

Modelo para Evaluación de Derrames de Hidrocarburos (HSSM)

Guía del Usuario

por

James W. Weaver

National Risk Management Research Laboratory
United States Environmental Protection Agency
Ada, Oklahoma 74820

Randall J Charbeneau, John D. Tauxe
Department of Civil Engineering
The University of Texas at Austin
Austin, Texas 78712

Bob K. Lien

National Risk Management Research Laboratory
United States Environmental Protection Agency
Ada, Oklahoma 74820

y

Jacques B. Provost

Computer Sciences Corporation
Ada, Oklahoma 74820

Traducción al Español por
Ulrich Hungsberg
Comisión Nacional del Agua y
Instituto Mexicano de Tecnología del Agua
México

National Risk Management Research Laboratory
Office of Research and Development
U. S. Environmental Protection Agency
Cincinnati, Ohio 45268

Advertencia

Español

La información en este documento fue financiada total o parcialmente por la United States Environmental Protection Agency* a través del apoyo directo de los autores de la EPA, el acuerdo de cooperación CR 813080 con la Universidad de Texas en Austin, el contrato 68-C8-0058 con la Dynamac Corporation y el contrato 68-W1-0043 con la Computer Services Corporation. Fue sujeta a la revisión de superiores y administrativa de la Agencia y fue aprobada para su publicación como un documento de la EPA. La mención de nombres o productos comerciales no constituye un endoso o recomendación para su empleo.

Todos los proyectos de investigación que hacen conclusiones o recomendaciones basadas en mediciones relacionadas con el medio ambiente y financiadas por la United States Environmental Protection Agency requieren participar en el programa de aseguramiento de calidad de la Agencia. Este proyecto no se incluyó con mediciones relacionadas con el medio ambiente y no incluyó al plan de aseguramiento de calidad.

El Programa de Computadora descrito en este informe simula el comportamiento de contaminantes no miscibles en agua (NAPLs: Líquidos de fase no acuosa) en sistemas subterráneos idealizados. El procedimiento descrito no es apropiado para su aplicación a formaciones geológicas heterogéneas, ni son aplicables a cualquier otro escenario diferente al descrito aquí. El modelo tiene solo la intención de proporcionar estimaciones del orden de magnitud de contaminantes. El modelo completo no ha sido verificado mediante comparación con estudios, ya sean de laboratorio o de campo. Por lo tanto, la EPA no endosa el uso de este programa de computadora para algún objetivo específico. Como en el caso de cualquier investigación subterránea, es de primordial importancia el juicio científico e ingenieril del usuario del modelo. Cualquier resultado del modelo debería someterse a un análisis cuidadoso. En la presente guía del usuario, se dan valores típicos para varios parámetros. Estos se proporcionan exclusivamente para fines de ilustración.

Al estar disponible, el software descrito en este documento, se proporciona sobre la base "tal como es", sin garantía de cualquier índole expresa o implícita. Ni el gobierno de los E.U.A. (United States Environmental Protection Agency, National Risk Management Research Laboratory), El Instituto Mexicano de Tecnología del Agua y la Comisión Nacional del Agua, La Universidad de Texas en Austin, Computer Services Corporation, ni ninguno de los autores aceptan cualquier responsabilidad como resultado del uso de este código.

English

The information in this document has been funded wholly or in part by the United States Environmental Protection Agency, through direct support of the EPA authors, cooperative agreement CR-813080 to the University of Texas at Austin, contract 68-C8-0058 with Dynamac Corporation, and contract 68-W1-0043 with Computer Services Corporation. It has been subjected to the Agency's peer and administrative review, and it has been approved for publication as an EPA document. Mention of trade names or commercial products does not constitute endorsement or recommendation for use.

All research projects making conclusions or recommendations based on environmentally related measurements and funded by the United States Environmental Protection Agency are required to participate in the Agency Quality Assurance Program. This project did not involve environmentally related measurements and did not involve a Quality Assurance Plan.

