



***Departament d'Enginyeria Química***  
***Escola Tècnica Superior d'Enginyeria Química***  
**UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI**

**TRANSPORTE NO PASIVO DE COMPUESTOS ORGÁNICOS  
VOLÁTILES EN LA ZONA NO SATURADA**

**Orlando Silva Rojas**

TARRAGONA

2007

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI  
TRANSPORTE NO PASIVO DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES EN LA ZONA NO SATURADA.  
Orlando Silva Rojas  
ISBN: 978-84-690-7612-5 / DL: T.1217-2007

**TRANSPORTE NO PASIVO  
DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES  
EN LA ZONA NO SATURADA**

**MEMORIA PRESENTADA POR**

**Orlando Silva Rojas**

**PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR EN INGENIERÍA QUÍMICA**

**TESIS DIRIGIDA POR EL DR. JORDI GRIFOLL TAVERNA**

**MIEMBROS DEL TRIBUNAL DE TESIS**

PRESIDENTE: Dr. Francesc Giralt Prat  
SECRETARIA: Dra. M. Dolors Puigjaner Riba  
VOCALES  
Dr. Javier Álvarez Benedí  
Dr. Juan Vicente Giráldez Cervera  
Dr. Francisco Ramírez de Cartagena Bisbe  
SUPLENTE  
Dr. Joan Rosell Llompart  
Dr. Joan Rosell Urrutia

**UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI**

**TARRAGONA**

**FEBRERO 2007**

Los derechos de difusión de los artículos que se encuentran en los anexos de esta tesis son propiedad de las revistas donde están o serán publicados. Quienes reproduzcan total o parcialmente el material que se presenta en los anexos deben solicitar el permiso correspondiente al propietario de los derechos de difusión.

© 2007

Remedio p'al diente largo la "toná" de las "comías",  
empiezo de "amanecía", por mi gusto y por encargo,  
y si en el cuento me alargó, habrán de entender razones,  
la fe de los comilones, puesta "toa" a mi servicio  
p'a hacer este sacrificio y contar cómo se come

TITO FERNÁNDEZ, *El Temucano*

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI  
TRANSPORTE NO PASIVO DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES EN LA ZONA NO SATURADA.  
Orlando Silva Rojas  
ISBN: 978-84-690-7612-5 / DL: T.1217-2007

## **AGRADECIMIENTOS**

El autor agradece el financiamiento recibido de la Dirección General de Investigación del Ministerio de Ciencia y Tecnología, proyecto PPQ2001-1519, así como del DURSI (Generalitat de Catalunya) y del Fondo Social Europeo.

El autor quiere agradecer, además, el soporte moral y económico brindado por la familia Blanco Abellán durante los últimos años.

UNIVERSITAT ROVIRA I VIRGILI  
TRANSPORTE NO PASIVO DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES EN LA ZONA NO SATURADA.  
Orlando Silva Rojas  
ISBN: 978-84-690-7612-5 / DL: T.1217-2007



<b>ÍNDICE</b> .....	I
<b>RELACIÓN DE FIGURAS</b> .....	II
<b>RELACIÓN DE TABLAS</b> .....	III
<b>NOMENCLATURA</b> .....	IV
<b>RESUMEN</b> .....	V

## **CAPÍTULO 1**

### **INTRODUCCIÓN**

1.1 TRANSPORTE NO PASIVO.....	1-3
1.2 RETENCIÓN DE AGUA BAJO CONDICIONES DE SEQUEDAD EXTREMA .....	1-10
1.3 OBJETIVOS.....	1-13
BIBLIOGRAFÍA .....	1-16
FIGURAS .....	1-21

## **CAPÍTULO 2**

### **MODELO DE TRANSPORTE NO PASIVO DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES EN LA ZONA NO SATURADA**

2.1 INTRODUCCIÓN.....	2-1
2.1.1 OBJETIVOS.....	2-2
2.2 MODELIZACIÓN.....	2-2
2.2.1 ECUACIONES FUNDAMENTALES.....	2-3
2.2.2 RELACIONES ADICIONALES .....	2-6
<i>Tensor y coeficiente de difusión-dispersión</i> .....	2-6
<i>Relaciones hidráulicas</i> .....	2-8
<i>Ecuación de estado para la fase gaseosa. Presión de la fase gaseosa</i> .....	2-10
2.2.3 CONDICIONES DE CONTORNO .....	2-11
<i>Infiltración/evaporación en la superficie</i> .....	2-11
<i>Condiciones en el extremo inferior del sistema</i> .....	2-13
2.2.4 PROPIEDADES DE TRANSPORTE QUE VARÍAN CON LA CONCENTRACIÓN.....	2-13
2.3 IMPLEMENTACIÓN NUMÉRICA .....	2-13

2.3.1 ECUACIONES DE TRANSPORTE DISCRETIZADAS.....	2-13
<i>Discretización de las ecuaciones de conservación en 1D</i> .....	2-14
<i>Discretización de los flujos en 1D</i> .....	2-15
<i>Discretización de las ecuaciones de conservación en 2D</i> .....	2-15
<i>Discretización de los flujos en 2D</i> .....	2-17
2.3.2 ESQUEMA DE LA SOLUCIÓN NUMÉRICA.....	2-18
<i>Estrategia de solución</i> .....	2-19
<i>Generación y selección de la malla y del paso de tiempo máximo</i> .....	2-23
2.4 VALIDACIÓN DEL MODELO.....	2-24
BIBLIOGRAFÍA .....	2-26
FIGURAS .....	2-29

## CAPÍTULO 3

### **SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL TRANSPORTE NO PASIVO DE COMPUESTOS ORGÁNICOS VOLÁTILES EN LA ZONA NO SATURADA**

3.1 INTRODUCCIÓN .....	3-1
3.1.1 OBJETIVOS.....	3-2
3.2 SIMULACIÓN UNIDIMENSIONAL.....	3-2
3.2.1 PARÁMETROS NUMÉRICOS Y SELECCIÓN DE LA MALLA .....	3-3
3.2.2 INFILTRACIÓN DE BUTANOL DISUELTO .....	3-4
3.2.3 INFILTRACIÓN DE METANOL .....	3-6
<i>Caso de estudio I: transporte no pasivo de mezclas acuosas de metanol</i> .....	3-8
Condiciones de simulación .....	3-8
Selección del tamaño de malla y del paso de tiempo máximo .....	3-8
Perfiles de contenido volumétrico de líquido y concentración normalizada.....	3-9
Flujos de volatilización de metanol y evaporación de agua .....	3-11
Mecanismos de flujo capilar .....	3-13
Mecanismos de transporte predominantes .....	3-14
Análisis de sensibilidad a la dispersión.....	3-16
<i>Caso de estudio II: efecto Kelvin</i> .....	3-17

