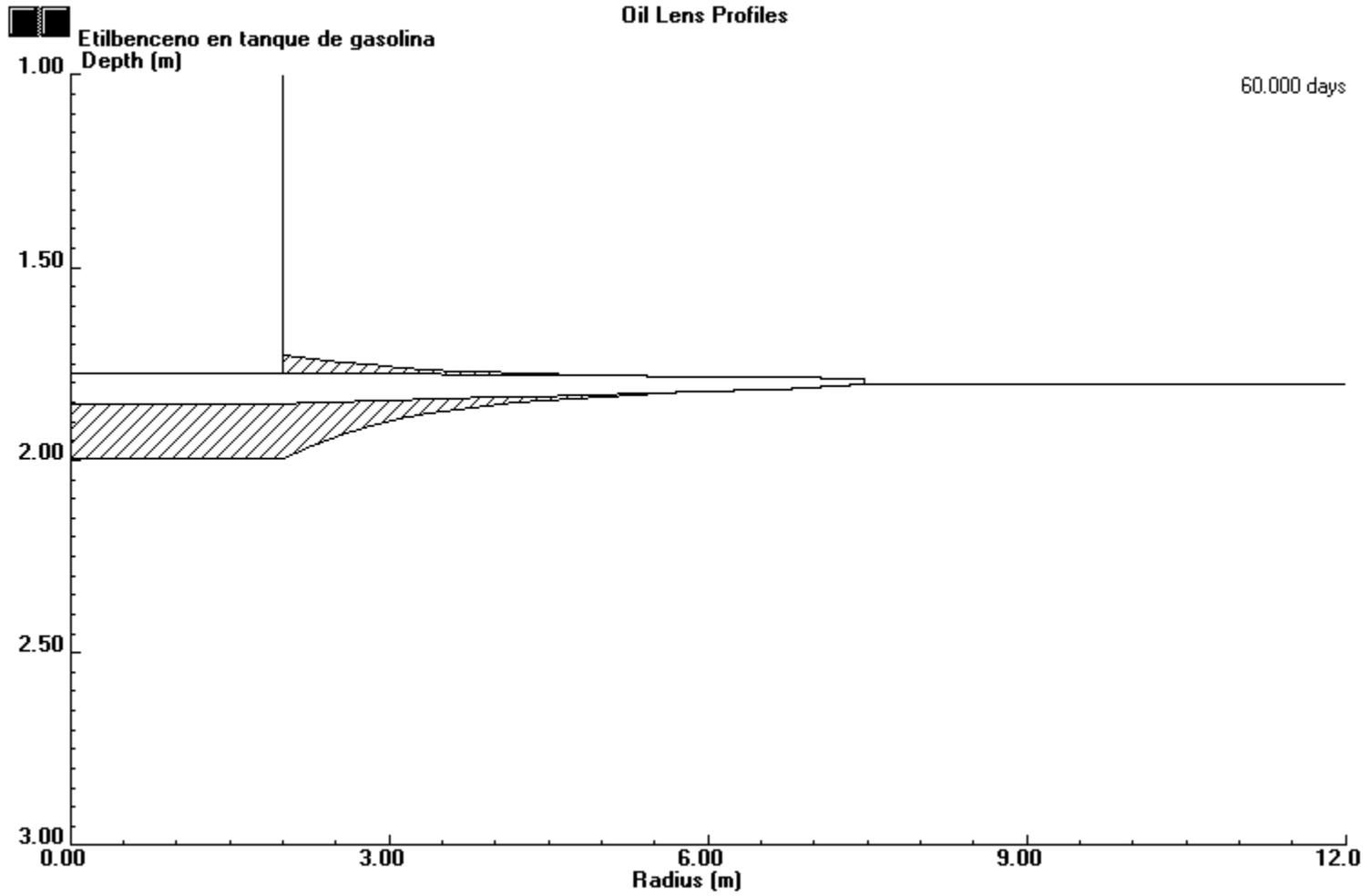
A.32 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 15 DIAS

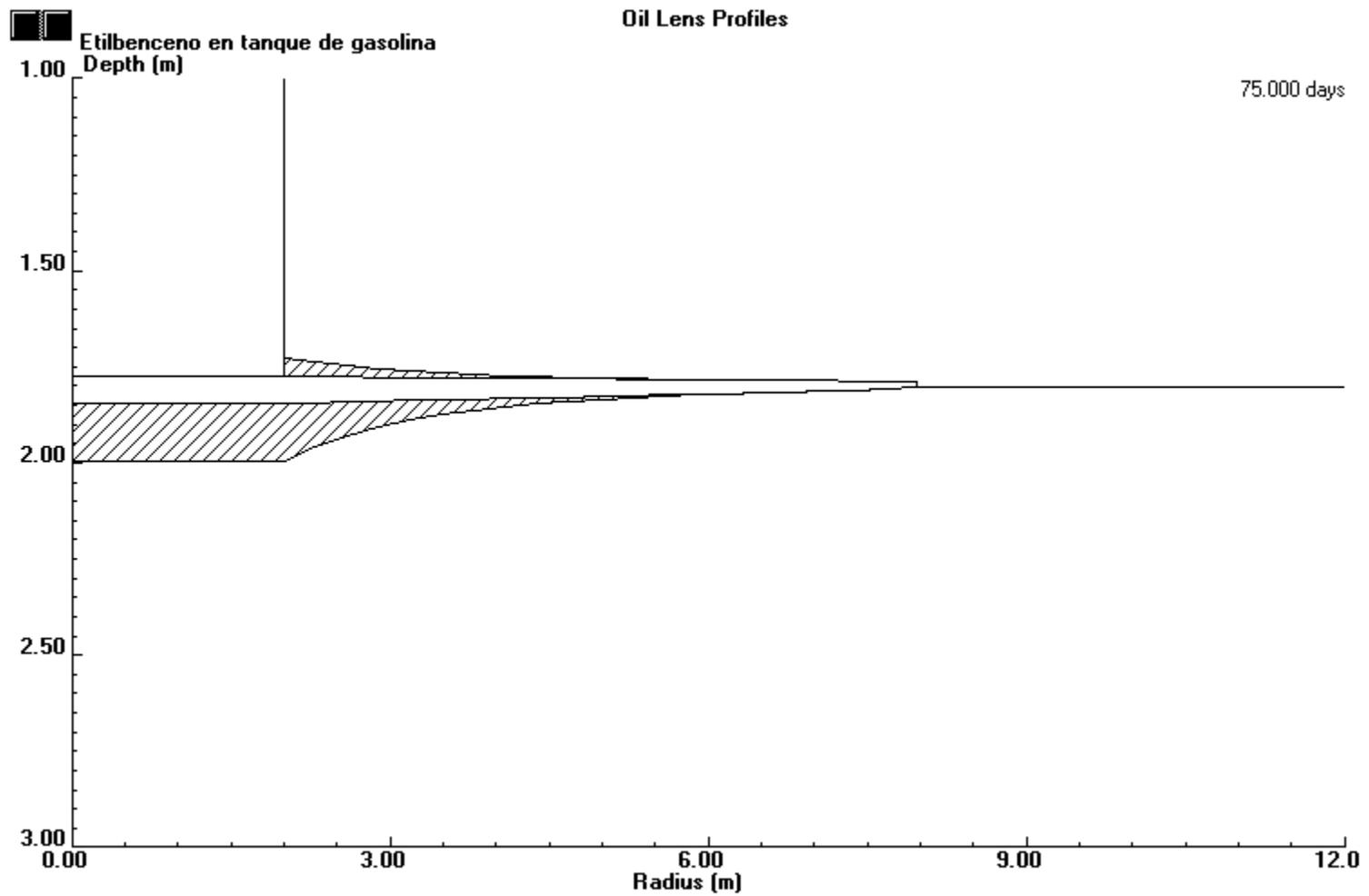
A.33 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 30 DIAS