The computer program described in this report simulates the behavior of water-immiscible contaminants (NAPLs: NonAqueous Phase Liquids) in idealized subsurface systems. The approaches described are not suited for application to heterogeneous geological formations, nor are they applicable to any other scenario other than that described herein. The model is intended to provide order-of-magnitude estimates of contaminants only. The full model has not been verified by comparison with either lab or field studies. Therefore the EPA does not endorse the use of this computer program for any specific purpose. As in the case of any subsurface investigation,

*Agencia de Protección del Ambiente de los E.U.A.

the scientific and engineering judgement of the model user is of paramount importance. Any model results should be subjected to thorough analysis. In this user's guide, typical values are given for various parameters. These are provided for illustrative purposes only.

When available, the software described in this document is supplied on an "as-is" basis without guarantee or warranty of any kind, expressed or implied. Neither the United States Government (United States Environmental Protection Agency, National Risk Management Research Laboratory), the Instituto Mexicano de Tecnologia del Agua, The University of Texas at Austin, Computer Services Corporation, nor any of the authors accept any liability resulting from the use of this code.

Prólogo

Español

La U.S. Environmental Protection Agency esta encargada, por el Congreso, de la protección de los recursos de tierra, aire y agua. Bajo un mandato de leyes ambientales nacionales, la agencia trata de formular e implementar acciones que conduzcan a un equilibrio compatible entre las actividades humanas y la habilidad de los sistemas naturales de soportar y alimentar la vida. Para cumplir con estos mandatos, el programa de investigación de la EPA está proporcionando hoy en día datos y apoyo técnico para resolver problemas ambientales y está construyendo una base de conocimientos científicos, necesarios para manejar sabiamente nuestros recursos ecológicos, comprender como los contaminantes afectan nuestra salud y evitar o reducir los riesgos ambientales en el futuro.

El National Risk Management Research Laboratory (Laboratorio Nacional de Investigación para el Manejo de Riesgos) es el centro de la agencia para la investigación de procedimientos tecnológicos y administrativos para reducir riesgos de amenazas a la salud humana y al ambiente. El enfoque del programa de investigación del laboratorio es sobre métodos de prevención y control de la contaminación del aire, tierra, agua y recursos subterráneos; la protección de la calidad del agua en los sistemas públicos del agua; el saneamiento de sitios contaminados y del agua subterránea y la prevención y control de la contaminación del aire interior. La meta de este esfuerzo de investigación es catalizar el desarrollo y la implementación de tecnologías ambientales innovadoras, de alta relación beneficio-costos; desarrollar información científica e ingenieril necesaria para la EPA para apoyar las decisiones regulatorias y de política; y proporcionar apoyo técnico y transferencia de información para garantizar la implementación efectiva de las reglamentaciones y estrategias ambientales.

Esta publicación ha sido proporcionada como parte del programa de investigación estratégica a largo plazo del laboratorio. Se publica y se pone a disposición por la Oficina de Investigación y Desarrollo de la EPA, para ayudar a la comunidad de usuarios y para conectar a los investigadores con sus clientes.

El Modelo de Evaluación de Derrames de Hidrocarburos (HSSM) fue desarrollado con objeto de proporcionar una herramienta práctica para evaluar el impacto de derrames de hidrocarburos a base de petróleo sobre los recursos de agua subterránea. El Ing. Ulrich Hungsberg del Instituto Mexicano de Tecnología del Agua (IMTA), y posteriormente de la Comisión Nacional del Agua de México propuso que se tradujera el modelo al español para el uso del pueblo de México. Fue firmada una carta de intención para el proyecto entre el IMTA y la Robert S. Kerr Environmental Protection Agency (RSKERL) por el Dr. Alvaro A. Aldama-Rodríguez, Vocal Ejecutivo del IMTA y el Señor Clinton W. Hall Director del Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory[†]. El Ing. Hungsberg efectuó personalmente la traducción del documento del idioma inglés al español.

La versión en idioma inglés de la guía del usuario, denominada Hydrocarbon Spill Screening Model (HSSM) Volume 1 User's Guide, EPA/600/R-94/039a, está disponible en el Center for Subsurface Modeling Support (CSMoS) en la Subsurface Protection and Remediation División, National Risk Management Research Laboratory, United States Environmental Protection Agency, Ada, Oklahoma 78420 (ver página 5).