Condiciones de simulación .....	3-18
Efecto Kelvin sobre la difusión en fase gaseosa .....	3-18
Flujos de volatilización y evaporación.....	3-20
3.3 SIMULACIÓN BIDIMENSIONAL.....	3-21
3.3.1 PARÁMETROS NUMÉRICOS Y SELECCIÓN DE LA MALLA .....	3-22
3.3.2 INFILTRACIÓN DE METANOL DESDE UNA FUENTE EN FORMA DE DISCO, REDISTRIBUCIÓN Y VOLATILIZACIÓN.....	3-22
<i>Caso de estudio III: suelo homogéneo</i> .....	3-23
Sensibilidad de la solución numérica al tamaño de malla y al paso de tiempo .....	3-24
Movimiento y redistribución de la mezcla líquida .....	3-24
Distribución de concentraciones y mecanismos de transporte .....	3-28
Campo de velocidad de la fase líquida.....	3-30
Volatilización de metanol .....	3-31
<i>Caso de estudio IV: en suelo heterogéneo</i> .....	3-33
Movimiento y redistribución de la mezcla líquida .....	3-35
Distribución de concentraciones y mecanismos de transporte .....	3-37
Campo de velocidad de la fase líquida.....	3-38
Volatilización de metanol .....	3-40
3.3.3 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD A LA DISPERSIÓN .....	3-41
<i>Suelo homogéneo</i> .....	3-43
<i>Suelo heterogéneo</i> .....	3-45
BIBLIOGRAFÍA .....	3-47
TABLAS .....	3-51
FIGURAS .....	3-55

## **CAPÍTULO 4**

### **UNA FUNCIÓN DE RETENCIÓN QUE INCLUYE LA ZONA DE SEQUEDAD EXTREMA EN CONCORDANCIA CON LA ISOTERMA DE ADSORCIÓN DE BET**

4.1 INTRODUCCIÓN .....	4-1
4.1.1 OBJETIVOS.....	4-3
4.2 MODELO DE RETENCIÓN DE AGUA.....	4-4

4.2.1 FORMULACIÓN.....	4-4
4.2.2 CONDUCTIVIDAD HIDRÁULICA NO SATURADA .....	4-9
4.2.3 EVALUACIÓN DE LA FUNCIÓN DE RETENCIÓN EN UN MODELO DE TRANSPORTE DE AGUA .....	4-11
<i>Ecuaciones básicas de transporte e implementación numérica</i> .....	4-11
<i>Simulación del transporte de agua</i> .....	4-13
BIBLIOGRAFÍA .....	4-17
TABLAS .....	4-20
FIGURAS .....	4-22

## **CAPÍTULO 5**

### **CONCLUSIONES**

## APÉNDICE I

Silva O. y J. Grifoll (2003), “Modelización y simulación numérica del transporte de solutos volátiles no pasivos”, Estudios de la Zona No Saturada del Suelo Vol. VI, 245-250, Eds. Javier Álvarez-Benedí y Pilar Marinero, Valladolid, ISBN 84-688-3698-2.

## APÉNDICE II

Silva O. y J. Grifoll (2005), “Simulación numérica del transporte bidimensional no pasivo de compuestos orgánicos volátiles”, Estudios de la Zona No Saturada del Suelo Vol. VII, 249-256, Eds. J. Samper y A. Paz, A Coruña, ISBN 84-9749-171-8.

## APÉNDICE III

Silva O. y J. Grifoll (2007), “Non-passive transport of volatile organic compounds in the unsaturated zone”, *Advances in Water Resources* 30, 794-807.

## APÉNDICE IV

Silva O. y J. Grifoll (2006), “A soil-water retention function that includes the nearly dry region through the BET adsorption isotherm”, enviado a *Water Resources Research*.

## APÉNDICE V

Silva O. y J. Grifoll, “Non-passive transport of volatile organic compounds infiltrated from a soil surface disk source”, en preparación para ser enviado a *Journal of Contaminant Hydrology*.

## APÉNDICE VI

Silva O. y J. Grifoll, “Una función de retención que incluye la región de sequedad extrema en concordancia con la isoterma de adsorción de BET”, en preparación para ser enviado a Estudios de la Zona No Saturada del Suelo Vol. VIII, Córdoba 2007.

## RELACIÓN DE FIGURAS

### CAPÍTULO 1

Figura 1.1. Perfiles verticales del (A) subsuelo de la Tierra y (B) del régimen de agua en el subsuelo.....	1-21
---	------

### CAPÍTULO 2

Figura 2.1. Condiciones de contorno para el problema de transporte no pasivo en 2D. ....	2-29
Figura 2.2. Flujos que intervienen en el balance 1D de masa discretizado de $k$ -ésimo componente en el $n$ -ésimo volumen de control del sistema. ....	2-30
Figura 2.3. Plano de coordenadas $r$ - $z$ para el sistema cilíndrico 2D y flujos que intervienen en el balance de masa discretizado de $k$ -ésimo componente en el $nm$ -ésimo volumen de control.....	2-30
Figura 2.4. Diagrama de flujo para el algoritmo de Newton-Raphson que resuelve el transporte no pasivo de soluto desde $t$ a $t + \Delta t$ .....	2-31
Figura 2.5. Comparación de la solución numérica de la ecuación (2.3) con la solución analítica reportada por <i>van Genuchten</i> y <i>Alves</i> [1982] para transporte 1D de soluto. ....	2-32
Figura 2.6. Comparación de la solución numérica de la ecuación (2.3) con la solución numérica reportada por <i>Gastó et al.</i> [2002]. (a) Infiltración 2D rápida de agua en un suelo de textura franco arenosa, (b) Infiltración 2D lenta de agua en un suelo de textura arcillo limosa.....	2-33

