

ÍNDEX	I
RELACIÓ DE FIGURES	V
RELACIÓ DE TAULES	IX
NOMENCLATURA	XI
RESUM	XVII

CAPÍTOL 1

1.1 INTRODUCCIÓ	1-1
-----------------------	-----

CAPÍTOL 2

ESTIMACIÓ DE LA PERMEABILITAT INTERNODAL PER A LA SIMULACIÓ NUMÈRICA DEL FLUX D'AIGUA EN UN SÒL NO SATURAT

2.1 INTRODUCCIÓ	2-1
2.2 TEORIA	2-4
2.2.1 <i>Equacions fonamentals</i>	2-4
2.2.2 <i>Correlació per a la relació hidràulica</i>	2-7
2.3 RESULTATS I DISCUSSIÓ	2-13
2.3.1 <i>Casos estudiats i aproximació numèrica</i>	2-13
2.3.2 <i>Flux vertical amb gradient de càrrega matricial constant en diferents tipus de sòl</i>	2-14
2.3.3 <i>Infiltració en condicions de contingut volumètric a la superfície constant</i>	2-15
2.3.4 <i>Infiltració puntual a la superfície</i>	2-17
2.3.5 <i>Infiltració en un sòl estratificat</i>	2-20
2.4 CONCLUSIONS	2-21
2.5 Apèndix: Esquema de càlcul per a la transició entre condicions saturades i no saturades	2-23
BIBLIOGRAFIA	2-25
TAULES	2-27
FIGURES	2-30

CAPÍTOL 3

TRANSPORT NO ISOTÈRMIC DE L'AIGUA PROP DE LA SUPERFÍCIE D'UN SÒL RAS

3.1 INTRODUCCIÓ	3-1
3.1.1 <i>Objectius</i>	3-7
3.2 MODELITZACIÓ	3-8

3.2.1 Equacions fonamentals	3-9
Balanç de conservació de l'aigua en fase líquida:	3-10
Balanç de conservació de vapor d'aigua:	3-10
Balanç de conservació de la fase gasosa:	3-10
Balanç d'energia global pel sòl:	3-12
3.2.2 Relacions addicionals	3-13
Relacions hidràuliques aigua/sòl	3-13
Coeficient de dispersió longitudinal D_{vg}	3-17
Tortuositat de la fase gas τ_g	3-18
Coeficient de difusió molecular D_g	3-18
Variació de les propietats físiques de l'aigua en fase líquida amb la temperatura	3-19
Conductivitat tèrmica efectiva λ_{eff}	3-20
3.2.3 Condicions de contorn	3-20
Evaporació a la superfície	3-20
Escandall de fluxos d'energia a la superfície del sòl	3-21
Condicions a l'extrem inferior del sistema	3-25
3.2.4 Equacions de transport discretitzades	3-25
Discretització de les equacions de conservació	3-26
Discretització dels fluxos	3-27
3.2.5 Esquema de la solució numèrica	3-28
Estratègia de resolució	3-28
Selecció de la malla i del pas de temps	3-29
Validació del model	3-30
3.3 RESULTATS I DISCUSSIÓ	3-31
3.3.1 Comparació amb treballs experimentals	3-32
Experiment de Rose (1968)	3-32
Experiment de Jackson (1973)	3-35
Anàlisi de sensibilitat	3-38
3.3.2 Evolució del procés natural d'assecatge d'un sòl nu	3-39
Descripció de l'episodi simulat	3-40
Evolució temporal del CVA i de la temperatura a la superfície	3-40
Evolució temporal de l'evaporació a la superfície	3-43
Mecanismes de transport de l'aigua cap a la superfície	3-45
Variació amb la profunditat dels mecanismes de transport d'aigua prop de la superfície del sòl	3-48
3.4 CONCLUSIONS	3-51
BIBLIOGRAFIA	3-52
TAULES	3-58
FIGURES	3-61