English

The U.S. Environmental Protection Agency is charged by Congress with protecting the Nation's land, air, and water resources. Under a mandate of national environmental laws, the Agency strives to formulate and implement actions leading to a compatible balance between human activities and the ability of natural systems to support and nurture life. To meet these mandates, EPA's research program is providing data and technical support for solving environmental problems today and building a science knowledge base necessary to manage our ecological resources wisely, understand how pollutants affect our health, and prevent or reduce environmental risks in the future.

The National Risk Management Research Laboratory is the Agency's center for investigation of technological and management approaches for reducing risks from threats to human health and the environment. The focus of

[†]El nombre fue cambiado a Subsurface Protection and Remediation Division, National Risk Management Research Laboratory en 1995

the Laboratory's research program is on methods for prevention and control of pollution to air, land, water, and subsurface resources; protection of water quality in public water systems; remediation of contaminated sites and ground water; and prevention and control of indoor air pollution. The goal of this research effort is to catalyze development and implementation of innovative, cost-effective environmental technologies; develop scientific and engineering information needed by EPA to support regulatory and policy decisions; and provide technical support and information transfer to ensure effective implementation of environmental regulations and strategies.

This publication has been provided as part of the Laboratory's strategic long-term research plan. It is published and made available by EPA's Office of Research and Development to assist the user community and to link researchers with their clients.

The Hydrocarbon Spill Screening Model (HSSM) was developed to provide a practical tool for assessing the impact of petroleum hydrocarbon releases on ground water resources. Ing. Ulrich Hungsberg, of the Instituto Mexicano de Tecnología del Agua (IMTA), and later of the Comisión Nacional del Agua proposed that the model be translated into Spanish for the use of the people of Mexico. A letter of intention for the project between the IMTA and the Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory (RSKERL) was signed by Dr. Alvaro A. Aldama-Rodríguez, Vocal Ejecutivo, IMTA and Mr. Clinton W. Hall, Director, Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory[‡]. Ing. Hungsberg personally undertook the translation of the English language document into Spanish.

The English language version of the user's guide, titled *The Hydrocarbon Spill Screening Model (HSSM) Volume 1 User's Guide*, EPA/600/R-94/039a, is available from the Center for Subsurface Modeling Support (CSMoS) at the Subsurface Protection and Remediation Division, National Risk Management Research Laboratory, United States Environmental Protection Agency, Ada, Oklahoma, 78420 (see page 5).

Clinton W. Hall, Director
Subsurface Protection and Remediation Division
National Risk Management Research Laboratory

[‡]name changed to Subsurface Protection and Remediation Division, National Risk Management Research Laboratory in 1995

Resumen

Español

Esta guía del usuario describe el Modelo de Evaluación de Derrames de Hidrocarburos (HSSM). El modelo tiene el propósito de simular derrames subterráneos de líquidos ligeros de fase no acuosa (LNAPLs). El modelo consiste de módulos separados para el flujo de LNAPLs a través de la zona vadosa, el esparcido en la franja capilar, y el transporte de compuestos químicos de LNAPL hacia el acuífero freático. Estos módulos están basados en conceptualizaciones simplificadas del flujo y de los fenómenos de transporte, que fueron usados de manera que el modelo resultante fuese una herramienta práctica aunque aproximada. Se proporcionan ambas interfaces de DOS y Windows para crear conjuntos de datos de entrada, correr el modelo y graficar los resultados. Estas interfaces simplifican los procedimientos para correr el modelo, de manera que el usuario del modelo pueda enfocarse al análisis de su problema de interés. Con este fin se proporciona orientación para seleccionar los valores de los parámetros y se facilitan varios programas de utilería, para calcular ciertos parámetros. En problemas ejemplo típicos, que se inician con una descripción general del problema se muestra exactamente, cómo deberá seleccionarse cada parámetro del modelo.

English

This user's guide describes the Hydrocarbon Spill Screening Model (HSSM). The model is intended for simulation of subsurface releases of light nonaqueous phase liquids (LNAPLs). The model consists of separate modules for LNAPL flow through the vadose zone, spreading in the capillary fringe, and transport of chemical constituents of the LNAPL in a water table aquifer. These modules are based on simplified conceptualizations of the flow and transport phenomena which were used so that the resulting model would be a practical, though approximate, tool. Both DOS and Windows interfaces are provided to create input data sets, run the model, and graph the results. These interfaces simplify the procedures for running the model so that the model user may focus on analysis of his/her problem of interest. To that end, guidance is given for selecting parameter values and several utility programs are provided to calculate certain parameters. Typical example problems, which begin with a general problem statement, show exactly how each parameter of the model should be chosen.