### CAPÍTULO 3

Figura 3.1. Variación con la concentración de la tensión interfacial y la viscosidad dinámica de una solución acuosa de butanol [ <i>Smith y Gillham</i> , 1999]. ....	3-54
Figura 3.2. Evolución en el tiempo de la carga matricial y el contenido de líquido a una profundidad de 38 cm, durante la infiltración en arena de una solución acuosa de butanol al 7% p/p. Comparación entre los datos experimentales y la simulación numérica de <i>Smith y Gillham</i> [1999], y la presente simulación numérica. ....	3-54
Figura 3.3. Dependencia con la concentración de las propiedades físicas de una solución acuosa de metanol: (a) densidad, (b) viscosidad dinámica. (c) tensión interfacial, (d) coeficiente de difusión en fase líquida.....	3-55
Figura 3.4. Coeficientes de partición gas-líquido para el sistema metanol-agua. ....	3-56
Figura 3.5. Dependencia de la concentración y el contenido de líquido en la superficie del suelo con (a) el tamaño de malla y (b) el máximo paso de tiempo.....	3-57
Figura 3.6. Simulación 1D de la infiltración y redistribución de mezclas metanol-agua de diferente composición en una suelo franco arcillo arenoso. Resultados al cabo de 48 horas con una dispersividad de 7.8 cm. (a) Contenido volumétrico de líquido, (b) concentración normalizada de metanol en fase líquida.....	3-58
Figura 3.7. Evolución de los flujos normalizados de volatilización de metanol y de evaporación	

de agua para varias composiciones de la mezcla de infiltración. (a) Volatilización de metanol, (b) evaporación de agua.....	3-59
Figura 3.8. Flujo de líquido en función de la concentración de metanol, descompuesto en su componente capilar y gravitacional, al cabo de 48 horas. (a) Componente capilar, (b) componente gravitacional.....	3-60
Figura 3.9. Flujo capilar de líquido y sus componentes al cabo de 48 horas de simulación con una dispersividad saturada igual a 7.8 cm. (a) $C_{l,in} = 0.001 \text{ kg/m}^3$ , (b) $C_{l,in} = 200 \text{ kg/m}^3$ , (c) $C_{l,in} = 400 \text{ kg/m}^3$ , (d) $C_{l,in} = 600 \text{ kg/m}^3$ , (e) $C_{l,in} = 786.6 \text{ kg/m}^3$ .....	3-60
Figura 3.10. Flujos parciales de metanol normalizados por el flujo de volatilización en superficie, correspondientes a la infiltración 1D de mezclas acuosas de metanol en un suelo franco arcillo arenoso, obtenidos a las 48 horas. (a) Flujo difusivo parcial en fase gaseosa, (b) flujo dispersivo parcial en fase líquida, (c) flujo convectivo parcial en fase líquida.....	3-63
Figura 3.11. Simulación 1D de la infiltración y redistribución de mezclas metanol-agua de diferente composición en un suelo franco arcillo arenoso. Resultados obtenidos a las 48 horas con una dispersividad de 0.2 cm. (a) Contenido volumétrico de líquido, (b) concentración normalizada de metanol en fase líquida.....	3-64
Figura 3.12. Flujo capilar de líquido y sus componentes a las 48 horas de simulación, $C_{l,in} = 400 \text{ kg/m}^3$ y una dispersividad igual a 0.2 cm.....	3-64
Figura 3.13. Perfiles correspondientes a la infiltración, redistribución y volatilización de una mezcla acuosa de metanol en un suelo arcillo limoso (línea discontinua representa los resultados obtenidos al ignorar el efecto Kelvin dentro del suelo). (a) Contenido volumétrico de líquido, (b) concentración de metanol en fase líquida.....	3-65
Figura 3.14. Efecto Kelvin sobre los flujos parciales normalizados obtenidos en un suelo arcillo limoso a las 168 horas y $C_{l,in} = 400 \text{ kg/m}^3$ (línea discontinua representa los resultados obtenidos al ignorar el efecto Kelvin dentro del suelo). (a) Flujo difusivo parcial de metanol en fase gaseosa, (b) flujo difusivo parcial de agua en fase gaseosa.....	3-65
Figura 3.15. Efecto Kelvin sobre la volatilización de metanol y la evaporación de agua desde un suelo arcillo limoso (línea discontinua representa los resultados obtenidos al ignorar el efecto Kelvin dentro del suelo). (a) Volatilización de metanol, (b) evaporación de agua.....	3-66
Figura 3.16. Dominio de solución con las condiciones de contorno e inicial asumidas en la simulación bidimensional del transporte no pasivo de mezclas acuosas de metanol. (a) <i>Caso de estudio III</i> : suelo homogéneo, (b) <i>Caso de estudio IV</i> : suelo heterogéneo.....	3-67
Figura 3.17. Dependencia de la concentración (a) y del contenido de líquido (b) en la superficie del suelo con el tamaño de malla $\Delta z$ . Simulaciones 2D con $N_r = 43$ y $\Delta t_{max} = 160 \text{ s}$ .....	3-68
Figura 3.18. Infiltración, redistribución y volatilización de 3 mezclas acuosas de metanol en un suelo homogéneo. Resultados del <i>Caso de estudio III</i> obtenidos al cabo de 168 horas y una dispersividad de 7.8 cm. Perfiles de contenido volumétrico de líquido para las mezclas al (a) 5% p/p, (b) 50% p/p, (c) 90% p/p. Perfiles de concentración normalizada para las mezclas al (d) 5% p/p, (e) 50% p/p, (f) 90% p/p.....	3-69
Figura 3.19. Perfiles de viscosidad de la fase líquida al final de la simulación del <i>Caso de estudio III</i> : suelo homogéneo. Mezclas de infiltración al (a) 5% p/p, (b) 50% p/p, (c) 90% p/p.....	3-71
Figura 3.20. Perfil de contenido volumétrico de líquido obtenido al final de la simulación 2D para suelo homogéneo, con la mezcla de infiltración al 90% p/p y viscosidad constante.....	3-72
Figura 3.21. Campos de velocidad de la fase líquida obtenidos al final de la simulación del <i>Caso de estudio III</i> : suelo homogéneo. Mezcla de infiltración al (a) 5% p/p, (b) 50% p/p y (c) 90% p/p.....	3-73