CAPÍTOL 4

SIMULACIÓ I ANÀLISI DEL TRANSPORT NO ISOTÈRMIC DE SOLUTS ORGÀNICS PROP DE LA SUPERFÍCIE D'UN SÒL RAS

4.1 INTRODUCCIÓ	4-1
4.1.1 Objectius	4-6
4.2 MODELITZACIÓ	4-7
4.2.1 Equacions fonamentals	4-7
4.2.2 Relacions addicionals	4-9
4.2.3 Condicions de contorn	4-11
4.2.4 Equació de transport discretitzada	4-11
4.2.5 Esquema de la solució numèrica	4-12
4.3 RESULTATS I DISCUSSIÓ	4-13
4.3.1 Comparació amb treballs experimentals	4-14
Fluxos de volatilització de l'EPTC - Baker (1996)	4-14
Experiment amb el dièdrin - Parmele (1972)	4-17
Experiment amb el toluè - Jin (1994)	4-19
4.3.2 Descripció d'escenaris i elecció de productes químics	4-21
4.3.3 Transport en condicions isotèrmiques	4-23
Fluxos d'aigua en fase líquida i en fase gas en els escenaris de sòl humit i sec	4-23
Fluxos de volatilització a la superfície del sòl	4-24
Transport del contaminant prop de la superfície del sòl	4-26
4.3.4 Transport en condicions no isotèrmiques	4-28
Evolució de la temperatura del sòl	4-28
Fluxos de volatilització a la superfície del sòl	4-29
Mecanismes de transport del contaminant prop de la superfície del sòl	4-33
Adsorció sobre la fase sòlida: efectes en el transport de compostos orgànics en condicions no isotèrmiques	4-40
4.4 CONCLUSIONS	4-43
BIBLIOGRAFIA	4-44
TAULES	4-50
FIGURES	4-52

CAPÍTOL 5

CONCLUSIONS

APÈNDIX I

Gastó J.M., Grifoll, J. i Y. Cohen, Estimation of internodal permeabilities for numerical simulation of unsaturated flows, Revised manuscript submitted to *Water Resour. Res.*, 2002.

APÈNDIX II

Gastó J.M. i J. Grifoll, Modelización y análisis del transporte no isotérmico de compuestos orgánicos, presentat a les V Jornadas sobre investigación en la zona no saturada del suelo, Navarra, 7-9 Novembre de 2001.

APÈNDIX III

Gastó, J.M., Grifoll, J. i Cohen Y., Modelling and numerical simulation of water and solute transport in the non-isothermal, near surface, vadose zone. Abstract enviat i acceptat per a presentació al congrés anual de la AIChE (American Institute of Chemical Engineers), Minnesota, EE.UU, 2002.

APÈNDIX IV

Gastó, J.M. i Grifoll, J., Simulation and analysis of water transport and evaporation under non-isothermal field conditions, en preparació per enviar a *Water Resour. Res.*

APÈNDIX V

Gastó, J.M. i Grifoll, J., Solute transport in the top soil zone under non-isothermal field conditions, en preparació per enviar a *Journal of Hazardous Materials*.

RELACIÓ DE FIGURES

CAPÍTOL II

Fig. 2.1. Representació esquemàtica del flux entre cel·les no uniformes.	2-30
Fig. 2.2. Pesos obtinguts a partir de la correlació i dels valors exactes de la base de dades per $n = 2$ i $\Delta z^* = 0.20$, per a les funcions hidràuliques de (a) BC i (b) VG.	2-31
Fig. 2.3. Pesos obtinguts a partir de la correlació i dels valors exactes de la base de dades per $k_U = 0.5$ i $k_L = 10^{-6}$, per a les funcions hidràuliques de (a) BC i (b) VG.	2-32
Fig. 2.4. Pesos per al sòl "Yolo light clay" (sòl tipus argilós-fi) corresponents a Warrick [1991] i pesos obtinguts a partir de la correlació presentada.	2-33
Fig. 2.5. Fluxos adimensionals entre dos punts nodals, calculats segons diferents mètodes d'avitjament, amb $\psi_U^* = -1$, $\psi_L^* = -2$ i $\Delta z^* = 0.5$, en funció del paràmetre n de l'equació de VG.	2-33
Fig. 2.6. Infiltració acumulada (a, b) i perfils de contingut volumètric en aigua (c, d) després de 100 h d'infiltració en un sòl amb $n = 2$ emprant una funció hidràulica tipus VG. Solució numèrica amb $\Delta z = 0.05$ m (a,c) i $\Delta z = 0.10$ m (b, d).	2-34
Fig. 2.7. Contorns per al contingut volumètric en aigua després de 4 dies d'infiltració des d'un àrea circular a la superfície de 0.055 m. Comparació entre la solució obtinguda emprant la malla fina i els resultats utilitzant diferents mètodes d'avitjament amb $\Delta z = 0.08$ m.	2-35
Fig. 2.8. Contorns per al contingut volumètric en aigua després de 365 dies d'infiltració des d'un àrea circular a la superfície de 0.220 m. Comparació entre la solució obtinguda emprant la malla fina i els resultats utilitzant diferents mètodes d'avitjament amb $\Delta z = 0.3$ m.	2-35
Fig. 2.9. Perfil de contingut volumètric en aigua en un sòl estratificat. Comparació entre la solució obtinguda emprant la malla fina i els resultats utilitzant diferents mètodes d'avitjament amb $\Delta z = 5.0$ cm després de 2 dies d'infiltració amb un valor de càrrega matricial constant a la superfície.	2-36
Fig. A.1. Permeabilitats internodals corresponents a un node superior saturat i diferents valors de pressió d'aigua i pressió constant d'aigua al node inferior (calculats per a un sòl tipus francoarenós).	2-36