Contenido

Advertencia	ii
Prólogo	iv
Resumen	vi
Lista de Figuras	xii
Lista de Tablas	xiv
Lista de Símbolos y Siglas	xv
Agradecimientos	xix
1 Introducción	1
1.1 Significado del Nombre Modelo HSSM	1
1.1.1 Hidrocarburo	1
1.1.2 Derrame	2
1.1.3 Modelo de Evaluación	2
1.2 Componentes del Modelo	2
1.3 Obtención de una Copia del Modelo HSSM	5
2 Suposiciones en las Que se Basa el Modelo HSSM	8
2.1 Módulo Transporte Cinemático del Contaminante Aceitoso (KOPT)	8
2.2 Módulo OILENS	11
2.3 Módulo de Estela de Fuente Transitoria Tipo Gaussiana (TSGPLUME)	12
3 Opciones de Interfaz	16
4 Interfaz de MS-Windows, HSSM-WIN	18
4.1 Descripción General de la Interfaz Microsoft Windows	18
4.2 Requisitos del Sistema	19
4.3 Instalación	20
4.3.1 Lista de Empaque de los Archivos	20
4.3.2 Copiado de Archivos al Disco Duro	21
4.3.3 Agregado de HSSM a un Grupo Administrador de Programas	21
4.4 Uso del Modelo HSSM-WIN	23
4.4.1 Arranque	23
4.4.2 Resumen de Comandos del Menú	24
4.5 Empleo de HSSM-WIN para Efectuar Simulaciones del Modelo HSSM	25
4.5.1 Creación de Nuevos Conjuntos de Datos de Entrada	25
4.5.2 Edición de Conjuntos de Datos de Entrada Existentes	25
4.5.3 Corrida del Modelo	26
4.5.4 Graficado de los Resultados del Modelo	27
4.5.5 Graficado de Resultados a Partir de una Simulación Previa	27
4.5.6 Impresión de una Gráfica	28
4.5.7 Comparación Entre Varias Simulaciones	28
4.5.8 Copiado de una Gráfica al Portapapeles	28
4.5.9 Salir del Modelo HSSM-WIN	29
4.6 Editar y Crear Conjuntos de Datos del Modelo HSSM	29
4.6.1 Uso de los Editores de los Archivos de Entrada - Técnicas Comunes	29
4.6.2 Unidades Requeridas para las Simulaciones del Modelo HSSM	31

4.6.3	Parámetros Generales del Modelo	31
4.6.4	Datos Hidráulicos	33
4.6.5	Datos de la Fase de Hidrocarburos (NAPL)	39
4.6.6	Datos de Simulación del Modelo	44
4.7	Corrida de los Módulos KOPT, OILENS y TSGPLUME	48
4.8	Presentación Gráfica de la Salida de HSSM	54
4.8.1	Perfiles de Saturación	54
4.8.2	Perfiles de la Lente NAPL	54
4.8.3	Historia del Flujo de Masa Contaminante	55
4.8.4	Historia del Radio de NAPL	55
4.8.5	Balance de Masa de la Lente de Contaminante de NAPL	55
4.8.6	Historias de Concentración de los Receptores	55
4.9	Una Nota acerca de la Eficiencia de Usar la Interfaz de Windows	59
4.10	Relación de Comandos del Menú	59
5	Problemas Ejemplo	63
5.1	Problema 1: Tiempo de Llegada de la Gasolina al Nivel Freático	63
5.2	Problema 2: Transporte de Compuestos de Gasolina en el Agua Subterránea Hacia Sitios Receptores	70
6	Contenido de los Archivos de Salida	77
6.1	Archivo de Salida del Modelo HSSM-KO	77
6.2	Archivo de Salida de HSSM-T	94
	Bibliografía	99
	Apéndices	100
A	Interfaz de MS-DOS, HSSM-DOS	100
A.1	Programa de Menús de HSSM-DOS	100
A.2	Entrada de Datos en PRE-HSSM	100
A.3	Cómputos por Medio de HSSM-KO y HSSM-T	101
A.4	Graficado de Resultados en HSSM-PLT	101
A.5	Resumen Rápido de los Comandos de la Interfaz de DOS	101
A.6	Requisitos del Sistema	101
A.7	Instalación	103
A.8	Uso del Preprocesador PRE-HSSM	104
A.8.1	Guardar los Datos en un Archivo	106
A.8.2	Comandos del Menú Principal PRE-HSSM	107
A.8.3	Creación y Edición de Conjuntos de Datos de HSSM	107
A.9	Corrida de los Módulos KOPT, OILENS y TSGPLUME	133
A.10	Graficado de Resultados del Modelo HSSM con HSSM-PLT	139
A.10.1	Requerimientos del Paquete	139
A.10.2	Descripción General	139
A.11	Presentación Gráfica de la Salida del Modelo HSSM	143
B	Problema Ejemplo en DOS	145
B.1	Tiempo de Llegada de la Gasolina al Nivel Freático	145
B.1.1	Resultados del Modelo	148
C	Fuentes de Datos de Parámetros	151
C.1	Propiedades del Suelo	151
C.2	Coeficiente de Partición NAPL/Agua	157
C.3	Estimación de la Saturación Máxima de NAPL en la Lente	159