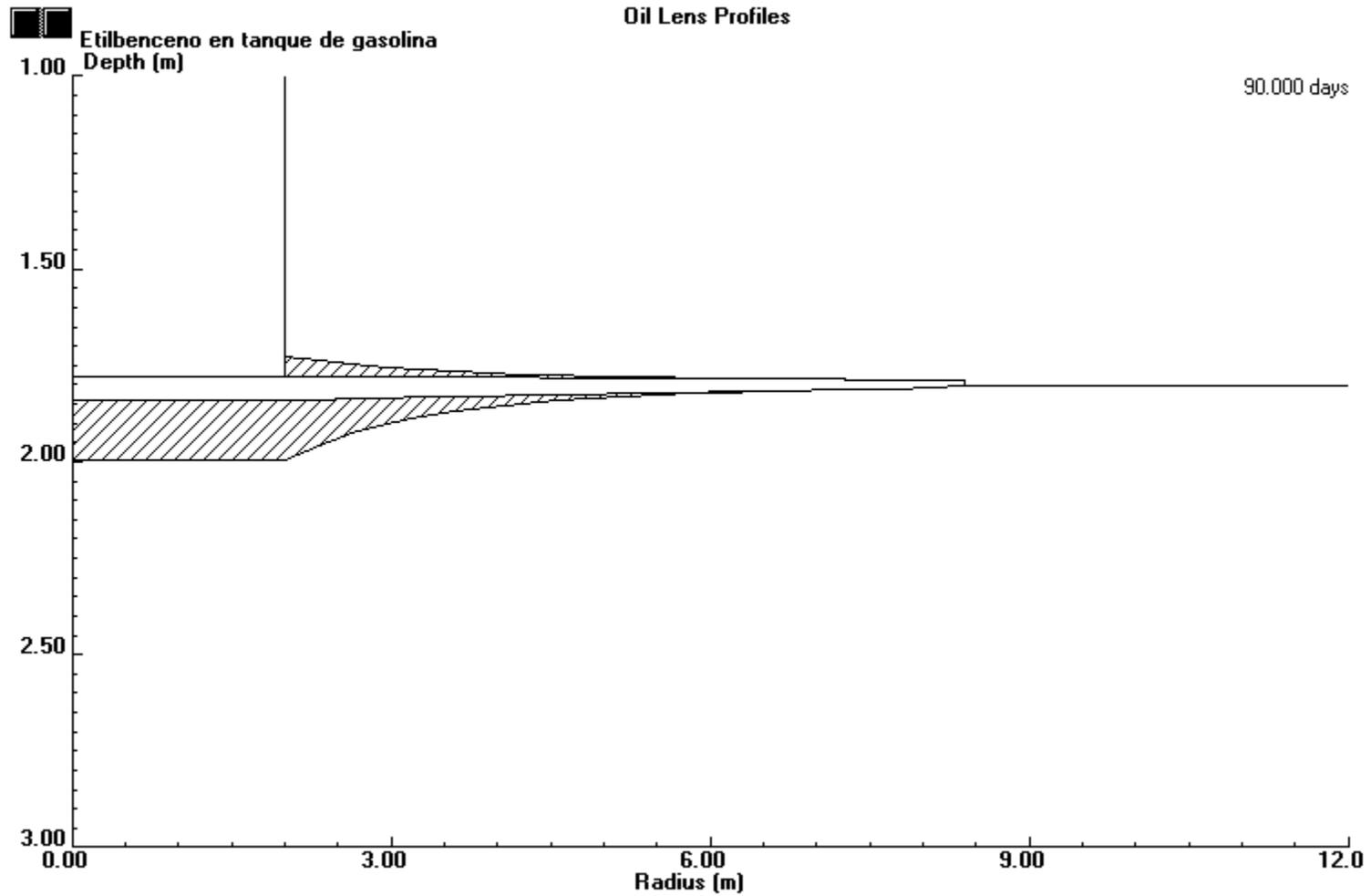


A.34 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 45 DIAS

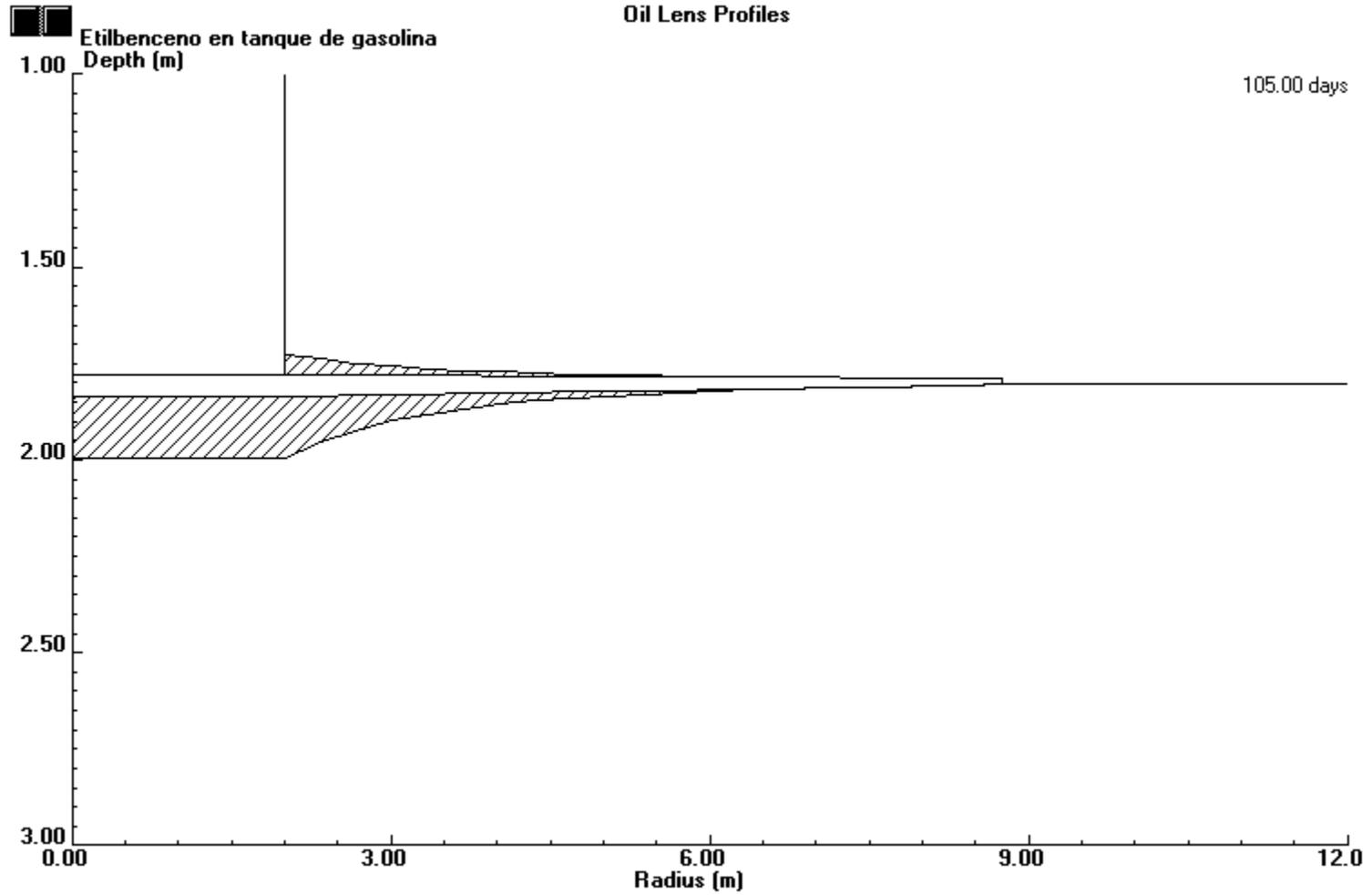
A.35 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 60 DIAS



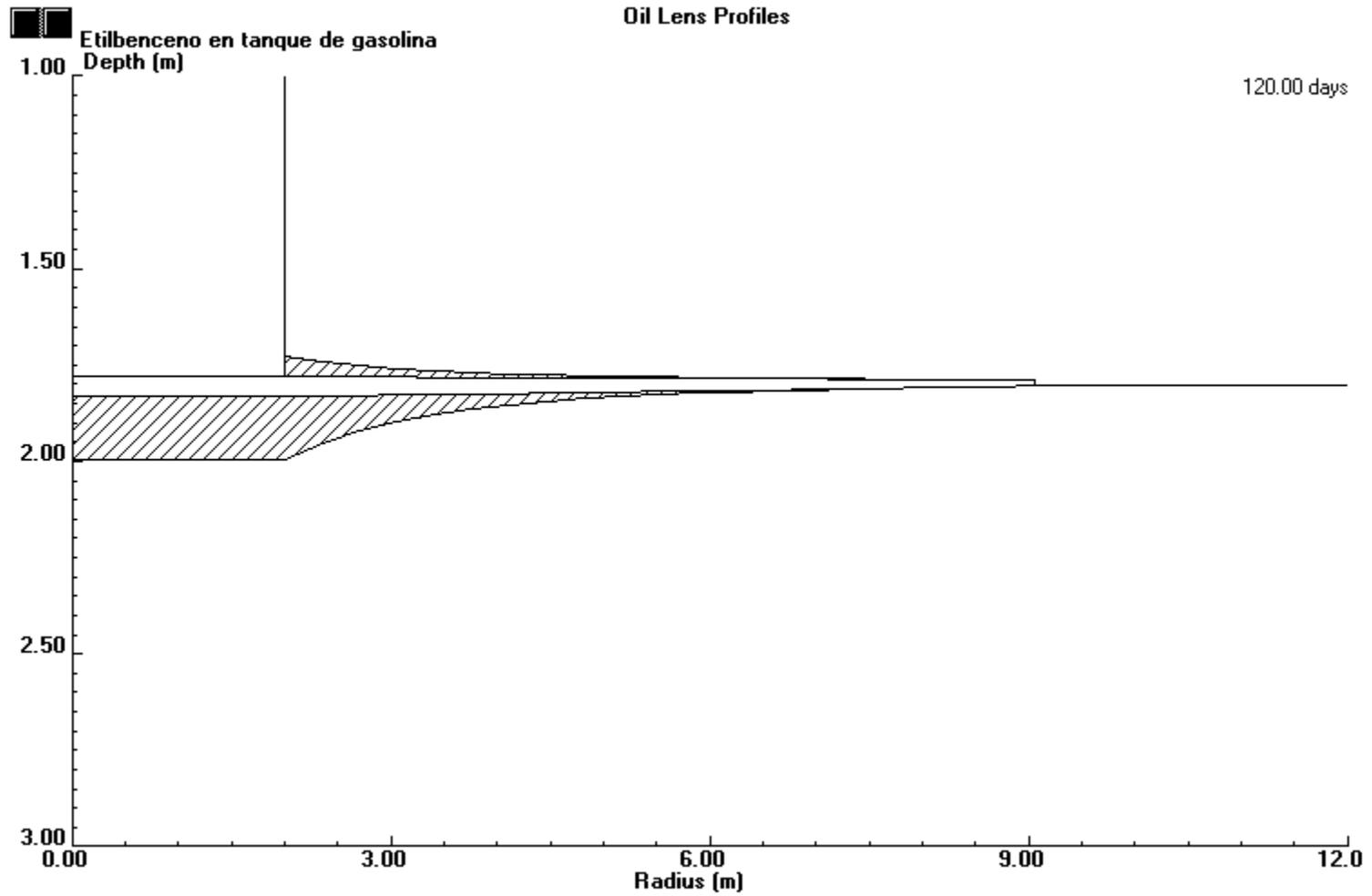
A.36 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 75 DIAS

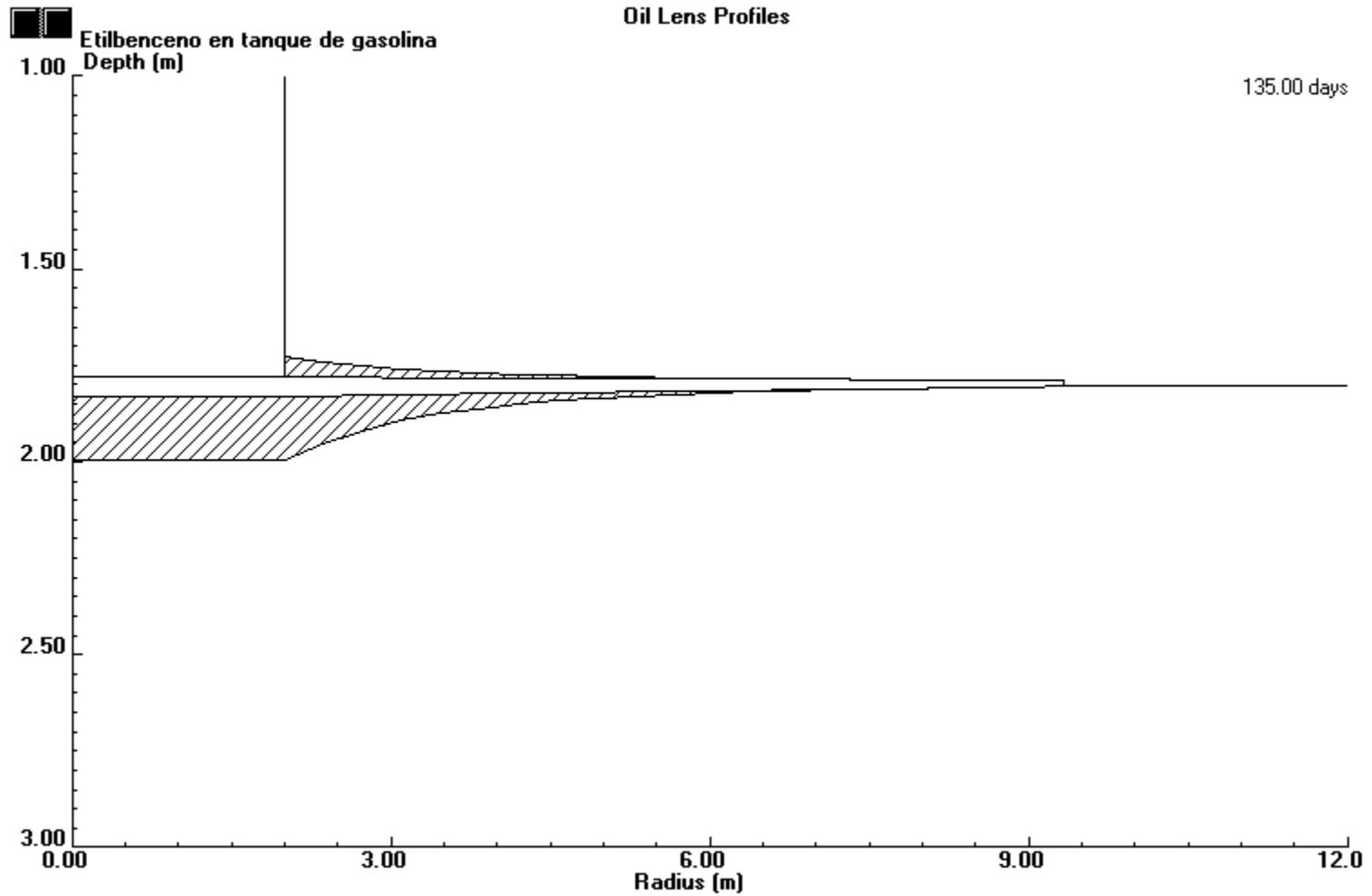
A.37 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 90 DIAS