Figura 3.22. Evolución de la masa metanol infiltrado que se volatiliza a la atmósfera en el <i>Caso de estudio III</i> : suelo homogéneo. ....	3-74
Figura 3.23. Infiltración, redistribución y volatilización de 3 mezclas acuosas de metanol en un suelo heterogéneo. Resultados del <i>Caso de estudio IV</i> obtenidos al cabo de 168 horas y una dispersividad de 7.8 cm. Perfiles de contenido volumétrico de líquido para las mezclas al (a) 5% p/p, (b) 50% p/p y (c) 90% p/p. Perfiles de concentración normalizada para las mezclas al (d) 5% p/p, (e) 50% p/p y (f) 90% p/p. ....	3-75
Figura 3.24. Campos de velocidad de la fase líquida obtenidos al final de la simulación del <i>Caso de estudio IV</i> : suelo heterogéneo. Mezcla de infiltración al (a) 5% p/p, (b) 50% p/p y (c) 90% p/p. El rectángulo en rojo define las fronteras del bloque arcilloso. ....	3-77
Figura 3.25. Evolución de la masa metanol infiltrado que se volatiliza a la atmósfera en el <i>Caso de estudio IV</i> : suelo homogéneo. ....	3-78
Figura 3.26. Análisis de sensibilidad a la dispersión. Infiltración de una mezcla de composición $C_{l,in}^m = 90\%$ p/p, en un suelo homogéneo con una dispersividad longitudinal saturada de 1.0 cm. Resultados al cabo de 168 horas de simulación. (a) Contenido volumétrico de líquido, (b) concentración normalizada de metanol, (c) campo de velocidades de la fase líquida. ....	3-79
Figura 3.27. Análisis de sensibilidad a la dispersión. Infiltración de una mezcla de composición $C_{l,in}^m = 90\%$ p/p en un suelo heterogéneo con una dispersividad longitudinal saturada de 1.0 cm. Resultados al cabo de 168 horas de simulación. (a) Contenido volumétrico de líquido, (b) concentración normalizada de metanol, (c) campo de velocidades de la fase líquida (el rectángulo en rojo define las fronteras del bloque arcilloso). ....	3-80

## CAPÍTULO 4

Figura 4.1. Comparación entre la nueva curva de retención y los datos experimentales: (a) Palouse, (b) Palouse B, (c) Walla Walla, (d) Salkum, (e) Royal, (f) L-Soil, (g) Rothamsted. ....	4-22
Figura 4.2. Ajuste del nuevo modelo de retención a los datos de adsorción de agua y el modelo de Campbell a partir de <i>Chen et al.</i> [2000a, 2000b] (suelo franco limoso Yolo). ....	4-24
Figura 4.3. Comparación entre los datos experimentales de transporte de agua LW2 [ <i>Chen et al.</i> , 2000b] y la simulación numérica con la nueva función de retención (a) porcentaje de agua inicial remanente en el suelo, (b) perfil de contenido de agua al final del experimento (la línea discontinua corresponde al contenido inicial de agua). ....	4-25
Figura 4.4. Evolución del contenido volumétrico de agua medido y calculado, a diferentes profundidades durante el experimento LW2 [ <i>Chen et al.</i> , 2000b]. Profundidades nominales para los datos experimentales: ● 1 cm, ○ 10 cm. Las líneas continuas corresponden a los resultados de la simulación a la profundidad indicada. ....	4-26



## RELACIÓN DE TABLAS

### CAPÍTULO 3

Tabla 3.1. Condiciones de simulación 1D y propiedades hidráulicas del suelo. Transporte no pasivo de butanol disuelto†. ....	3-50
Tabla 3.2. Coeficientes polinomiales obtenidos por ajuste de los datos experimentales† a 20 °C a la ecuación (3.3). ....	3-51
Tabla 3.3. Condiciones de simulación 1D y propiedades hidráulicas del suelo. Transporte no pasivo de mezclas acuosas de metanol. ....	3-52
Tabla 3.4. Condiciones de simulación 2D y parámetros hidráulicos. Transporte no pasivo de mezclas acuosas de metanol. ....	3-53

### CAPÍTULO 4

Tabla 4.1. Parámetros de la isoterma de adsorción BET (ecuación 4.1) extraídos de la literatura.....	4-20
Tabla 4.2. Parámetros de la nueva función de retención ajustados a los datos experimentales. ....	4-21
Tabla 4.3. Bondad de ajuste de la nueva función de retención. ....	4-21

## NOMENCLATURA

### Acrónimos

1D	una dimensión; unidimensional
2D	dos dimensiones; bidimensional
A	arcilloso
BC	Brooks-Corey
BET	Brunauer-Emmett-Teller
BTEX	benzene, toluene, ethylbenzene, xylenes
COV	compuesto orgánico volátil
CPU	central process unit
DNAPL	dense non-aqueous phase liquid
FAA	franco arcillo arenoso
FEMWATER	Finite element model for groundwater (groundwater modeling systems)
HYDRUS-2D	Code for Simulating the Two-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Porous Media
MtBE	methyl tert-butyl ether
NAPL	non-aqueous phase liquid
PCE	tetracloroetano
RMSE	root mean square error
RN	Rossi-Nimmo
STOMP	Subsurface Transport Over Multiple Phases
TDR	time domain reflectometry
UNSAT-H	Unsaturated Soil Water and Heat Flow Model
USA	United States of America
VG	van Genuchten
VST2D	a model for simulating transient, Variably Saturated, coupled water-heat-solute Transport in heterogeneous, anisotropic 2-Dimensional, ground-water systems with variable fluid density