D	Revisión Concisa de las Bases Teóricas del Modelo HSSM	162
D.1	Modelo de Transporte Cinemático de Contaminante Aceitoso	162
D.2	Modelo OILENS	164
D.3	Modelo de Estela de Fuente Transitoria tipo Gaussiana	166
E	Conversión Aproximada de los Parámetros de la Curva de Presión Capilar	168
F	Utilería de Regresión para Propiedades de Suelo (SOPROP)	170
G	Utilería RAOULT	172
H	Utilería NTHICK	176
H.1	Procedimiento para el Empleo de NTHICK	178
H.2	Ejemplo de Secuencia de Cálculo de NTHICK	178
I	Utilería REBUILD	181
J	Instalación Doble para las Interfaces DOS y Windows	182
K	Edición Directa de los Archivos de Datos de HSSM-KO	183
L	Edición Directa de los Archivos de Datos de HSSM-T	187
M	Plantillas de Entrada de Datos de PRE-HSSM	188
N	Plantillas de Datos de Entrada de HSSM-WIN	193

Lista de Figuras

1.1	Vista esquemática del derrame de NAPL.	3
1.2	Vista esquemática de un derrame idealizado de NAPL empleado en el modelo HSSM.	4
1.3	Esquema del modelo HSSM que muestra el empleo de cada módulo.	5
2.1	Opciones de derrames en el modelo HSSM.	9
2.2	Comparación entre frentes abruptos y esparcidos.	10
2.3	Comparación entre datos experimentales y el modelo KOPT.	11
2.4	Configuración de la lente durante la fase de adelgazamiento.	12
2.5	Configuración de la fuente tipo gaussiana usada en TSGPLUME.	13
2.6	Sistemas de coordenadas para los módulos KOPT, OILENS y TSGPLUME del modelo HSSM	14
2.7	Representación esquemática de la evolución de la concentración según el módulo TSGPLUME.	15
4.1	Instalación de HSSM-WIN en un grupo Administrador de programas.	22
4.2	Pantalla inicial de HSSM-WIN.	23
4.3	Cuadro de diálogo abrir archivo.	25
4.4	Cuadro de diálogo para guardar archivo como.	26
4.5	Cuadro de diálogo para exhibición de gráficas.	27
4.6	Comparación de gráficas de dos simulaciones diferentes.	29
4.7	Gráfica de HSSM-WIN pegada en PAINTBRUSH.	30
4.8	Ejemplo de un mensaje de error en la entrada de datos.	31
4.9	Cuadro de diálogo de parámetros generales.	33
4.10	Cuadro de diálogo de parámetros hidráulicos.	34
4.11	Cuadro de diálogo de parámetros de la fase de hidrocarburos.	39
4.12	Cuadro de diálogo para datos de simulación del modelo.	45
4.13	Pantalla introductoria de HSSM-KO.	49
4.14	Pantalla de declaraciones.	50
4.15	Nombre de archivos de salida y opciones de corrida.	50
4.16	Mensajes de pantalla típicos de HSSM-KO.	51
4.17	Pantalla introductoria de HSSM-T.	52
4.18	Nombres de archivos de salida de HSSM-T y opciones de corrida.	53
4.19	Mensajes típicos de pantalla de HSSM-T.	53
4.20	Perfiles típicos de saturación.	56
4.21	Perfil típico de lente de NAPL.	56
4.22	Historia típica del flujo de masa contaminante.	57
4.23	Historia típica del radio de la lente de NAPL.	57
4.24	Balance de masa contaminante típico en lente de NAPL.	58
4.25	Historias típicas de concentraciones en receptores.	58
5.1	Problema 1 cuadro de diálogo de parámetros generales ya llenado.	64
5.2	Problema 1 cuadro de diálogo de propiedades hidráulicas ya llenado.	65
5.3	Problema 1 cuadro de diálogo de propiedades de la fase de hidrocarburo terminado.	67
5.4	Problema 1 cuadro de diálogo de parámetros de control de simulación terminado.	68
5.5	Perfiles de saturación del ejemplo del tanque de almacenamiento.	69
5.6	Ejemplo del tanque de almacenamiento con conductividad incrementada.	69
5.7	Problema 2 cuadro de diálogo de parámetros generales ya llenado.	70
5.8	Problema 2 cuadro de diálogo de propiedades hidráulicas ya llenado.	72
5.9	Problema 2 cuadro de diálogo de propiedades de la fase de hidrocarburo terminado.	74
5.10	Problema 2 cuadro de diálogo de parámetros de control de simulación terminado.	76
A.1	Menú HSSM-DOS.	100
A.2	Pantalla de introducción de PRE-HSSM.	105
A.3	Escritura de archivos de datos.	106