A.38 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 105 DIAS

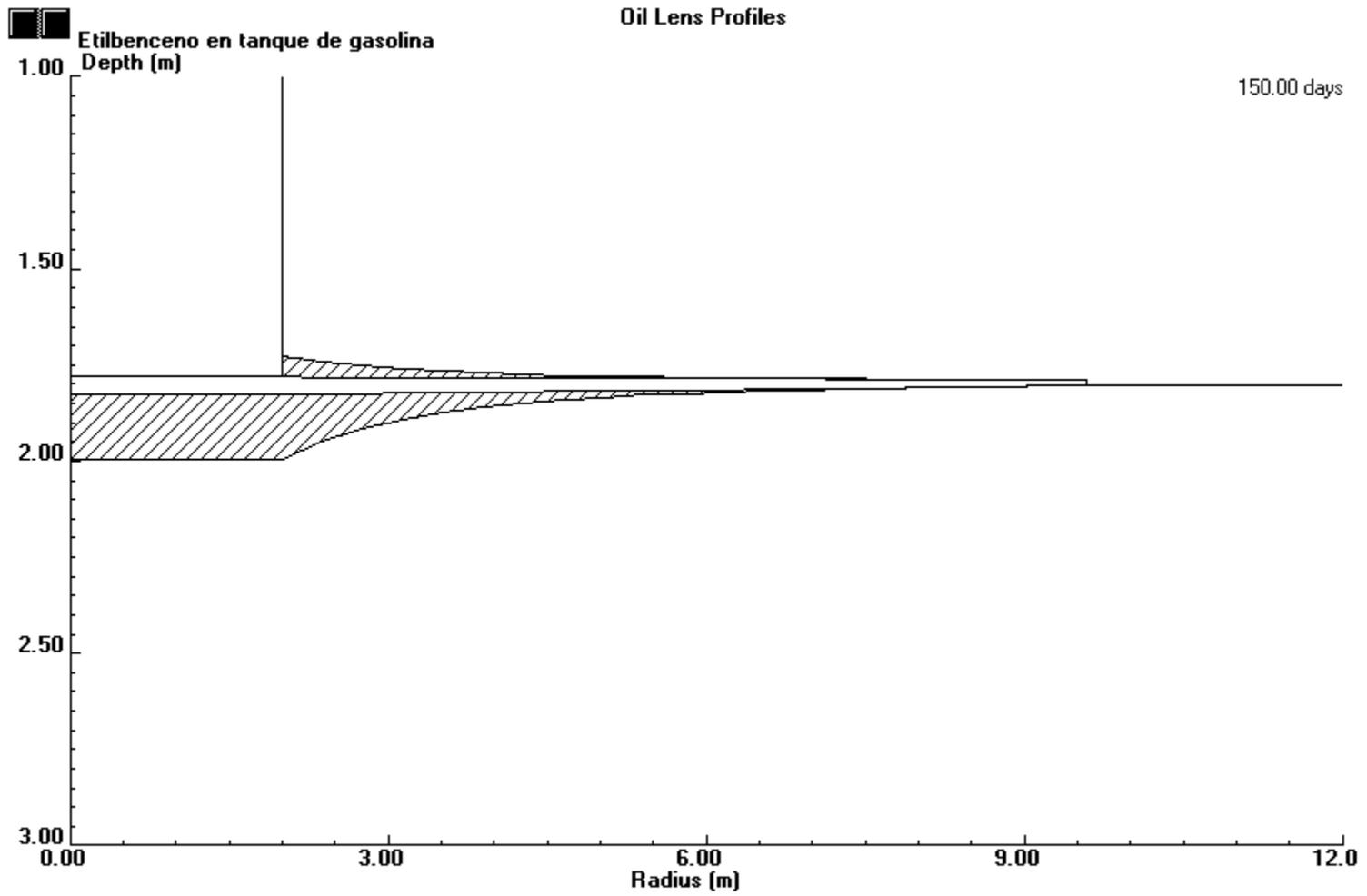


A.39 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 120 DIAS

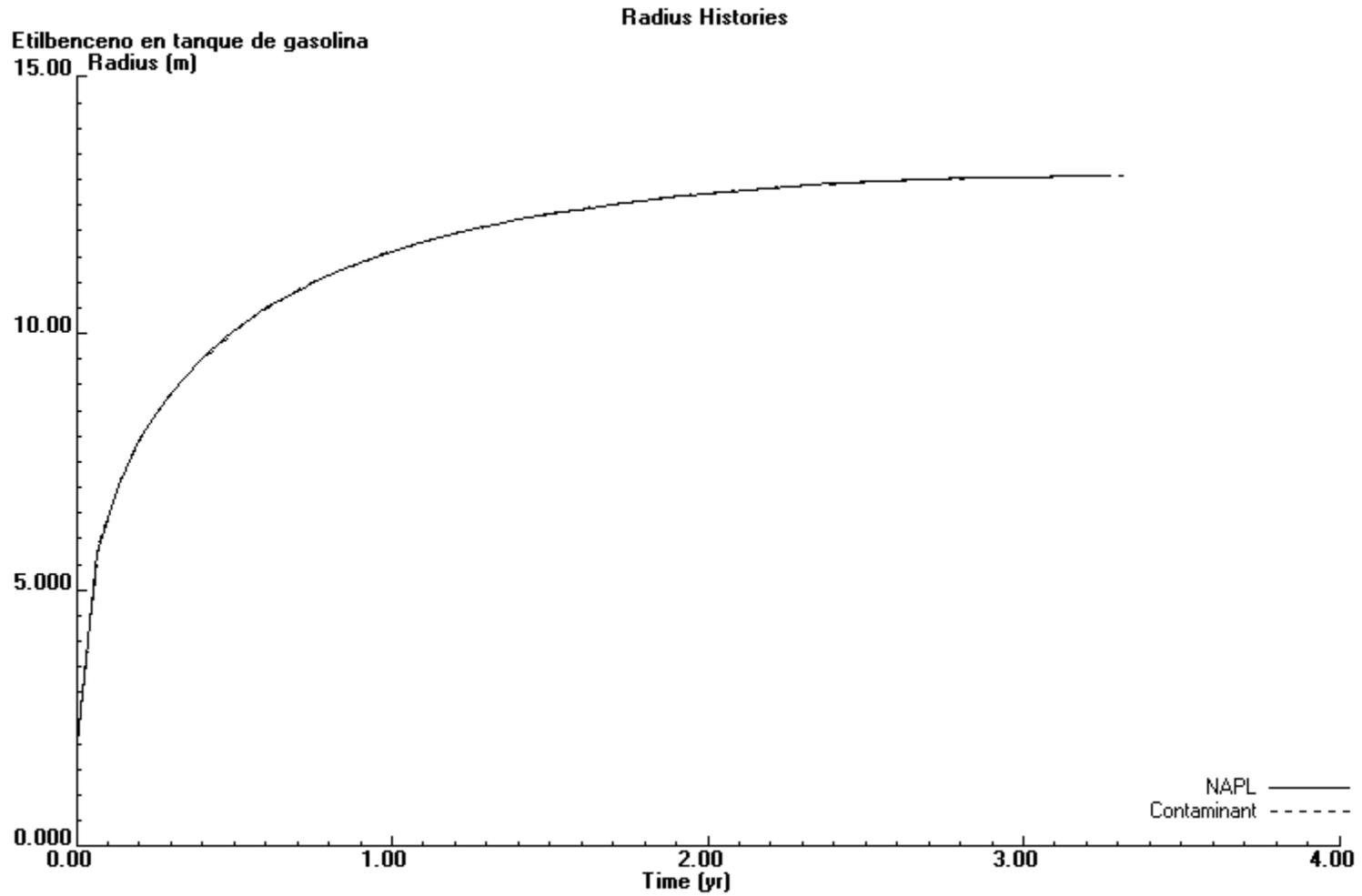


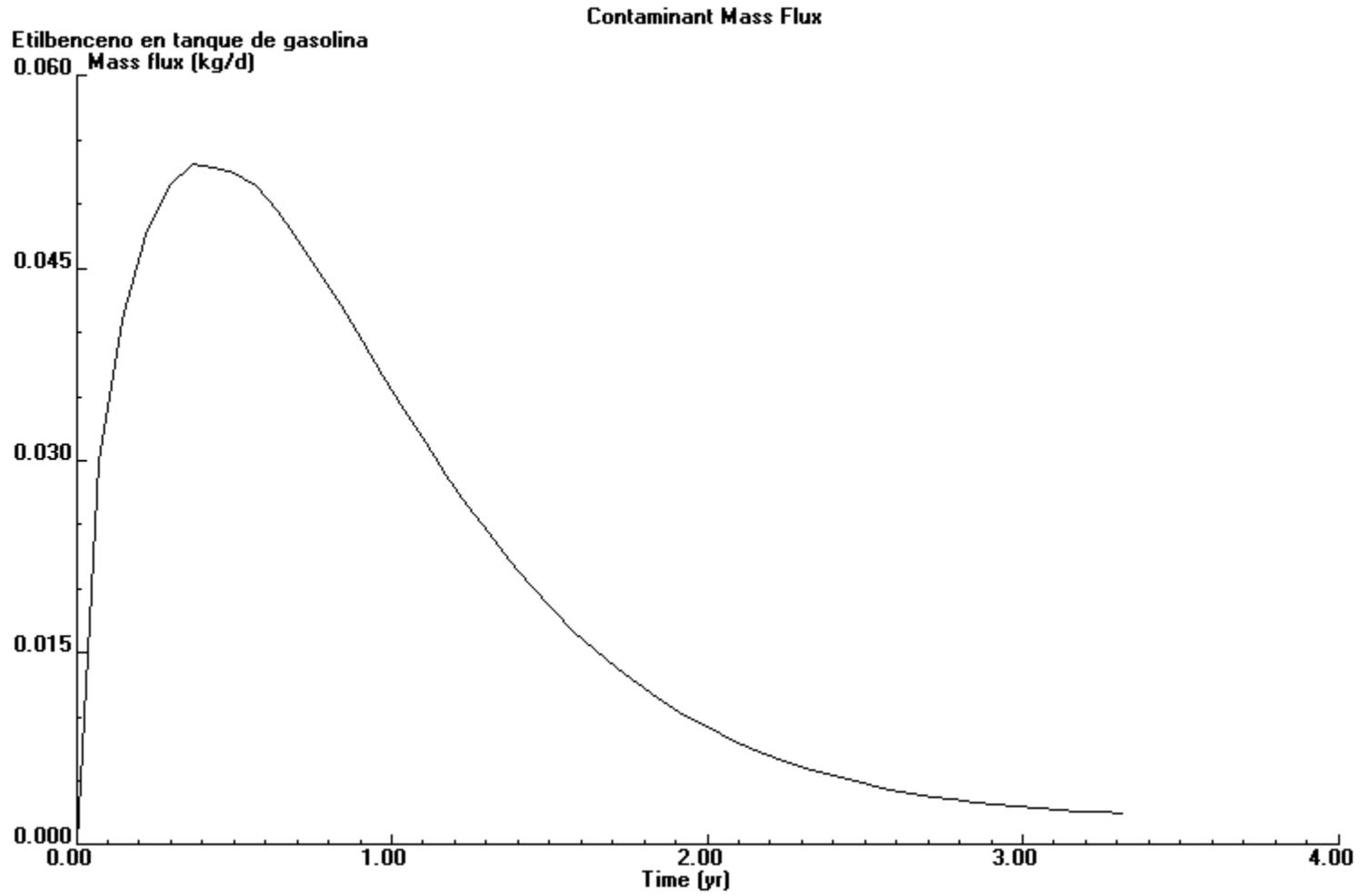
A.40 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 135 DIAS