CAPÍTOL III

Fig. 3.1. Variació de la dispersivitat longitudinal fase gas, α_{LG} , amb la saturació.	3-61
Fig. 3.2. Variació de la tortuositat en fase gas τ_G amb la saturació. Comparació del segon model de Millington i Quirk [1960] amb dades experimentals de camp.	3-61
Fig. 3.3. Diagrama de flux per a l'algorisme per al transport en aigua en condicions no isotèrmiques des de t_j a t_{j+1}	3-62
Fig. 3.4. Sensibilitat respecte a la malla. Perfils de CVA per diferents tipus de malla.	3-63
Fig. 3.5. Sensibilitat respecte a la malla. Perfils de T^a per diferents tipus de malla.	3-63
Fig. 3.6. Sensibilitat respecte Δt . Evolució temporal del CVA a la superfície.	3-64
Fig. 3.7. Comparació de la solució numèrica per l'equació (3.2) i la solució analítica de Broadbridge i White [1988].	3-65
Fig. 3.8. Comparació de la solució numèrica considerant únicament conducció i solució analítica per l'equació del transport de calor considerant variació de la T a la superfície segons equació (3.57) [Tyndall i Kunkel, 1999].	3-65
Fig. 3.9. Mesures experimentals de la relació θ_i (ψ) segons Rose [1968 a,b] i ajust segons l'equació	

de Brooks i Corey.....	3-66
Fig. 3.10. Mesures experimentals de la relació $k_r(\theta)$ segons <i>Rose</i> [1968 a,b] i ajust segons l'equació de Brooks i Corey.....	3-66
Fig. 3.11. Evolució temporal del CVA a tres profunditats diferents. Resultats de la simulació i dades experimentals [<i>Rose</i> , 1968 a,b].....	3-67
Fig. 3.12. Evolució temporal de la temperatura (°C) a dos profunditats diferents. Resultats de la simulació i dades experimentals [<i>Rose</i> , 1968 a,b].....	3-68
Fig. 3.13. Perfil de temperatura (°C) durant el dia 4. Resultats del model i dades experimentals [<i>Rose</i> , 1968 a,b].....	3-69
Fig. 3.14. Perfil de la pressió parcial de l'aigua (mm Hg) durant el dia 4. Resultats del model i dades experimentals [<i>Rose</i> , 1968 a, b].....	3-69
Fig. 3.15. Mesures experimentals de la relació $\theta_l(\psi)$ segons <i>Jackson</i> [1973] i ajust segons l'equació (3.19).....	3-70
Fig. 3.16. Mesures experimentals de la relació $k_r(\theta)$ segons <i>Jackson</i> [1973] i ajust segons l'equació (3.20).....	3-70
Fig. 3.17. Evolució del CVA. Resultats de la simulació i dades experimentals de <i>Jackson</i> [1973].....	3-71
Fig. 3.18. Perfil de CVA. Dades procedents de la simulació i valors mesurats [<i>Jackson</i> , 1973].....	3-72
Fig. 3.19. Sensibilitat del model respecte a la velocitat del vent u (m/s). Comparació amb dades experimentals de <i>Jackson</i> [1973].....	3-73
Fig. 3.20. Sensibilitat del model respecte a la humitat relativa RH (%). Comparació amb dades experimentals de <i>Jackson</i> [1973].....	3-73
Fig. 3.21. Evolució del CVA a la superfície del sòl els mesos de març i juny.....	3-74
Fig. 3.22. Evolució de la temperatura a la superfície del sòl els mesos de març i juny.....	3-74
Fig. 3.23. Evolució de la contribució del flux conductiu al transport global de calor durant els mesos de març i juny.....	3-75
Fig. 3.24. Evolució de la difusivitat tèrmica a la superfície durant els mesos de març i juny.....	3-75
Fig. 3.25. Evolució del flux evaporatiu a la superfície durant els mesos de març i juny.....	3-76
Fig. 3.26. Evolució del flux evaporatiu i el flux d'aigua a $z = 1$ mm, mes de juny.....	3-76
Fig. 3.27. Evolució dels fluxos d'aigua en fase líquida i en fase gas a $z = 1$ mm, mes de juny.....	3-77
Fig. 3.28. Evolució temporal dels diferents fluxos en fase gas a $z = 1$ mm, mes de juny.....	3-77
Fig. 3.29. Perfil de (a) CVA, (b) humitat relativa, (c) temperatura i (d) concentració del vapor d'aigua corresponent a les 14 h del 17 de juny.....	3-78
Fig. 3.30. Perfil del flux d'aigua en fase líquida i en fase gas, 14 h del dia 17 de juny.....	3-79
Fig. 3.31. Perfil del flux d'aigua en fase líquida i en fase gas, 2 h del dia 17 de juny.....	3-78