### Alfanumérico

### Unidades

$a$	como superíndice hace referencia al aire	
$a$	como superíndice hace referencia al aire. Constante en correlación de tensión interfacial (ecuación 3.1). Coeficiente constante en ecuación (4.7)	% p/p
$a_j$	coeficiente polinomial (ecuación 3.3)	
$a_{ij}^k$	área interfacial entre las fases $i$ y $j$ por volumen unitario de matriz porosa	$m^2/m^3$
A	zona de infiltración en 2D	
$b$	constante en correlación de tensión interfacial (ecuación 3.1). Coeficiente constante en ecuación (4.7)	
B	zona de volatilización pura en 2D	
$B$	Parámetro de la isoterma de adsorción de BET	
$c$	coeficiente constante en ecuación (4.7)	
$C$	composición de la mezcla. Concentración de soluto en la fase líquida	$kg/m^3$
$C_l$	concentración de butanol en fase líquida. Concentración de metanol en fase líquida	% p/p $kg/m^3$
$C_0$	concentración de soluto en la solución de entrada	$kg/m^3$
$C_g^a$	concentración de aire seco en la fase gaseosa	$kg/m^3$
$C_b^k$	concentración de fondo del $k$ -ésimo componente en la atmósfera	$kg/m^3$
$C_{g0}^k$	concentración del $k$ -ésimo en fase gaseosa y en la superficie del suelo	$kg/m^3$
$C_{l0}$	concentración de metanol en la superficie del suelo	$kg/m^3$
$C_{l0}^\infty$	concentración de metanol en la superficie del suelo extrapolada a un número infinito de volúmenes de control	$kg/m^3$
$C_{l,in}$	concentración de metanol en la mezcla de infiltración	$kg/m^3$
$C_i^k$	concentración del $k$ -ésimo componente en la fase $i$	$kg/m^3$
$C_{l,in}^k$	concentración del $k$ -ésimo componente en el líquido de infiltración	$kg/m^3$
$C_g^a$	vector que reúne los valores de concentración de aire seco en fase gaseosa	

$C_1$	en cada celda de la malla de discretización	$\text{kg/m}^3$
$\mathbf{C}_1$	vector que reúne los valores de concentración de soluto en fase líquida	
$d$	en cada celda de la malla de discretización	$\text{kg/m}^3$
	constante en correlación de viscosidad cinemática (ecuación 3.2).	$\% \text{ p/p}$
	Coefficiente constante en ecuación (4.7)	
$D$	coeficiente de difusión-dispersión efectivo	$\text{m}^2/\text{s}$
$D_i^k$	coeficiente de difusión-dispersión longitudinal para el $k$ -ésimo componente	
	en la fase $i$	$\text{m}^2/\text{s}$
$D_{Li}$	coeficiente de dispersión longitudinal en la fase $i$	$\text{m}^2/\text{s}$
$D_{Wg}$	coeficiente de difusión del vapor de agua en el aire	$\text{m}^2/\text{s}$
$D_{W0g}$	coeficiente de difusión molecular del agua en la fase gaseosa	$\text{m}^2/\text{s}$
$D_{0i}^k$	coeficiente de difusión molecular del $k$ -ésimo componente en la fase $i$	$\text{m}^2/\text{s}$
$\mathbf{D}_i^k$	tensor de difusión-dispersión del $k$ -ésimo componente	$\text{m}^2/\text{s}$
$e$	constante en correlación de viscosidad cinemática (ecuación 3.2)	
$e_n^a$	acumulación de aire seco en $n$ -ésimo volumen de control	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$e_n^k$	término de acumulación de componente $k$ en $n$ -ésimo volumen de control	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$\mathbf{e}_z$	vector unitario en dirección vertical (positivo hacia arriba)	
$E_{nm}^a$	término de acumulación de aire seco en $nm$ -ésimo volumen de control	$\text{kg/m}^3 \text{ s}$
$E_{nm}^k$	término de acumulación de componente $k$ en $nm$ -ésimo volumen de control	$\text{kg/m}^3 \text{ s}$
$g$	aceleración de gravedad	$\text{m/s}^2$
$g$	como subíndice hace referencia a la fase gaseosa	
$H_{ij}^k$	coeficiente de partición del $k$ -ésimo componente, entre las fases $i$ y $j$	
$H_{gl}^{*k}$	coeficiente de partición gas-líquido para interfaces planas o constante de Henry	
$H_{sl}^m$	coeficiente de partición sólido-líquido para el metanol	
$I$	integral de Burdine (ecuaciones 2.18 y 2.19)	
$j$	como superíndice hace referencia al tiempo anterior	
$J_{Wg}$	flujo difusivo de vapor de agua	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$\mathbf{J}_g^a$	vector de densidad de flujo de masa difusivo-dispersivo	
	del aire seco en el gas	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$\mathbf{J}_i^k$	vector de densidad de flujo de masa difusivo-dispersivo	
	del $k$ -ésimo componente en la fase $i$	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$J_{ir}^a$	flujo difusivo-dispersivo en dirección radial de aire seco en la fase $i$	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$J_{iz}^a$	flujo difusivo-dispersivo en dirección axial de aire seco en la fase $i$	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$J_{irz}^a$	flujo difusivo-dispersivo en dirección radial-axial de aire seco en la fase $i$	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$J_{izr}^a$	flujo difusivo-dispersivo en dirección axial-radial de aire seco en la fase $i$	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$J_{ir}^k$	flujo difusivo-dispersivo en dirección radial	
	del $k$ -ésimo componente en la fase $i$	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$J_{iz}^k$	flujo difusivo-dispersivo en dirección axial	
	del $k$ -ésimo componente en la fase $i$	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$J_{irz}^k$	flujo difusivo-dispersivo en dirección radial-axial	
	del $k$ -ésimo componente en la fase $i$	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$J_{izr}^k$	flujo difusivo-dispersivo en dirección axial-radial	
	del $k$ -ésimo componente en la fase $i$	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$J_{conv,i}^k$	flujo parcial por convección de componente $k$ en la fase $i$	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$J_{dif,i}^k$	flujo parcial por difusión de componente $k$ en la fase $i$	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$J_{disp,i}^k$	flujo parcial por dispersión de componente $k$ en la fase $i$	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$\mathbf{J}_l^w$	vector de densidad de flujo de masa difusivo-dispersivo	
	del agua en el líquido	$\text{kg/m}^2 \text{ s}$
$k$	como superíndice hace referencia al $k$ -ésimo componente del sistema	
$k_{w0}$	coeficiente de transferencia de materia del lado de la atmósfera para el agua	$\text{m/s}$
$k_0^k$	coeficiente de transferencia de materia del lado de la atmósfera	
	para el $k$ -ésimo componente	$\text{m/s}$
$k_{ri}$	permeabilidad relativa de la fase $i$	
$k_{rw}$	permeabilidad relativa del agua líquida	
$\mathbf{k}$	tensor de permeabilidad intrínseca del medio	$\text{m}^2$
$l$	como subíndice hace referencia a la fase líquida	
$l_k$	parámetro de van Genuchten en el modelo de permeabilidad relativa	
$L$	profundidad del suelo	$\text{m}$