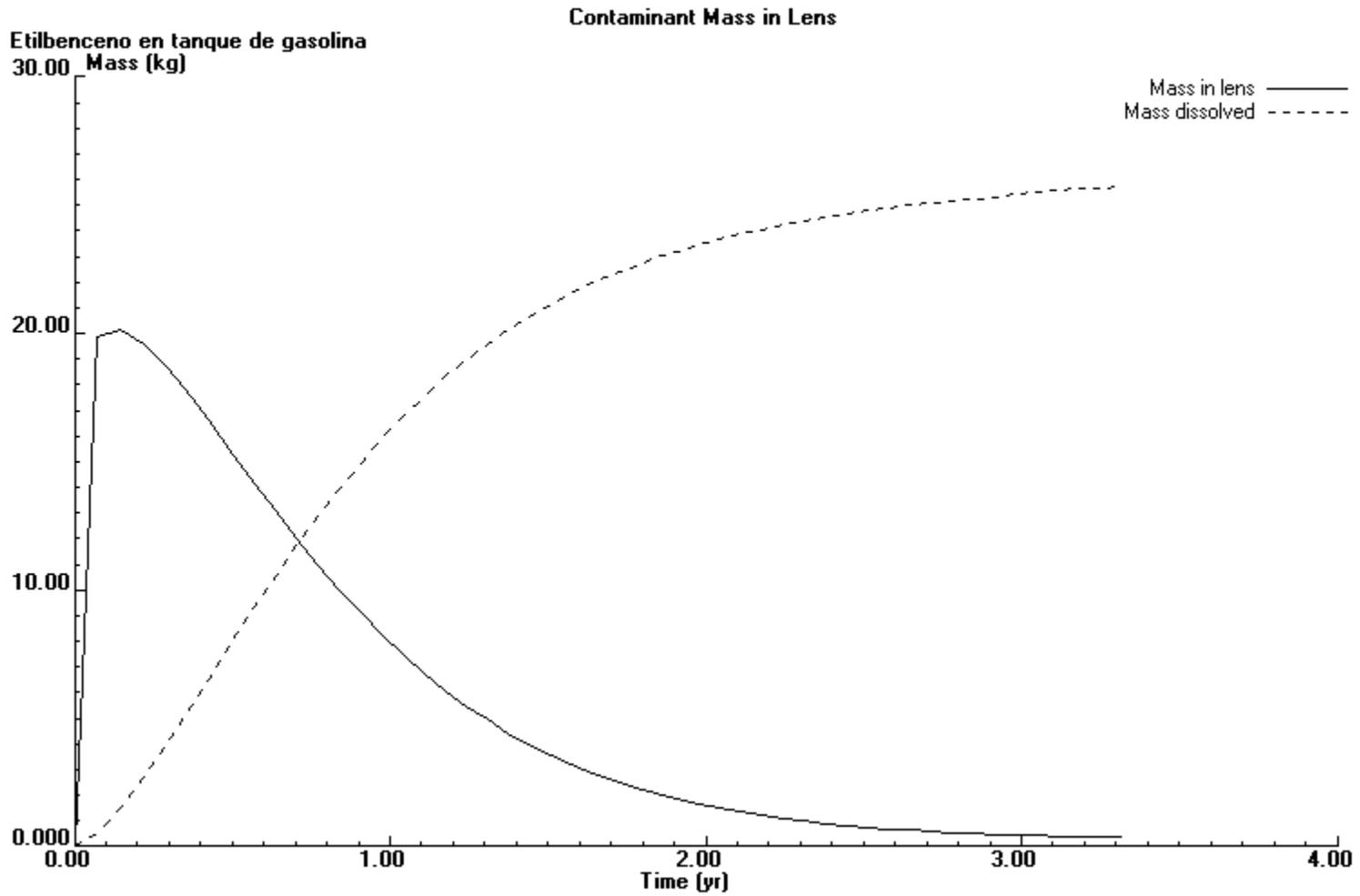
A.41 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL ETILBENCENO A LOS 150 DIAS