CAPÍTOL IV

Fig. 4.1. Fluxos de volatilització mesurats i simulats per l'EPTC.....	4-52
Fig. 4.2. Perfil del contingut volumètric en aigua el dia següent a l'aplicació de l'herbicida.....	4-52
Fig. 4.3. Variació diària del flux de volatilització del dièdrín.....	4-53
Fig. 4.4. Comparació del flux de volatilització simulat i mesurat del toluè.....	4-53
Fig. 4.5. Partició de l'etanol, 1,3-diclorbenzè i lindà en les diferents fases que componen el sòl.....	4-54
Fig. 4.6. Evolució del flux evaporatiu a la superfície juntament amb els fluxos d'aigua en fase líquida i en fase gas a la superfície ($a = 5 \cdot 10^{-4}$ m) en condicions isotèrmiques ($T = 22^\circ\text{C}$) en els dos escenaris de sòl, humit i sec.....	4-54

Fig. 4.7. Evolució del flux de volatilització de l'etanol en condicions isotèrmiques en els escenaris de sòl humit i sec.	4-55
Fig. 4.8. Evolució del flux de volatilització per l'1,3-diclorbenzè en condicions isotèrmiques en els escenaris de sòl humit i sec.	4-55
Fig. 4.9. Evolució del flux de volatilització del lindà en condicions isotèrmiques en els escenaris de sòl humit i sec.	4-55
Fig. 4.10.a Perfil dels fluxos en fase líquida i en fase gas de l'etanol. Dades corresponents a les 12 h del dia 2 en l'escenari de sòl humit.	4-56
Fig. 4.10.b Perfil dels fluxos en fase líquida i en fase gas de l'etanol. Dades corresponents a les 12 h del dia 2 en l'escenari de sòl sec.	4-56
Fig. 4.11.a Perfil dels fluxos en fase líquida i en fase gas de l'1,3-diclorbenzè. Dades corresponents a les 12 h del dia 2 en l'escenari de sòl humit.	4-57
Fig. 4.11.b Perfil dels fluxos en fase líquida i en fase gas de l'1,3-diclorbenzè. Dades corresponents a les 12 h del dia 2 en l'escenari de sòl sec.	4-57
Fig. 4.12.a Perfil dels fluxos en fase líquida i en fase gas del lindà. Dades corresponents a les 12 h del dia 2 en l'escenari de sòl humit.	4-58
Fig. 4.12.b Perfil dels fluxos en fase líquida i en fase gas del lindà. Dades corresponents a les 12 h del dia 2 en l'escenari de sòl sec.	4-58
Fig. 4.13.a Perfil dels diferents fluxos en fase gas de l'etanol. Dades corresponents a les 12 h del dia 2 en l'escenari de sòl humit.	4-59
Fig. 4.13.b Perfil dels diferents fluxos en fase líquida de l'etanol. Dades corresponents a les 12 h del dia 2 en l'escenari de sòl humit.	4-59
Fig. 4.14. Evolució de la temperatura de la superfície del sòl en el període que comprèn els escenaris de sòl humit i sec.	4-60
Fig. 4.15. Evolució del flux de volatilització de l'etanol en condicions no isotèrmiques en els escenaris de sòl humit i sec.	4-61
Fig. 4.16. Evolució del flux de volatilització de l'1,3-diclorbenzè en condicions no isotèrmiques en els escenaris de sòl humit i sec.	4-61
Fig. 4.17. Evolució del flux de volatilització del lindà en condicions no isotèrmiques en els escenaris de sòl humit i sec.	4-61
Fig. 4.18. Evolució de la massa restant d'etanol en condicions isotèrmiques i no isotèrmiques i en els dos escenaris de sòl, humit i sec.	4-62
Fig. 4.19. Evolució de la massa restant de 1,3-diclorbenzè en condicions isotèrmiques i no isotèrmiques i en els dos escenaris de sòl, humit i sec.	4-62
Fig. 4.20. Evolució de la massa restant de lindà en condicions isotèrmiques i no isotèrmiques i en els dos escenaris de sòl, humit i sec.	4-62
Fig. 4.21.a Evolució dels fluxos d'etanol en fase líquida i en fase gas a la superfície en l'escenari de sòl humit.	4-63
Fig. 4.21.b Evolució dels fluxos d'etanol en fase líquida i en fase gas a la superfície en l'escenari de sòl sec.	4-63
Fig. 4.22. Perfil dels diferents fluxos en fase líquida i en fase gas de l'etanol corresponents a les 10 h del dia 1 en l'escenari de sòl sec.	4-64
Fig. 4.23. Contribució dels fluxos en fase líquida i gas d'etanol en l'escenari de sòl sec.	4-65
Fig. 4.24.a Evolució dels fluxos d'1,3-diclorbenzè en fase líquida i en fase gas a la superfície en l'escenari de sòl humit.	4-66
Fig. 4.24.b Evolució dels fluxos d'1,3-diclorbenzè en fase líquida i en fase gas a la superfície en l'escenari de sòl sec.	4-66
Fig. 4.25. Perfil dels diferents fluxos en fase líquida i en fase gas de l'1,3-diclorbenzè	