$m$	parámetro de van Genuchten. Como subíndice hace referencia al $m$ -ésimo volumen de control. Como superíndice hace referencia al metanol	
$m\pm 1/2$	como subíndice hace referencia a la posición de las facetas del $nm$ -ésimo volumen de control en dirección radial	
$m_k$	parámetro de van Genuchten en el modelo de permeabilidad relativa	
$M_i$	valor medido de la presión matricial correspondiente a la $i$ -ésima medición	Pa
$M_w$	masa molecular del agua	kg/mol
$M^k$	peso molecular del $k$ -ésimo componente.	kg/kmol
$M_{inf}^k$	Masa de componente $k$ que se volatiliza a la atmósfera	kg
$n$	masa infiltrada de componente $k$	kg
	parámetro de van Genuchten. Como subíndice hace referencia al $n$ -ésimo volumen de control o a la iteración $n$ del método de Newton-Raphson	
$n\pm 1/2$	como subíndice hace referencia a la posición de las facetas del $n$ -ésimo o $nm$ -ésimo volumen de control en dirección vertical	
$N$	número de componentes del sistema. Número total de mediciones	
$N_c$	número de volúmenes de control	
$N_r$	número de volúmenes de control en dirección radial	
$N_z$	número de volúmenes de control en dirección vertical	
$N_{w0}$	flujo de evaporación de agua en la superficie del suelo	kg/m <sup>2</sup> s
$N_{ij}^k$	flujo másico local interfacial del $k$ -ésimo componente desde la fase $i$ a la fase $j$	kg/m <sup>2</sup> s
$N_0^k$	flujo de masa del $k$ -ésimo componente en superficie	kg/m <sup>2</sup> s
$\overline{N}_0^k$	flujo medio de volatilización de componente $k$	kg/m <sup>2</sup> s
$N_0^m$	flujo local de volatilización de metanol	kg/m <sup>2</sup> s
$N_{0,ini}^m$	flujo de volatilización de metanol al comienzo del período de volatilización	kg/m <sup>2</sup> s
$N_0^w$	flujo local de evaporación de agua	kg/m <sup>2</sup> s
$N_{0,ini}^w$	flujo de evaporación de agua al comienzo del período de evaporación	kg/m <sup>2</sup> s
$N_{n\pm 1/2}^a$	densidades de flujo de entrada (-) y salida (+) de aire seco asociadas al $n$ -ésimo volumen de control	kg/m <sup>2</sup> s
$N_{n\pm 1/2}^k$	densidades de flujo de entrada (-) y salida (+) de componente $k$ asociadas al $n$ -ésimo volumen de control	kg/m <sup>2</sup> s
$N_{r,nm\pm 1/2}^a$	densidades de flujo de entrada (-) y salida (+) de aire seco en dirección radial asociadas al volumen de control $nm$	kg/m <sup>2</sup> s
$N_{z,n\pm 1/2m}^a$	densidades de flujo de entrada (-) y salida (+) de aire seco en dirección vertical asociadas al volumen de control $nm$	kg/m <sup>2</sup> s
$N_{r,nm\pm 1/2}^k$	densidades de flujo de entrada (-) y salida (+) de componente $k$ en dirección radial asociadas al volumen de control $nm$	kg/m <sup>2</sup> s
$N_{z,n\pm 1/2m}^k$	densidades de flujo de entrada (-) y salida (+) de componente $k$ en dirección vertical asociadas al volumen de control $nm$	kg/m <sup>2</sup> s
$p$	función polinomial de la concentración que hace referencia a una propiedad física genérica (ecuación 3.3)	
$p^*$	presión de vapor de agua	Pa
$p_{vap}^k$	presión de vapor del $k$ -ésimo componente	Pa
$pF$	logaritmo de la altura de la columna de agua necesaria para dar una succión determinada	
$P$	presión matricial	Pa
$P_{atm}$	presión atmosférica	Pa
$P_b$	presión de burbuja (parámetro de Brooks-Corey)	Pa
$P_c$	presión capilar	Pa
$P_d$	presión matricial del agua a sequedad de horno	Pa
$P_i$	presión de la fase $i$ . Valor predicho de la presión matricial correspondiente a la $i$ -ésima medición	Pa
$P_M$	presión matricial del líquido	Pa
$P_{M,w}$	presión matricial del agua	Pa
$P_1$	presión de unión en punto de marchitamiento	mbar