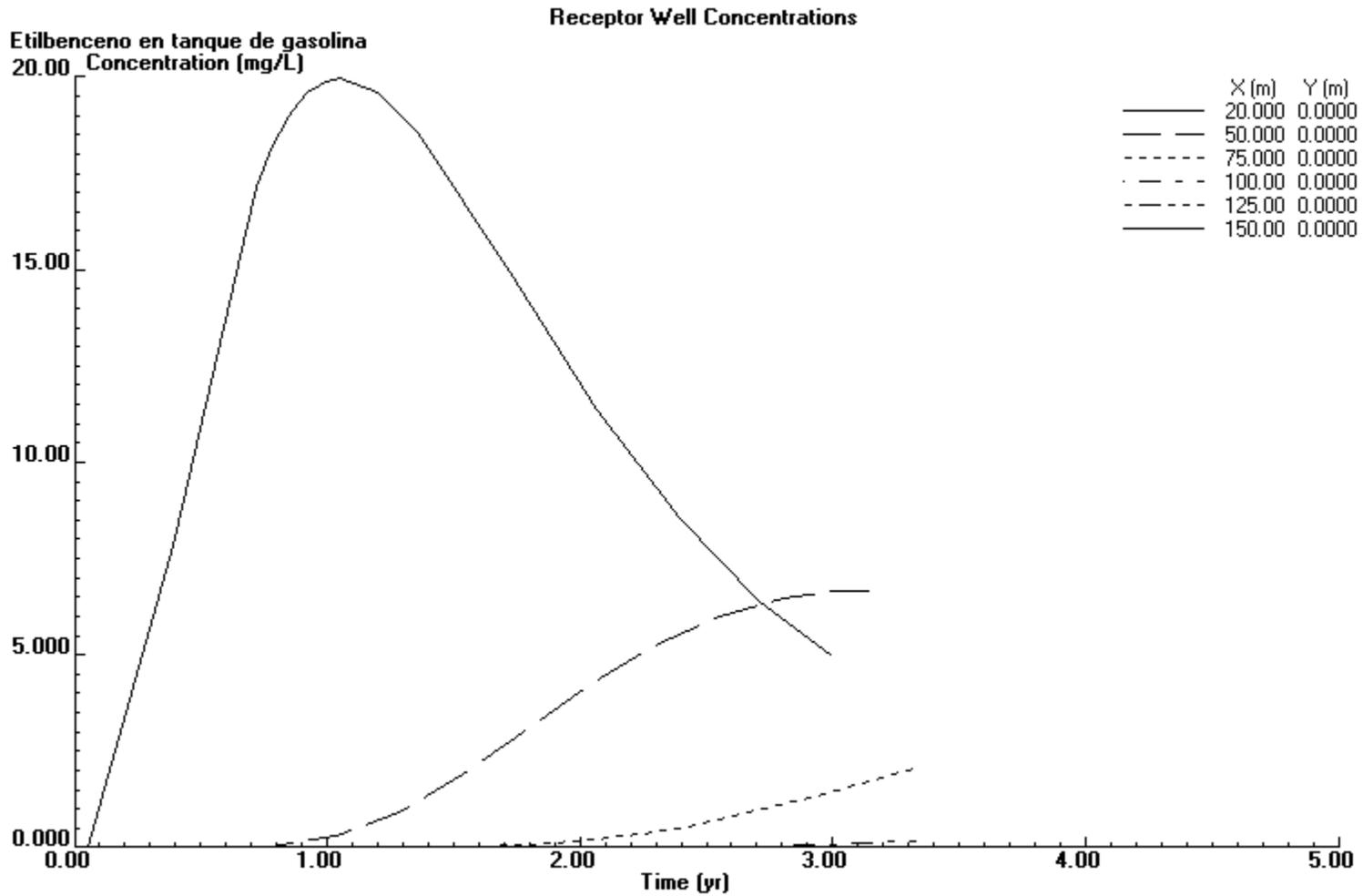
A.42 CURVA DE COMPORTAMIENTO DEL RADIO PARA EL ETILBENCENO



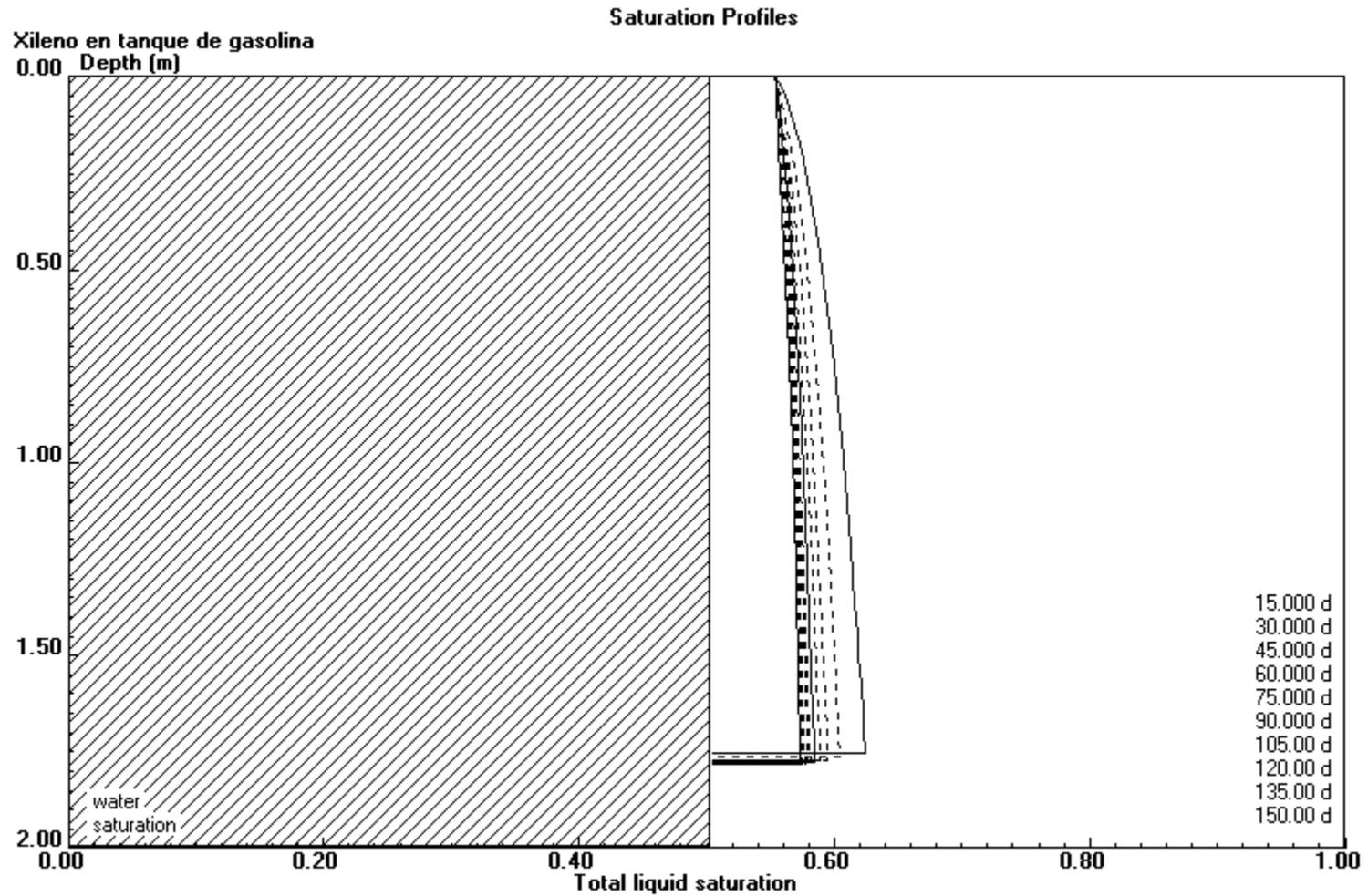
A. 43 FLUJO DE MADA DEL CONTAMINANTE PARA EL ETILBENCENO

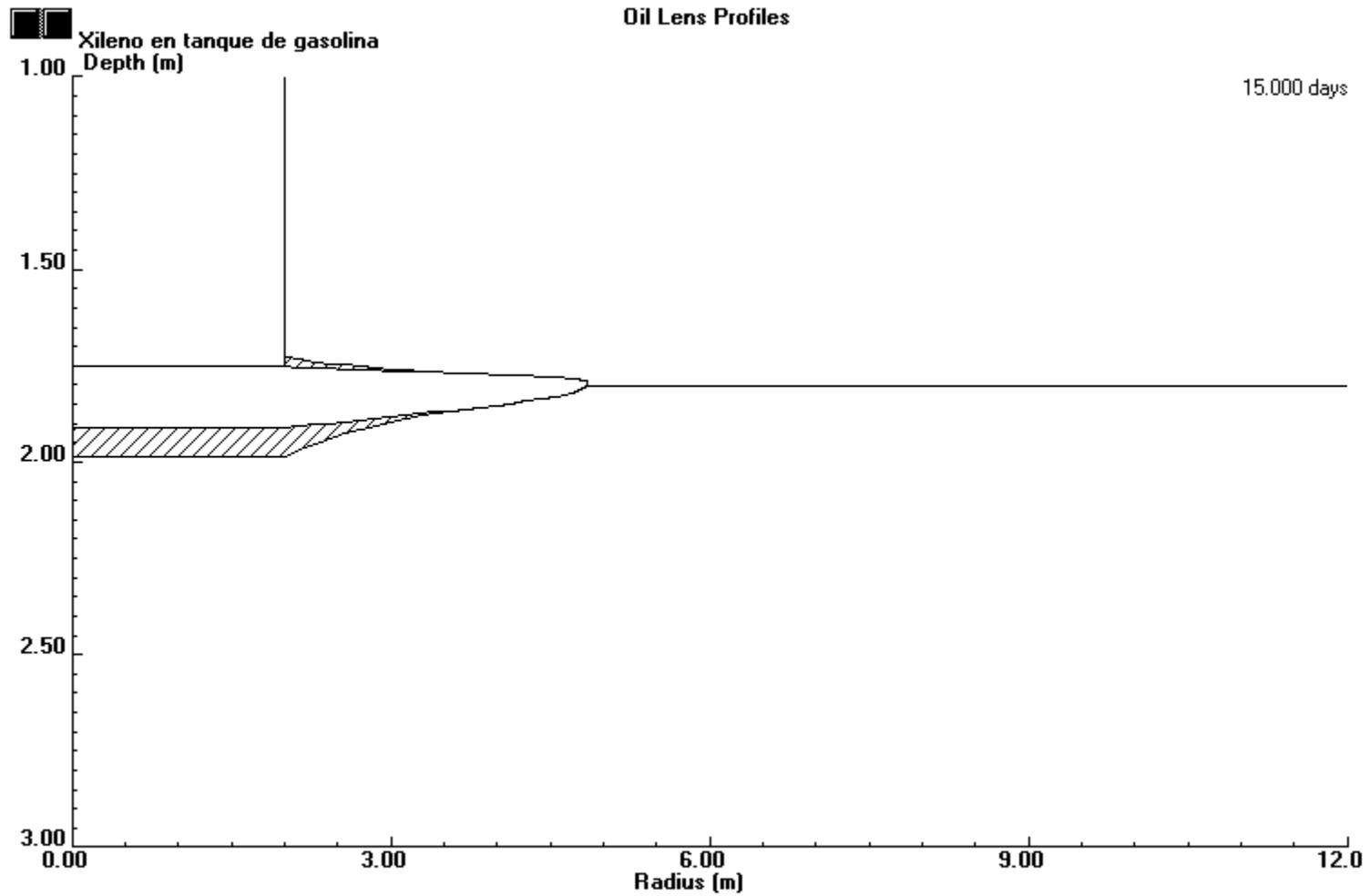
A. 44 BALANCE DE MASA EN LA LENTE PARA EL ETILBENCENO

A.45 CONCENTRACIONES EN LOS SONDEOS DE OBSERVACION PARA EL ETILBENCENO

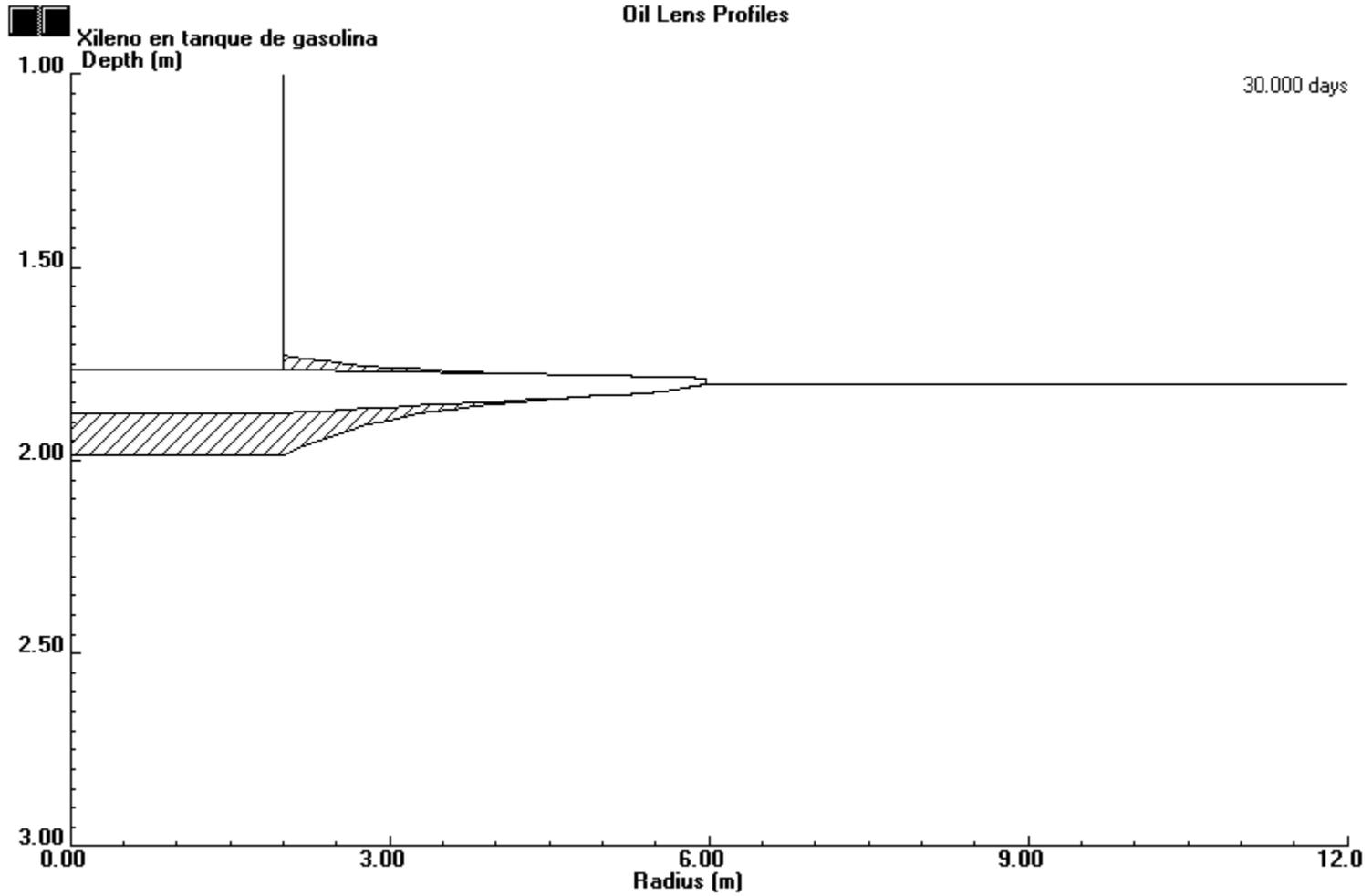


A.46 PERFIL DE SATURACION PARA EL XILENO

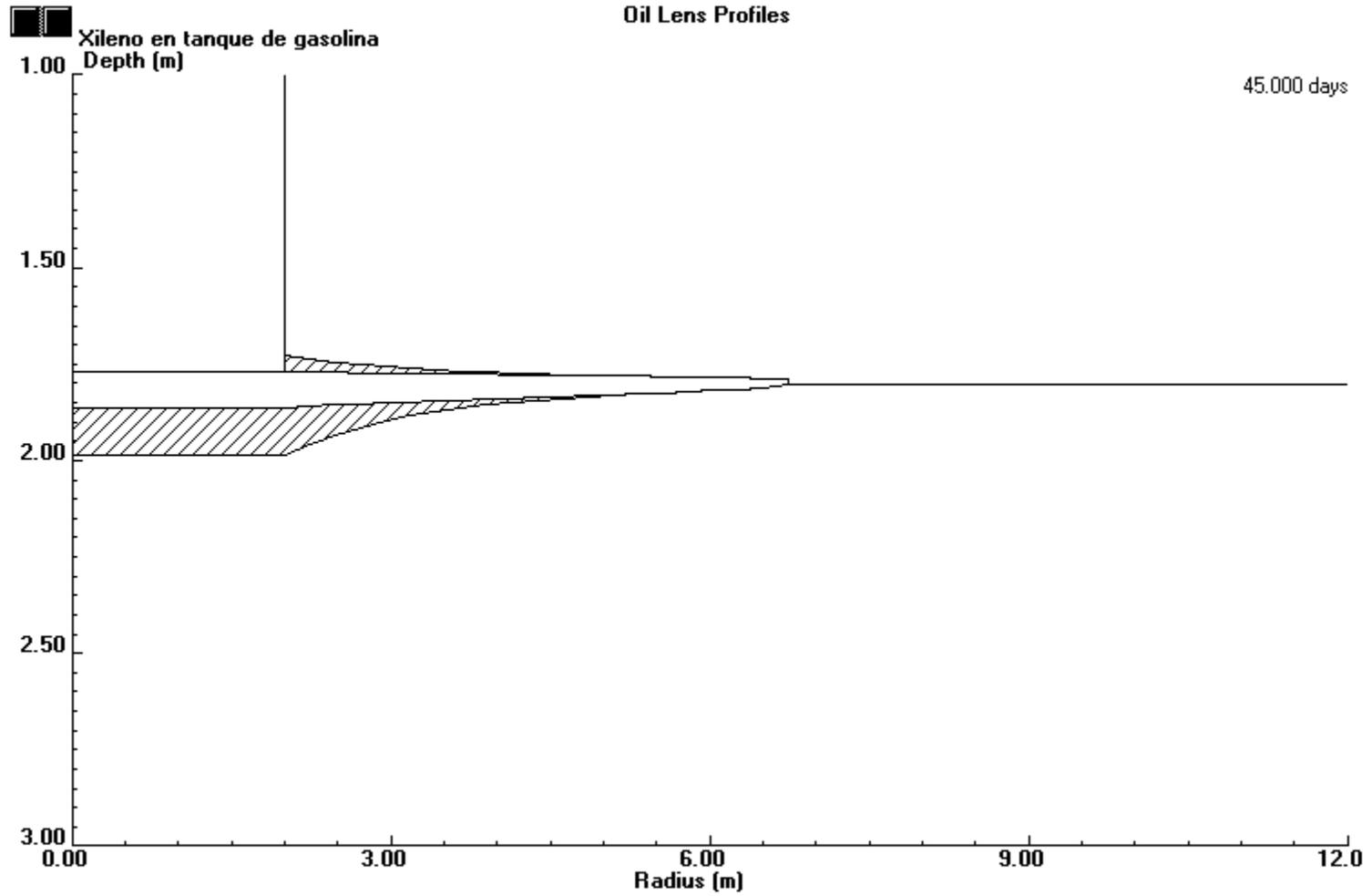


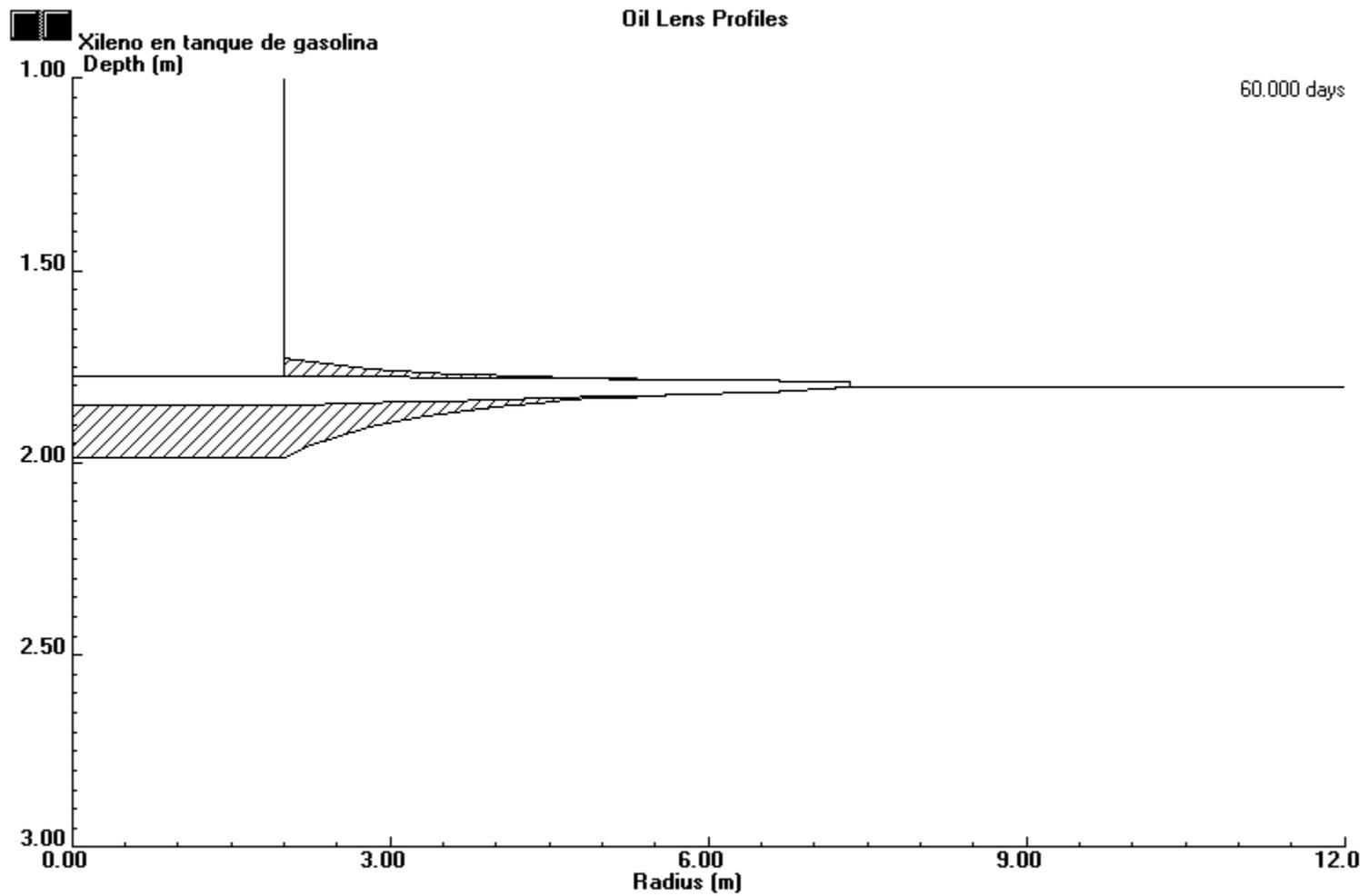
A.47 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 15 DIAS