corresponents a les 13 h del dia 1 en l'escenari de sòl humit.	4-67
Fig. 4.26. Contribució dels fluxos en fase líquida i gas d'1,3-diclorbenzè en l'escenari de sòl humit.	4-68
Fig. 4.27.a Evolució dels fluxos de lindà en fase líquida i en fase gas a la superfície en l'escenari de sòl humit.	4-69
Fig. 4.27.b Evolució dels fluxos de lindà en fase líquida i en fase gas a la superfície en l'escenari de sòl sec.	4-69
Fig. 4.28 . Perfil dels diferents fluxos en fase líquida i en fase gas del lindà corresponents a les 10 h del dia 1 en l'escenari de sòl sec.	4-70
Fig. 4.29. Contribució dels fluxos en fase líquida i gas del lindà en l'escenari de sòl humit.	4-71
Fig. 4.30. Evolució del coeficient de partició H_{SL} a la superfície segons el procés considerat. Resultats per a l'etanol i l'escenari de sòl humit.	4-72
Fig. 4.31. Evolució del coeficient de partició H_{SL} a la superfície segons el procés considerat. Resultats per a l'1,3-diclorbenzè i l'escenari de sòl humit.	4-72
Fig. 4.32. Evolució de la massa restant d'etanol depenent del tipus de sorció considerat, en l'escenari de sòl humit.	4-73
Fig. 4.33. Evolució de la massa restant d'1,3-diclorbenzè depenent del tipus de sorció considerat, en l'escenari de sòl humit.	4-73

RELACIÓ DE TAULES

CAPÍTOL II

Taula 2.1. Constants de la correlació $w = w(k_U, k_L, n, \Delta z^*)$ per a les funcions hidràuliques de Brooks i Corey (BC) i van Genuchten (VG).....	2-27
Taula 2.2. Paràmetres estadístics per als residuals i els coeficients de correlació emprats en l'ajust dels pesos (w) als valors emmagatzemats a les bases de dades per a les funcions hidràuliques de BC i VG.	2-27
Taula 2.3. Paràmetres corresponents als diferents sòls.....	2-28
Taula 2.4. Fluxos adimensionals per a un sòl tipus francoargiloarenós i relació entre el flux calculat utilitzant diferents mètodes d'amitjanament i el valor de l'integral.	2-29
Taula 2.5. Condicions inicials i de contorn per als exemples en coordenades cilíndriques.....	2-29

CAPÍTOL III

Taula 3.1. Paràmetres usats en el càlcul de la radiació solar incident a la superfície del sòl.....	3-58
Taula 3.2. Paràmetres per als diferents tipus de sòls.	3-59
Taula 3.3. Paràmetres per a les relacions hidràuliques aigua/sòl.....	3-59
Taula 3.4. Paràmetres utilitzats en les simulacions.	3-60

CAPÍTOL IV

Taula 4.1. Propietats fisicoquímiques dels compostos	4-50
Taula 4.2. Dependència amb la temp. i la humitat relativa del coeficient d'adsorció [Goss, 1992].....	4-51
Taula 4.3. Propietats seleccionades pel tipus de terra i les relacions de Brooks i Corey.....	4-51
Taula 4.4. Paràmetres meteorològics usats en la simulació.....	4-51