$P_2$	presión de unión entre zona de transición e isoterma BET	MPa
$q_{i0}$	descarga líquida específica de infiltración	m/s
$q_{l,cap}$	componente capilar del flujo de líquido	m/s
$q_{l,grav}$	componente gravitacional del flujo de líquido	m/s
$q_{l,cap}^C$	flujo capilar de líquido debido a variaciones en la concentración de metanol	m/s
$q_{l,cap}^\theta$	flujo capilar de líquido debido a variaciones en el contenido de líquido	m/s
$q_{iz}$	componente axial del vector de descarga específica de la fase $i$	m/s
$q_{ir}$	componente radial del vector de descarga específica de la fase $i$	m/s
$q_i$	descarga específica de la fase $i$	m/s
$r$	coordenada radial	m
$r_c$	radio del disco de infiltración en 2D	m
$r_{m\pm 1/2}$	posiciones de las fronteras laterales del $nm$ -ésimo volumen de control	m
$R$	constante universal de los gases	Pa m <sup>3</sup> /K mol
$R^2$	coeficiente de correlación en el ajuste de la isoterma BET	
$\mathbf{R}$	función vectorial de descuadres o residuales másicos	kg/m <sup>2</sup> s
$R^a$	descuadre másico o residual para el aire	kg/m <sup>2</sup> s
$R^k$	descuadre másico o residual para el $k$ -ésimo componente	kg/m <sup>2</sup> s
$R_0$	radio del dominio de solución en 2D	m
$S$	área de la superficie del suelo bajo régimen de volatilización.	m <sup>2</sup>
	Saturación de agua	
$S_e$	saturación efectiva de líquido	
$S_{ej}$	saturación efectiva de líquido en punto de unión (Rossi-Nimmo)	
$S_i$	saturación real de la fase $i$	
$S_{ij}$	saturación real de líquido en punto de unión (Rossi-Nimmo)	
$S_{ir}$	saturación real de líquido en condiciones residuales	
$s$	como subíndice hace referencia a la fase sólida	
$(s)_{n\pm 1/2}$	propiedad escalar en la entrada (-) y la salida (+) del $n$ -ésimo volumen de control	
$t$	tiempo	s
$t_c$	tiempo de infiltración en 2D	s
$T$	temperatura	K
$\hat{V}^k$	volumen molar parcial del $k$ -ésimo componente en la fase líquida	m <sup>3</sup> /mol
$\hat{V}_m$	volumen molar parcial de la mezcla líquida	m <sup>3</sup> /mol
$\hat{V}_w$	volumen molar de agua líquida	m <sup>3</sup> /mol
$w$	como superíndice hace referencia al agua	
$W_m$	capacidad másica de monocapa	kg/kg
$x$	humedad relativa	
$\mathbf{x}$	vector de variables primarias	
$\mathbf{x}_n$	vector de variables primarias en la iteración $n$ del método de Newton-Raphson	
$\mathbf{x}_{n+1}$	vector de variables primarias corregidas	
$z$	coordenada axial	m
$z_{n\pm 1/2}$	posiciones de las fronteras verticales del $n$ -ésimo o $nm$ -ésimo volumen de control	m
$\partial \mathbf{R}(\mathbf{x})/\partial \mathbf{x}$	matriz Jacobiana del método de Newton-Raphson	
$\partial \mathbf{R}^k/\partial \mathbf{x}_i$	submatriz de la matriz Jacobiana que da cuenta de los residuales de la ecuación de conservación de componente $k$ respecto de la variable primaria $\mathbf{x}_i$	

### Letras griegas

$\alpha_{Li}$	dispersividad longitudinal en la fase $i$	m
$\alpha_{Li}^0$	dispersividad longitudinal en la fase $i$ a saturación	m
$\alpha_{RN}$	parámetro de Rossi-Nimmo	
$\alpha_{Ti}$	dispersividad transversal en la fase $i$	m
$\alpha_{VG}$	parámetro de van Genuchten	cm <sup>-1</sup>
$\beta_{kr}$	componente radial del vector $\beta_k$	m/s
$\beta_{kz}$	componente axial del vector $\beta_k$	m/s

$\beta_k$	vector de velocidad para el $k$ -ésimo componente (ecuación 2.3)	m/s
$\delta\theta_i$	incremento en el contenido volumétrico de líquido	$m^3/m^3$
$\delta C_g^a$	incremento en la concentración de aire seco	$kg/m^3$
$\delta C_j^l$	incremento en la concentración de componente $j$ en fase líquida	$kg/m^3$
$\delta_{xy}$	función delta de Kronecker	
$\Delta h$	diferencia de entalpía entre el vapor en la fase gaseosa y la fase líquida condensada y/o adsorbida, excluyendo la entalpía o calor latente de vaporización	J/mol
$\Delta z$	tamaño de la malla dirección axial	m
$\Delta r$	tamaño de malla en dirección radial	m
$\Delta t$	paso de tiempo	s
$\Delta t_{max}$	paso de tiempo máximo	s
$(\Delta\theta_w)_{max}$	discrepancia máxima de contenido de agua	$m^3/m^3$
$\overline{\Delta\theta_w}$	discrepancia promedio de contenido de agua	$m^3/m^3$
$\Delta x$	vector de corrección de las variables primarias en el método de Newton-Raphson	
$\varepsilon$	porosidad del medio	$m^3/m^3$
$\gamma^k$	coeficiente de actividad del $k$ -ésimo componente	
$\varphi$	coeficiente de distribución de fases	$m^3/m^3$
$\varphi_k$	coeficiente de distribución del $k$ -ésimo componente (ecuación 2.3)	$m^3/m^3$
$\lambda$	índice de distribución de tamaño de poro (parámetro de Brooks-Corey)	
$\mu_i$	viscosidad dinámica de la fase $i$	kg/m s
$\mu_w$	viscosidad dinámica del agua	kg/m s
$\nu$	velocidad efectiva del líquido	m/s
$\nu$	viscosidad cinemática del líquido	cS
$\nu_0$	viscosidad cinemática de referencia	cS
$\sigma$	tensión interfacial del líquido	N/m
$\sigma_w$	tensión interfacial del agua	N/m
$\theta_i$	fracción volumétrica de la fase $i$	$m^3/m^3$
$\theta_j$	contenido volumétrico en punto de unión (parámetro de Rossi-Nimmo)	$m^3/m^3$
$\theta_0$	contenido volumétrico de líquido en la superficie del suelo	$m^3/m^3$
$\theta_{0^\infty}$	contenido volumétrico de líquido en la superficie del suelo extrapolado a un número infinito de volúmenes de control	$m^3/m^3$
$\theta_r$	contenido volumétrico residual de agua (parámetro de van Genuchten)	$m^3/m^3$
$\theta_r$	contenido residual de agua (parámetro de Brook-Corey)	$m^3/m^3$
$\theta_w$	contenido volumétrico de agua	$m^3/m^3$
$\theta_{wm}$	contenido volumétrico de agua correspondiente a una monocapa	$m^3/m^3$
$\theta_1$	vector que reúne los valores de contenido de líquido en cada celda de la malla de discretización	$m^3/m^3$
$\rho_i$	densidad de la fase $i$	$kg/m^3$
$\rho_s$	densidad de la fase sólido-suelo	$kg/m^3$
$\rho_v$	densidad del vapor de agua	$kg/m^3$
$\rho_{v,0}$	densidad del vapor de agua en la superficie del suelo	$kg/m^3$
$\rho_w$	densidad del agua líquida	$kg/m^3$
$\rho_{wbk}$	densidad del vapor de agua de fondo en la atmósfera	$kg/m^3$
$\rho_g$	densidad molar de la fase gaseosa	$kmol/m^3$
$\pi$	constante pi	
$\tau_i$	tortuosidad de la fase $i$	
$\Psi$	carga matricial	m

## RESUMEN

La forma más habitual de modelar el transporte de solutos en la zona no saturada es considerar que se comportan de manera pasiva y utilizar la solución del movimiento de las fases fluidas como información de entrada. La presencia de algunas sustancias químicas puede afectar a las propiedades físicas de los fluidos, originando así procesos de transporte no pasivos. El objetivo principal de esta tesis ha sido formular un modelo detallado que describa el transporte no pasivo en la zona no saturada y en condiciones isotérmicas de compuestos orgánicos volátiles solubles en agua.