A. 48 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 30 DIAS

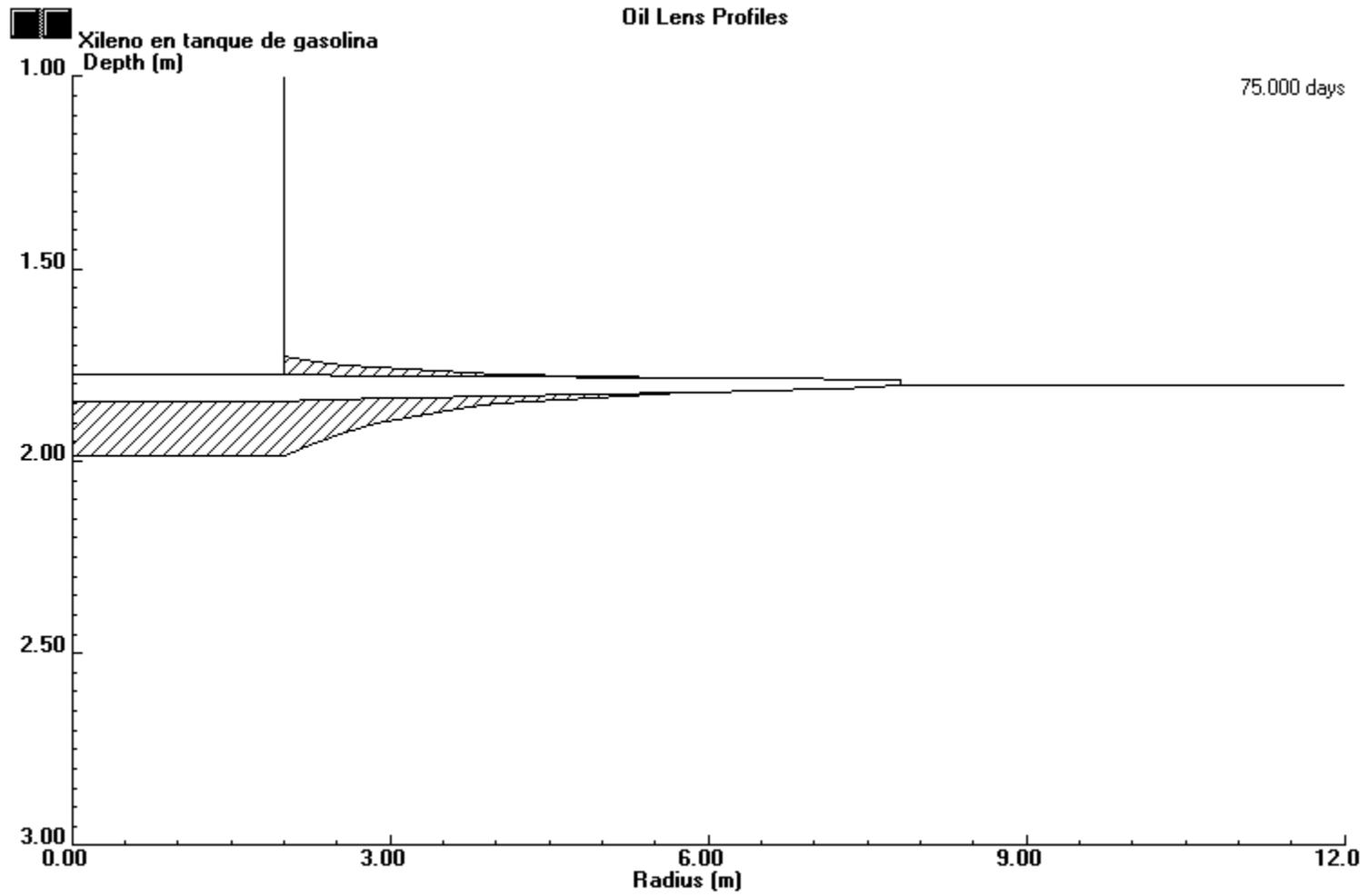


A.49 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 45 DIAS

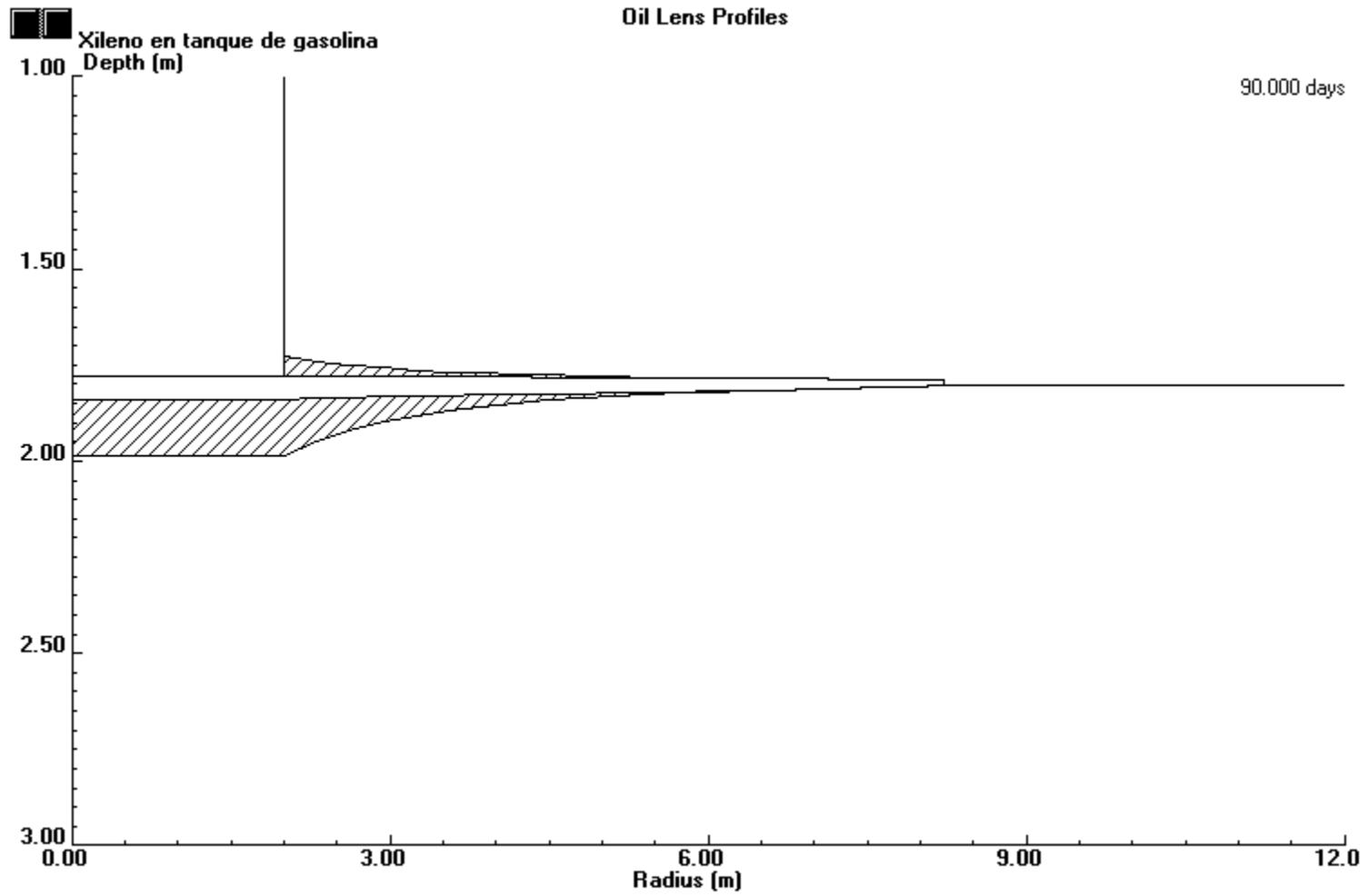


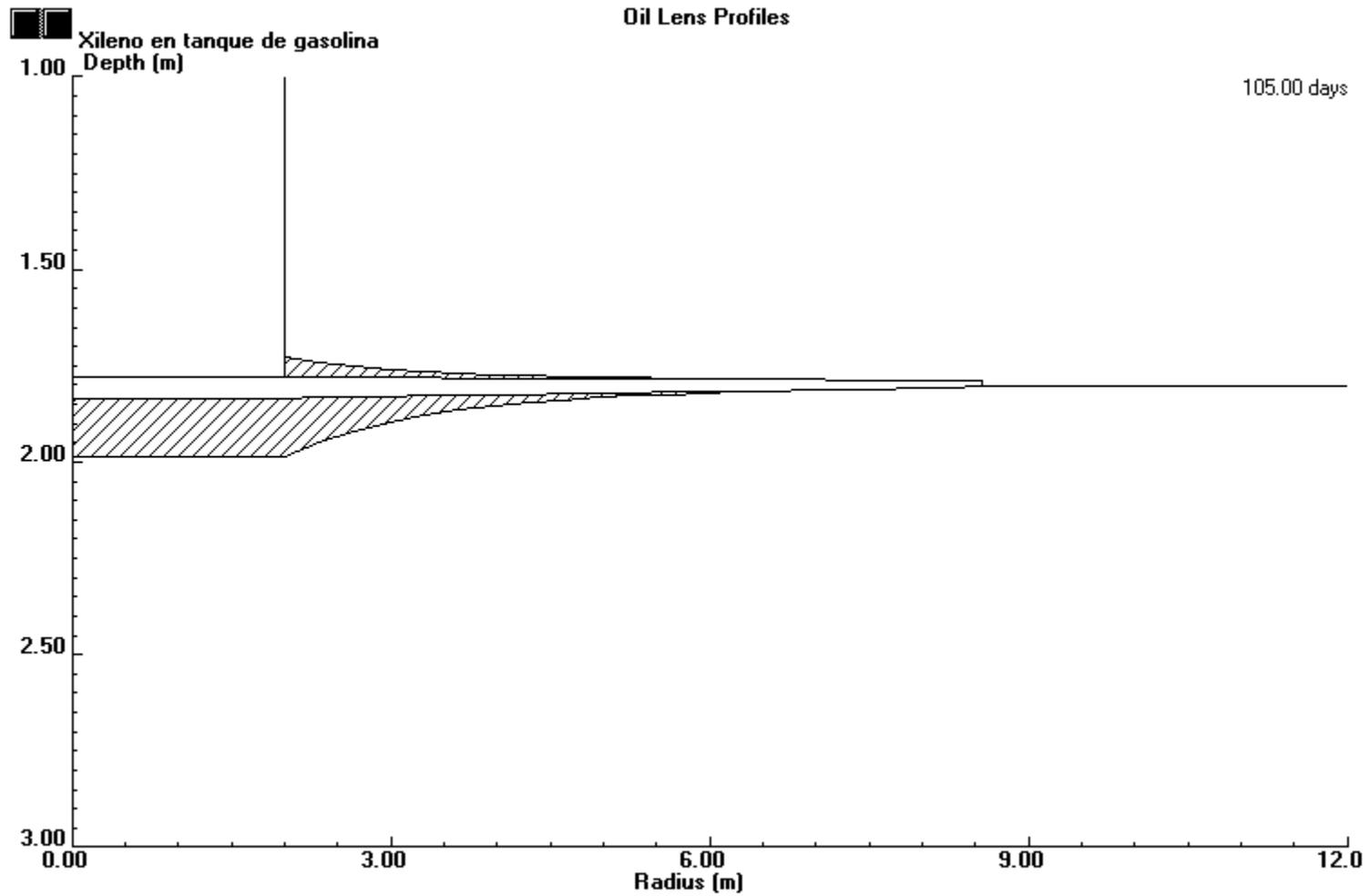
A.50 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 60 DIAS