NOMECLATURA

Alfanumèric		Unitats
a	Paràmetre usat en la correlació per w	
a	Paràmetre usat per a la relació $k_r(\psi)$ a l'equació 3.20	
A	Coefficient per estimar la conductivitat tèrmica efectiva	W/mK
A	Paràmetre específic usat en l'equació 4.15	
a_L	Albedo	
A_0	Amplitud de l'oscil·lació diària de la temperatura equació 3.56	K
a_1	Paràmetre usat en la correlació per w	
a_{10}	Paràmetre usat en la correlació per w	
a_{11}	Paràmetre usat en la correlació per w	
a_2	Paràmetre usat en la correlació per w	
a_{ij}	Àrea interfacial per unitat de volum de la matriu porosa entre les fases i i j	m
$a_{sòl}$	Superfície específica del sòl	m ² /g
b	Paràmetre usat en la correlació per w	
b	Paràmetre usat per a la relació $k_r(\psi)$ a l'equació 3.20	
B	Coefficient per estimar la conductivitat tèrmica efectiva	W/m K
B	Paràmetre específic usat en l'equació 4.15	
b_0	Paràmetre usat en la correlació per w	
b_{01}	Paràmetre usat en la correlació per w	
b_{02}	Paràmetre usat en la correlació per w	
b_1	Paràmetre usat en la correlació per w	
c	Paràmetre usat en la correlació per w	
C	Coefficient per estimar la conductivitat tèrmica efectiva	m ³ /m ³
C	Paràmetre específic usat en l'equació 4.15	
C_i	Concentració del compost orgànic a la fase i	kg/m ³
c_0	Paràmetre usat en la correlació per w	
C_p^v	Capacitat calorífica volumètrica del sòl	J/m ³ K
C_{mp}	Concentració del compost dins la matriu porosa	kg/m ³
C_S	Concentració compost adsorbit sobre la superfície per unitat de volum de sòlid	mg/m ³
C_S^O	Concentració del compost absorbit sobre la part orgànica present la fase sòlida	mg/m ³
C_{sup}	Concentració del compost per unitat de superfície	kg/m ²
D	Coefficient per estimar la conductivitat tèrmica efectiva	W/mK
D_ψ	Coefficient de difusivitat isotèrmic	m/s
$D_{\psi i}$	Coefficient de difusivitat isotèrmic per a la fase i	m/s
D_i	Coefficient de difusió molecular per a la fase i	m ² /s
D_{ml}^H	Coefficient de dispersió mecànica de l'energia sensible	kW/mK
D_T	Coefficient de difusivitat tèrmic	m ² /sK
D_{Ti}	Coefficient de difusivitat tèrmic per a la fase i	m ² /sK
D_v	Matriu dels coeficients de dispersió mecànica	kg/m ²
D_{vi}	Coefficient de dispersió longitudinal fase i	m ² /s
D_{ap}	Coefficient de difusió aparent	m ² /s
f_{LG}	Flux interfàsic d'aigua entre la fase líquida i la fase gas	kg/m ³ s
f_{oc}	Fracció de carboni orgànic present en la fase sòlida	
g	Acceleració de la gravetat. Com a subíndex indica fase gas	m/s ²
G	Flux de calor que s'endinsa en el sòl	W/m ²

h_{atm}	Coefficient de transferència d'energia entre la superfície del sòl i l'atmosfera	m/s
h_g	Entalpia específica de la fase gas	kJ/kg
h_l	Entalpia específica de la fase líquida	kJ/kg
h_{w0}	Entalpia de vapor d'aigua a les condicions de la superfície	kJ/kg
H_{ij}	Coefficient de partició entre la fase i i la fase j	
H_{ij_ref}	Coefficient de partició entre la fase i i la fase j a la temperatura de referència	
I	Matriu identitat	
J_{cond}	Contribució en % del mecanisme conductiu al transport global d'energia prop de la superfície	
J_{evap}	Flux d'evaporació a la superfície	kg/m ² s
\mathbf{J}_{hg}	Flux dispersiu hidrodinàmic	kg/m ² s
\mathbf{J}_{total}	Flux d'aigua total	m ³ /m ² s
j	Com a subíndex fa referència al temps	
k	Permeabilitat relativa	m ²
K	Conductivitat hidràulica en medi porós	m/s
k'	Conductivitat hidràulica efectiva	m/s
k'_{atm}	Coefficient de transferència de massa entre superfície i atmosfera	m/s
k_{eff}	Permeabilitat relativa efectiva	
k_i	Permeabilitat intrínseca	m ²
k_i	Permeabilitat relativa per al node i (on i pot ser U o L)	
K_n	Paràmetre que comptabilitza l'efecte de la presència dels núvols en l'equació 3.42	
k_r	Permeabilitat relativa	
K_s	Conductivitat hidràulica a saturació	m/s
k_s	Conductivitat relativa a saturació	
k_W	Conductivitat relativa calculada segons el mètode d'ajustament per pesos	
K_{oc}	Coefficient de partició entre la matèria orgànica i l'aigua	cm ³ /g
K_{oc_ref}	Coefficient de partició entre la matèria orgànica i l'aigua a la temperatura de referència	cm ³ /g
K	Coefficient d'adsorció	
L_{atm}	Radiació d'ona llarga provinent del vapor d'aigua	W/m ²
$L_{sòl}$	Radiació d'ona llarga provinent del sòl	W/m ²
l	Com a subíndex implica fase líquida	
m	Paràmetre usat en les relacions hidràuliques de VG. Com a subíndex indica posició	
m_o	Efecte de la massa òptica	
M_{aigua}	Pes molecular de l'aigua	kg/mol
m_c	Fracció volumètrica ocupada per l'argila	m ³ /m ³
M_i	Terme que comptabilitza la quantitat de calor aportada pel mecanisme i prop de la superfície al llarg del dia	
n	Paràmetre usat en les relacions hidràuliques de BC	
n	Factor de turbiditat de l'aire	
N	Fracció del núvols que cobreix el cel	
N_{ij}	Flux de solut de la fase j a la fase i	kg/m ² s
P_{aire_sec}	Pressió parcial de l'aire sec	Pa
P_{atm}	Pressió atmosfèrica	Pa
P_c	Pressió capil·lar	Pa
P_{gas}	Pressió de la fase gas	Pa
P_l	Pressió manomètrica de l'aigua	Pa
P_{vap}	Pressió parcial del vapor d'aigua	Pa