El modelo propuesto incluye las dependencias de la densidad, la viscosidad, la tensión interfacial, el coeficiente de difusión molecular en fase líquida, y los coeficientes de distribución gas-líquido, con la composición de la mezcla acuosa. También se ha tenido en cuenta la reducción de los coeficientes de distribución gas-líquido debida a presiones capilares elevadas, de acuerdo a la ecuación de Kelvin válida para mezclas multicomponentes.

Se ha implementado el modelo en dos códigos numéricos. El primero permite la simulación en dominios unidimensionales y el segundo en bidimensionales con simetría cilíndrica. En el caso de sistemas 1D se ilustra la infiltración y redistribución de mezclas acuosas de alcoholes. La simulación de la infiltración de mezclas de butanol y agua en arena estuvo de acuerdo con las simulaciones y datos experimentales que se reportan en la literatura. La simulación de la infiltración, redistribución y volatilización de mezclas acuosas de metanol en dos suelos diferentes, mostró que la concentración de metanol afecta significativamente los perfiles de contenido volumétrico de líquido y concentración, al igual que los flujos normalizados de volatilización y evaporación. La dispersión en fase líquida fue el mecanismo predominante en el transporte de metanol para una dispersividad longitudinal a saturación de 7.8 cm. El flujo de líquido estuvo gobernado principalmente por gradientes de presión capilar inducidos por cambios en el contenido volumétrico de líquido. Sin embargo, considerando una dispersividad longitudinal a saturación de 0.2 cm, los cambios de la tensión interfacial debidos a variaciones en la composición indujeron un flujo importante de líquido, y la convección en fase líquida fue el mecanismo de transporte más activo. Al ignorar el efecto Kelvin dentro del suelo, la difusión en fase gaseosa se redujo significativamente, resultando en menores flujos de evaporación de agua y mayores contenidos volumétricos de líquido cerca de la superficie del suelo.

En el caso de sistemas 2D, el modelo se implementó bajo una condición de contorno en la superficie del suelo que permite que diferentes zonas se encuentren bajo régimen de infiltración o volatilización independientemente. El modelo se aplicó a la simulación de la infiltración bidimensional de mezclas acuosas de metanol desde una fuente con forma de disco, su redistribución y volatilización, en suelo homogéneo y heterogéneo. Las simulaciones mostraron que la concentración de metanol tiene un impacto significativo sobre los perfiles de contenido volumétrico de líquido y concentración, al igual que sobre la fracción de masa infiltrada de metanol que se volatiliza a la atmósfera. La dependencia de la viscosidad con la concentración tuvo el impacto mayor sobre el flujo de líquido, actuando en el mismo sentido o contrarrestando los efectos de la tensión interfacial, dependiendo de la composición y de la magnitud de los gradientes de concentración desarrollados en el suelo. La heterogeneidad del suelo favoreció que se manifestaran los efectos no pasivos, ya que las diferencias en contenido volumétrico de líquido y concentración normalizada de metanol aumentaron durante el transporte a través de un suelo compuesto de un bloque arcilloso inmerso dentro de una matriz principal de textura franco arcillo arenosa. La dispersión en fase líquida fue el mecanismo predominante en el transporte de metanol para una dispersividad longitudinal saturada de 7.8 cm. Sin embargo, cuando esta se fijó en 1.0 cm, los cambios en la tensión

interfacial debidos a variaciones de la composición indujeron un flujo de líquido significativamente mayor, mientras que la convección en fase líquida fue el mecanismo de transporte más activo, para suelos homogéneos y mezclas de infiltración altamente concentradas. Por el contrario, dado que el bloque arcilloso y el secado mayor de la parte superior del suelo favorecen un aumento de los gradientes de concentración por arriba del bloque, en esta situación de suelo heterogéneo con una menor dispersividad la dispersión en fase líquida fue nuevamente el mecanismo de transporte predominante.

Finalmente, y como contribución al estudio del comportamiento de solutos en condiciones de sequedad, se ha propuesto una función de retención capaz de describir coherentemente el movimiento del agua y la adsorción de solutos. En la mayoría de las funciones de retención que cubren todo el rango de saturaciones, las curvas de presión capilar se extienden en la región de sequedad alta asumiendo que el contenido de agua se anula para un valor finito del potencial matricial. La definición más común de sequedad completa consiste en la de sequedad de horno, en la cual se supone que el contenido de agua es cero a una succión de  $10^7$  cm. Sin embargo, físicamente es imposible que una cantidad nula de agua ejerza una presión finita. Por otro lado, existen en la bibliografía varios trabajos experimentales que muestran que la isoterma de adsorción de Brunauer-Emmet-Teller (BET) describe adecuadamente el equilibrio entre el vapor de agua y el agua adsorbida sobre la matriz sólida que forma el suelo.

En esta tesis, se propone utilizar esta isoterma BET para describir la curva de retención de agua en la región más seca de la curva. Para cubrir todo el rango de contenidos de agua, se toma la función clásica de Brooks-Corey en el rango húmedo, mientras que la transición entre los mecanismos de capilaridad y adsorción se obtiene por medio de una generalización de la isoterma de adsorción de Bradley. Se obtuvo un buen ajuste entre el nuevo modelo de retención y siete conjuntos de datos experimentales. Finalmente, se evaluó el desempeño de la nueva función de retención dentro de un modelo de transporte de agua, observándose su validez para describir la dinámica de los flujos en todo el rango de condiciones de contenido en agua.

Es bien conocido que la adsorción de compuestos orgánicos volátiles en los suelos casi secos se realiza de manera competitiva con el vapor de agua. La presente propuesta permite calcular estos procesos de adsorción competitiva de manera coherente con los procesos de flujo y evaporación de agua.