A.51 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 75 DIAS

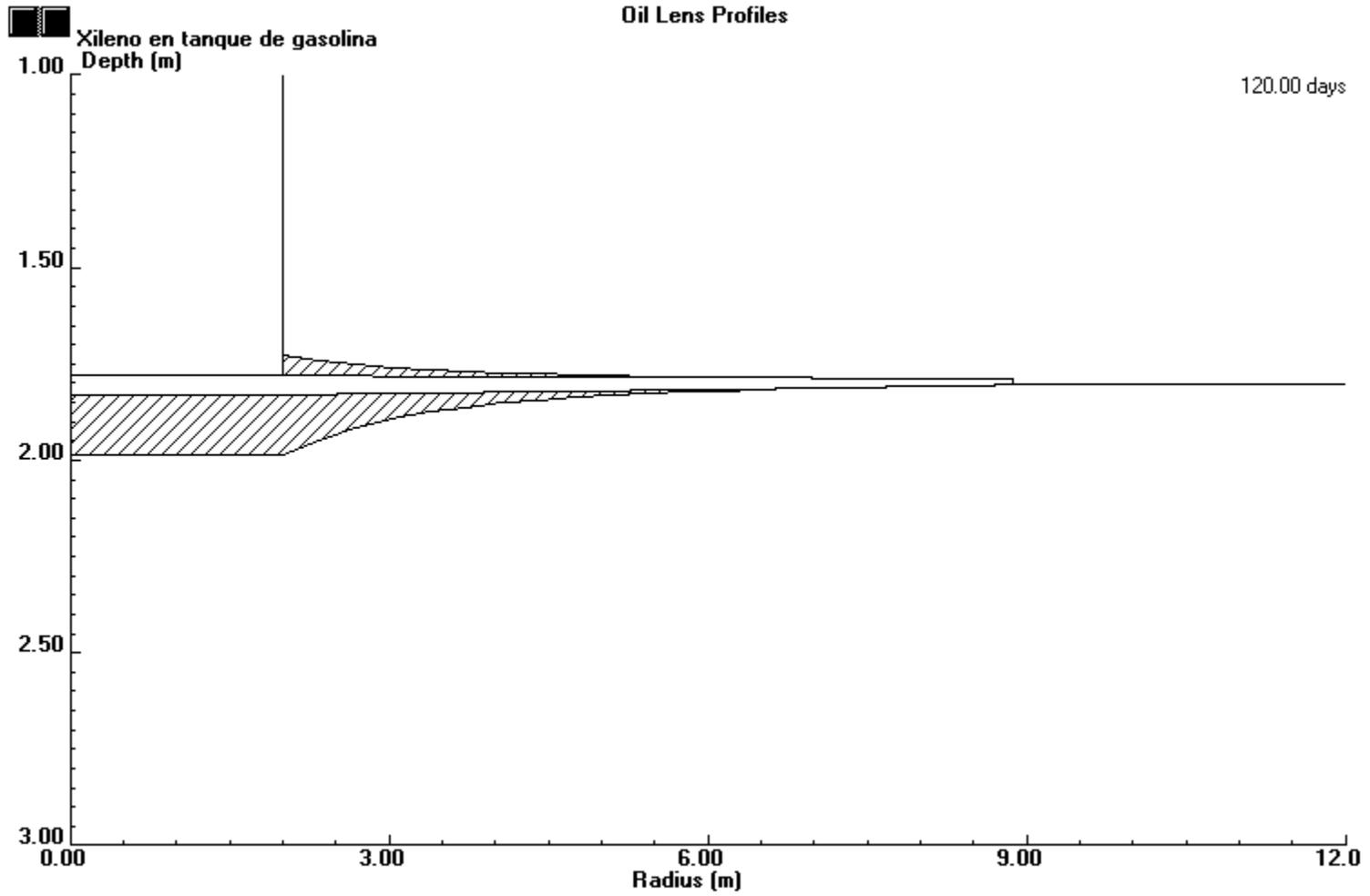


A. 52 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 90 DIAS

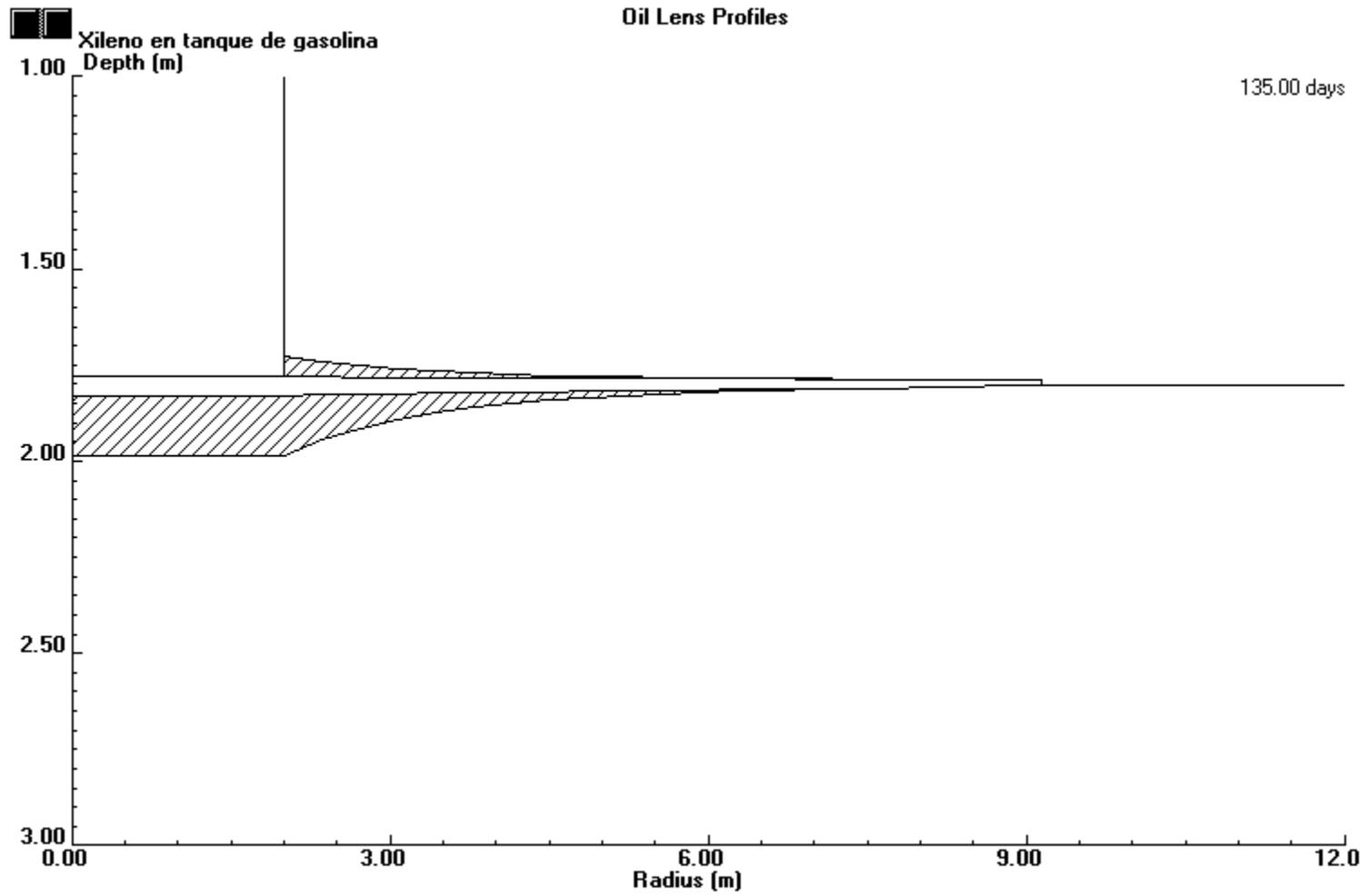


A.53 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 105 DIAS

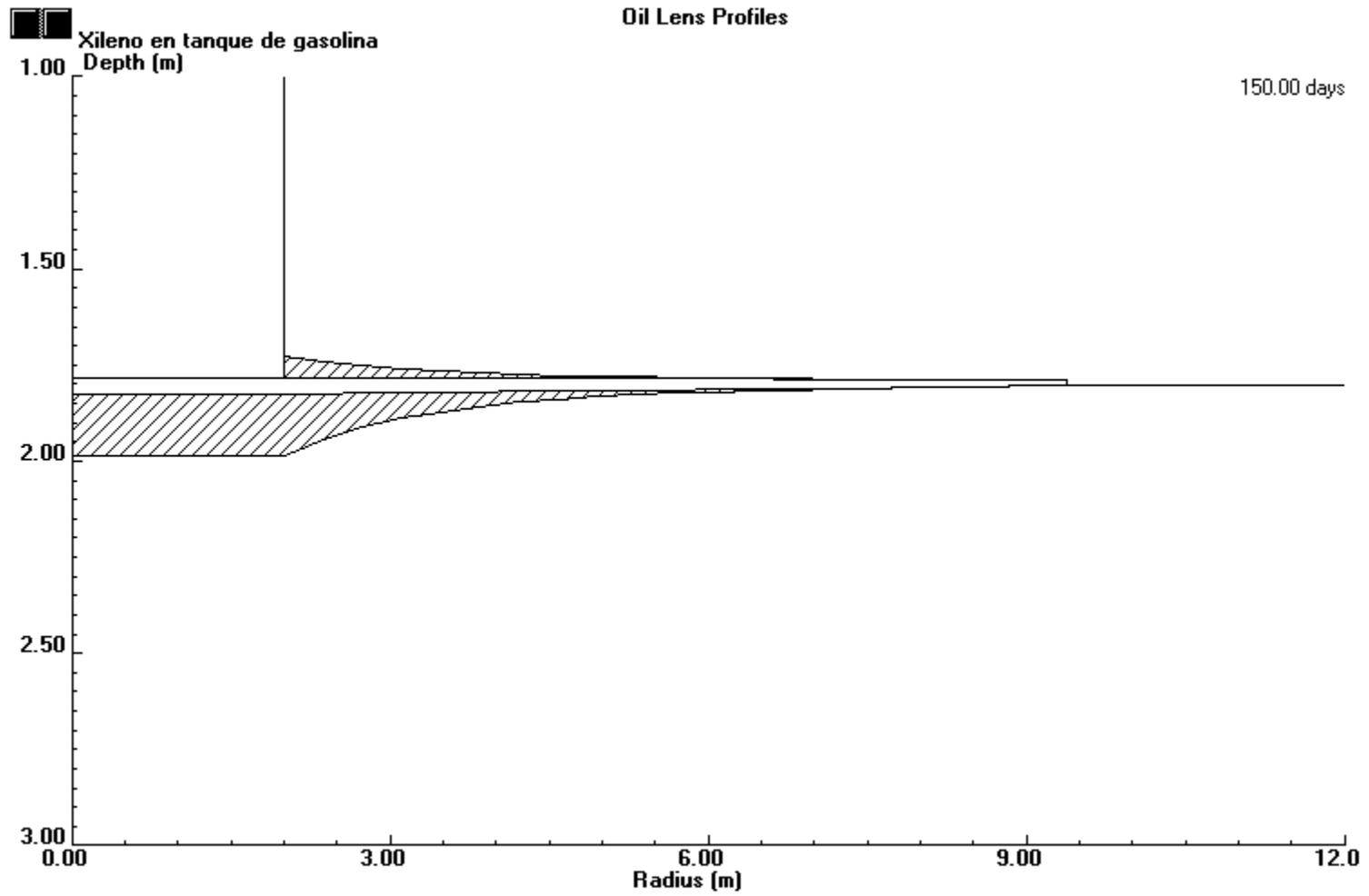
A.54 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 120 DIAS