q_{eff}^*	Flux efectiu adimensional d'aigua en fase líquida	
Q_{conv}	Flux de calor convectiu	W/m ²
Q_{disp}	Flux de calor dispersiu	W/m ²
Q_{cond}	Flux de calor conductiu i dispersió mecànica de l'energia sensible	W/m ²
q_{eff}	Flux efectiu d'aigua en fase líquida	m/s
q_{gas}	Flux convectiu de la fase gas	m/s
q_{liq}	Flux convectiu d'aigua en fase líquida	m/s
r	coordenada radial	m
R	Paràmetre usat en la correlació per w	
R	Constant dels gasos ideals	m ³ Pa/molK
r	relació distància Terra-Sol real i mitjana	
R_0	Radiació solar d'ona curta després de considerar l'efecte dels núvols	W/m ²
r_{bc}	Radi d'infiltració a la superfície	m
R_c	Radiació solar després de considerar efectes de l'atmosfera	W/m ²
R_n	Radiació neta a la superfície del sòl	W/m ²
R_s	Radiació d'ona curta a la superfície	
R_T	Radi total usat en les simulacions en 2D	m
S_g	Saturació fase gas	m ³ /m ³
T	Temperatura	K
T^0	Temperatura de referència	K
T_{aire}	Temperatura de l'aire	K
$T_{sòl}$	Temperatura del sòl	K
t	Temps	s
u	Velocitat del vent	m/s
u_a	Energia interna específica aire_sec	kJ/kg
u_i	Energia interna específica per a la fase i	kJ/kg
u_v	Energia interna específica vapor d'aigua	kJ/kg
V_{eff}	Velocitat efectiva	m/s
w	Pes emprat en l'estimació de k_{eff}	
W_0	Intensitat de la radiació solar	W/m ²
x_w	Solubilitat compost en fase líquida expressada en fracció molar	
z	Coordenada vertical	m
z^*	Coordenada vertical adimensional	
z_s	Posició vertical que marca el límit entre la zona no saturada i saturada	m
z_r	Alçada de referència	m
z_0	Rugositat del sòl	m

Acrònims

$2D$	Dues dimensions
$3D$	Tres dimensions
ADI	Alternating direction implicit
AM	Mitjana aritmètica
BC	Brooks i Corey
CI	Infiltració acumulada
CVA	Contingut volumètric en aigua
$EPTC$	S-etil dipropiltiocarbamat
GM	Mitjana geomètrica

PdV	Philip i de Vries
RH	Humitat relativa
VG	Van Genuchten
WM	Mitjana ponderada

Lletres gregues

α	Paràmetre usat en les relacions hidràuliques de VG i les relacions proposades per Haverkamp	
α	Altitud solar	°
α_T	Difusivitat tèrmica	m ² /s
$\alpha_{L,G}$	Dispersivitat longitudinal per a la fase gas	m
$\alpha_{L,G sat}$	Dispersivitat longitudinal per a la fase gas en condicions de saturació	m
β	Paràmetre per a la relació hidràulica proposada per Haverkamp	
β_0	Paràmetre usats en les correlacions per w	
γ_{ij}	Índex de contribució per cada mecanisme i i fase j al transport total del compost dins el sòl	
$\Delta_{sol}H$	Entalpia de dissolució específica per a cada compost	J/kg
ΔH_s^e	Entalpia de dissolució en excès	
Δr	Increment de la coordenada radial	m
Δt	Increment del pas de temps	s
∇T	Gradient de temperatura	K/m
Δz	Increment de la coordenada vertical	m
Δz^*	Increment de la coordenada adimensional vertical	
ΔS_s^l	Entropia de dissolució pel líquid	J/molK
$\Delta \psi$	Increment càrrega matricial en fase líquida	m
$\nabla \psi$	Gradient de càrrega matricial	m/m
ε	Porositat del sòl	m ³ /m ³
ε_a	Emisivitat atmosfèrica	
$\varepsilon_{sòl}$	Emisivitat del sòl	
η	Paràmetre usat en l'equació 3.17	
θ_{cont}	Contingut volumètric en aigua líquida en forma contínua	m ³ /m ³
θ_i	Contingut volumètric d'aigua en fase i	m ³ /m ³
θ_{mi}	Contingut volumètric d'aigua en fase líquida inicial	m ³ /m ³
θ_r	Contingut volumètric en aigua residual	m ³ /m ³
θ_s	Contingut volumètric d'aigua en fase líquida a saturació	m ³ /m ³
λ	Índex de grandària del porus definit segons BC	
λ_{eff}	Conductivitat tèrmica efectiva	kW/mK
μ_i	Viscositat de l'aigua	kg/ms
μ^0_l	Viscositat aigua líquida a la temperatura de referència	kg/ms
ρ_{aire}	Concentració màssica de l'aire sec present en l'atmosfera	kg/m ³
ρ_b	Densitat aparent del medi	kg/m ³
ρ_g	Densitat de la fase gas	kg/m ³
ρ_l	Densitat de l'aigua en fase líquida	kg/m ³
ρ_v	Concentració màssica de l'aigua en fase gas	kg/m ³
$\rho_{v/atm}$	Concentració màssica de l'aigua en fase gas a l'atmosfera	kg/m ³
ρ_{v_sat}	Concentració del vapor saturat	kg/m ³
ρ_s	Densitat de la fase sòlida present en el sòl	kg/m ³
σ	Tensió superficial de l'aigua en fase líquida	dyn/m ²
σ_{SB}	Constant de Stefan-Boltzmann	
ϕ	Desfàssament horari	°
Φ	Transformada de Kirchoff	
τ_g	Tortuositat de la fase gas	
τ_g	Tortuositat de la fase gas	
Π	Període de l'oscil·lació diària de la temperatura eq 3.57	
ψ^*	Valor adimensional de la càrrega matricial	
ψ^0	Càrrega matricial a la temperatura de referència	m