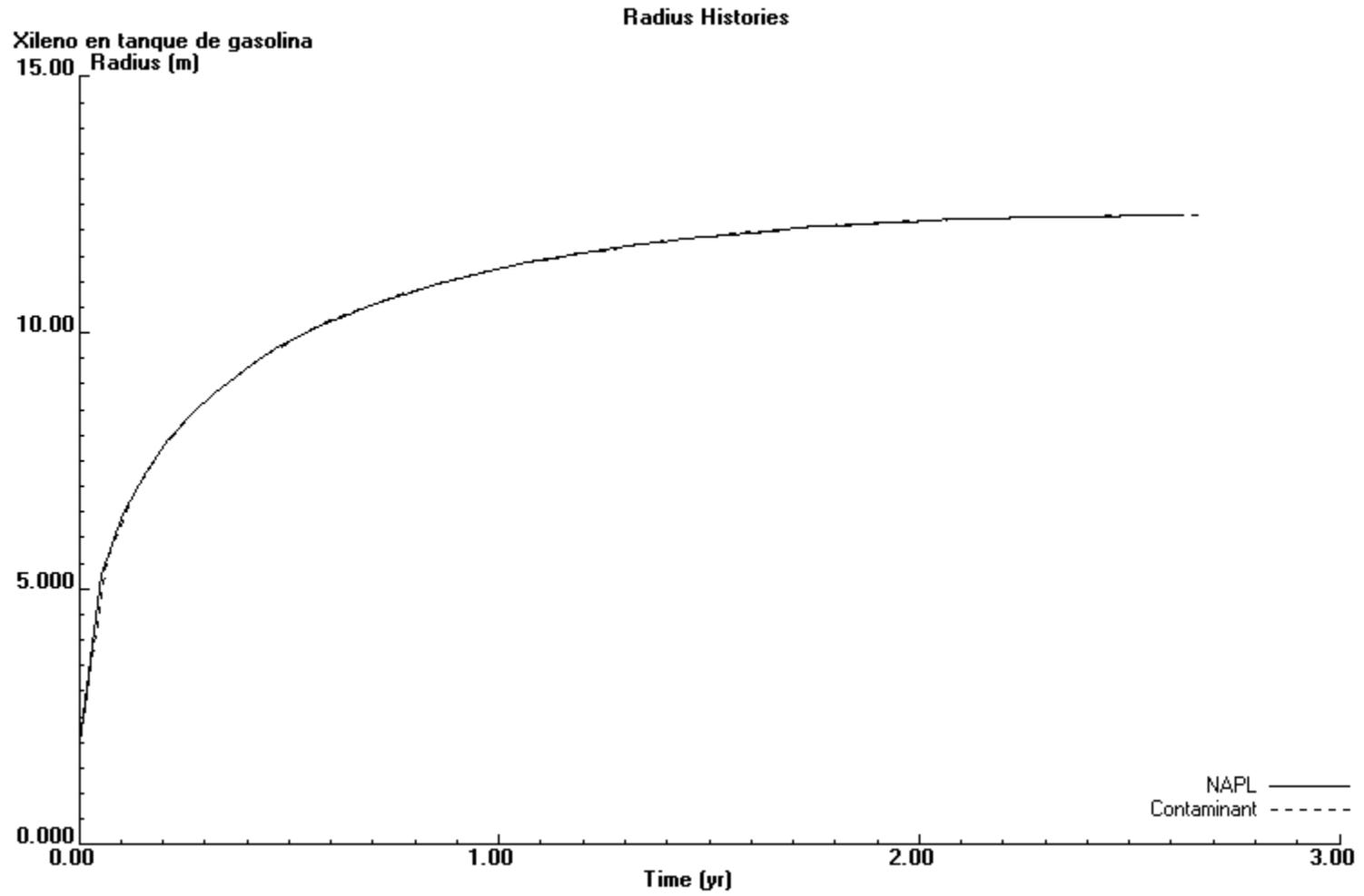
A.55 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 135 DIAS

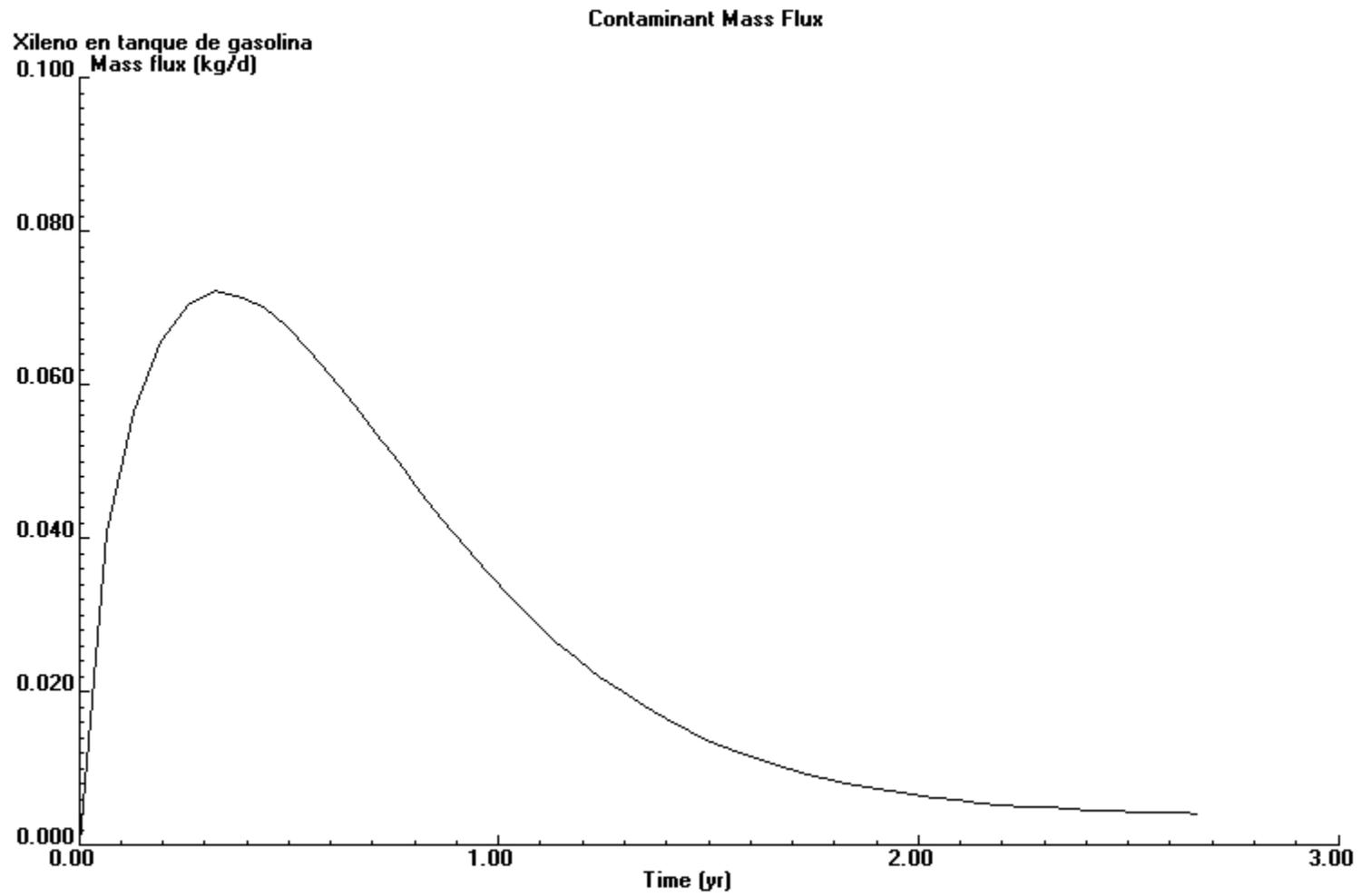


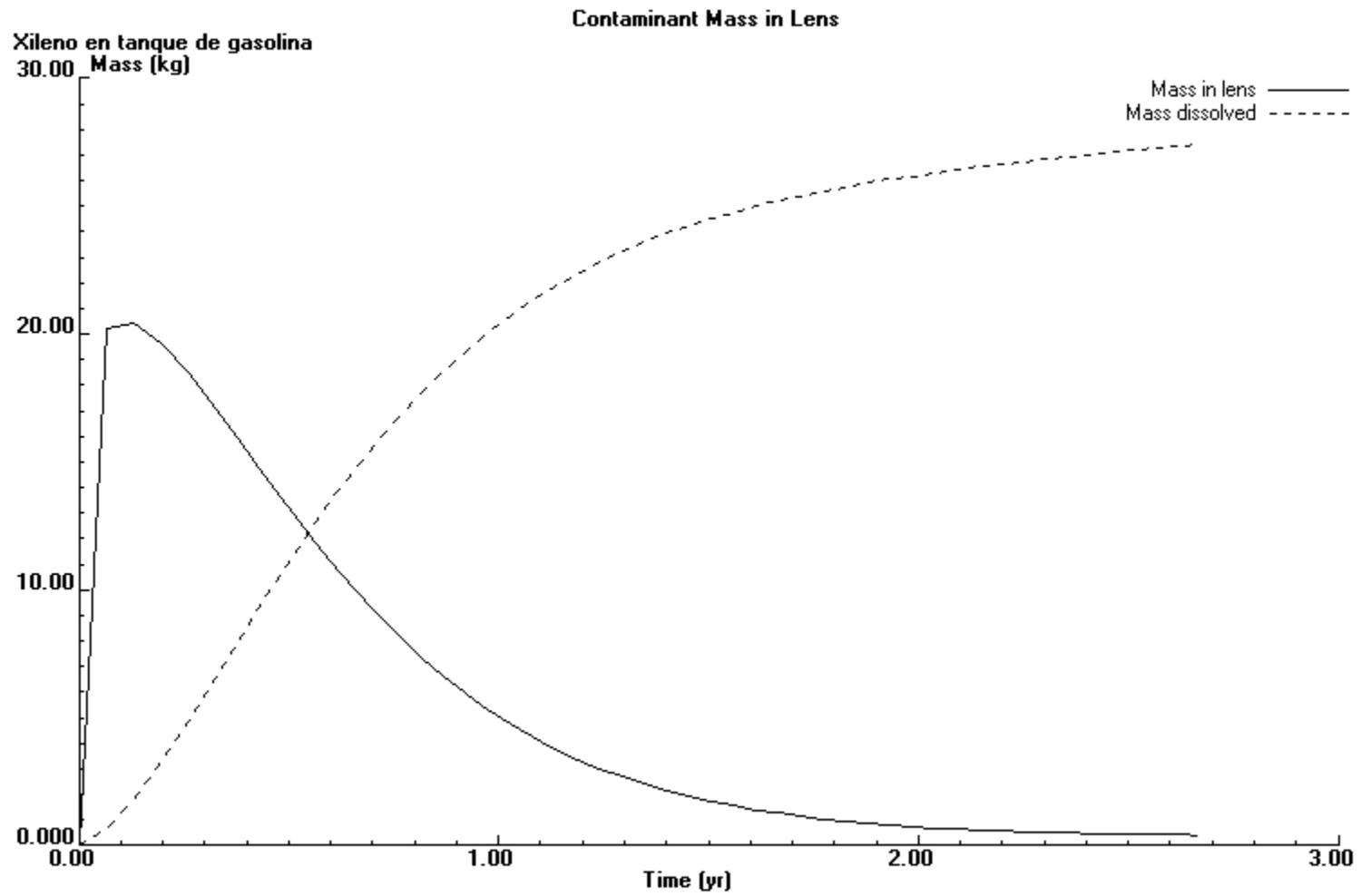
A.56 PERFIL DE LA LENTE DEL HIROCARBURO PARA EL XILENO A LOS 150 DIAS



A.57 CURVA DE COMPORTAMIENTO DEL RADIO PARA EL XILENO



A.58 FLUJO DE MADA DEL CONTAMINANTE PARA EL XILENO

A.59 BALANCE DE MASA EN LA LENTE PARA EL XILENO

A.60 CONCENTRACIONES EN LOS SONDEOS DE OBSERVACION PARA EL XILENO