ψ_b	Càrrega matricial corresponent a la pressió de bombolla	m
ψ_{ref}	Càrrega matricial de referència	m
ψ_s	Càrrega matricial a z_s	m
ψ	Càrrega matricial de la fase líquida	m

RESUM

El present treball de tesi s'ha estructurat en tres parts diferenciades. En la primera part s'ha desenvolupat un nou procediment per avaluar la permeabilitat vertical internodal d'un flux vertical en un sòl no saturat. El procediment es basa a estimar el pes a usar en el càlcul de la mitjana ponderada entre dos valors de permeabilitat situats en punts adjacents de la malla. Els pesos emprats s'obtenen de la correlació dels resultats d'un gran nombre de solucions exactes del problema de flux entre dos punts de diferent saturació. Les correlacions proposades són funció de la permeabilitat relativa, la distància internodal adimensional, així com dos paràmetres dependents del tipus de sòl. El mètode proposat permet obtenir solucions acceptables amb malles més grolleres de l'habitual i estalviar, així, temps de càlcul, especialment en sistemes 2D i 3D.

A la segona part s'ha desenvolupat un codi numèric per simular el transport de l'aigua en la zona no saturada del sòl subjecte a unes condicions de contorn dinàmiques caracteritzades per un detallat balanç energètic dels diferents fluxos a la superfície del sòl i per episodis d'evaporació i pluja a la superfície. El model ha estat capaç de reproduir de manera semiquantitativa resultats experimentals procedents de treballs de camp que constitueixen una referència clàssica en la bibliografia. La inclusió dels diferents mecanismes de transport (difusió, dispersió i convecció) en fase líquida i en fase gas s'ha mostrat suficient a l'hora de descriure quantitativament el procés d'assecamment d'un sòl nu sense utilitzar cap paràmetre de calibratge. Els resultats permeten explicar la característica evolució diària del contingut en aigua del sòl en base a lleugeres diferències entre el flux d'evaporació i el flux d'aigua que arriba a la superfície. Els resultats mostren també com la contribució de la fase líquida i la fase gas al transport de l'aigua prop de la superfície del sòl varia d'acord amb el grau de saturació d'aigua del sòl i l'hora del dia. Els resultats també han evidenciat l'important contribució dels fluxos difusius i dispersius en el transport de l'aigua en fase gas a l'estreta franja del sòl propera a la superfície.

Finalment, a la tercera part de la tesi s'ha desenvolupat i implementat un codi numèric per al transport no isotèrmic d'un compost orgànic present en la zona no saturada del sòl. El model utilitza la descripció del moviment de les fases fluïdes i l'evolució dels perfils de temperatura corresponent a la segona part. El codi s'ha comparat i validat amb resultats experimentals procedents de treball de camp i laboratori. Les simulacions han permès estudiar amb detall el paper i la importància de les diferents fases i mecanismes responsables de la migració i el transport d'un compost orgànic prop de la superfície. Els resultats mostren com la influència de la dinàmica del transport de l'aigua en fase líquida és major en la migració de compostos amb una constant de Henry petita. S'ha observat com les variacions diàries del flux de volatilització a la superfície són més pronunciades en el cas de compostos amb una menor volatilitat. La consideració de les variacions del coeficient d'adsorció del 1,3-dichlorbenzè causades per l'oscil·lació diària de la temperatura i el grau d'humitat del sòl ha resultat en diferències de massa volatilitzada d'aquest compost de fins a un 12% en un període de 5 dies de simulació.