A.4	Selección de nombres de archivos.	106
A.5	Salir de PRE-HSSM.	107
A.6	PRE-HSSM menú principal.	108
A.7	Interruptores de control de simulación.	109
A.8	Título de la corrida.	110
A.9	Propiedades del medio poroso.	111
A.10	Propiedades hidráulicas.	113
A.11	Propiedades de la fase de hidrocarburo (NAPL).	115
A.12	Parámetros de aproximación de succión capilar.	118
A.13	Condición de frontera de hidrocarburos (NAPL).	119
A.14	Concentración del compuesto disuelto.	121
A.15	Coefficientes de partición de equilibrio lineal.	122
A.16	Parámetros del modelo OILENS, primera pantalla.	123
A.17	Parámetros del modelo OILENS, segunda pantalla.	125
A.18	Parámetros de control de simulación.	126
A.19	Número de perfiles.	128
A.20	Tiempos de perfiles.	128
A.21	Menu de entrada de datos de TSGPLUME.	129
A.22	Datos de TSGPLUME.	129
A.23	Tiempo de simulación de TSGPLUME.	131
A.24	Localización de pozos para TSGPLUME.	132
A.25	Pantalla introductoria de HSSM-KO.	133
A.26	Pantalla de declaraciones.	134
A.27	Nombres de archivos de salida y opciones de corrida.	135
A.28	Mensajes típicos de pantalla de HSSM-KO.	135
A.29	Pantalla introductoria de HSSM-T.	137
A.30	Nombres de archivos de salida de HSSM-T y opciones de corrida.	137
A.31	Mensajes típicos de pantalla de HSSM-T.	138
A.32	Opciones de configuración de dispositivos de salida.	141
A.33	Selección del puerto de salida.	142
B.1	Perfiles de saturación.	149
B.2	Posición del frente NAPL.	150
B.3	Ejemplo de un almacenamiento en superficie con conductividad incrementada.	150
C.1	Comparación de las curvas promedio de presión capilar con datos medidos.	156
D.1	Comparación entre frentes abruptos y esparcidos durante la infiltración (izquierda) y el perfil de NAPL durante la redistribución (derecha).	163
D.2	Representación de profundidad contra tiempo de la solución del modelo KOPT.	164
D.3	La lente NAPL y su cilindro central.	165
E.1	Comparación de parámetros equivalentes de Brooks y Corey y de van Genuchten.	169
F.1	Salida de pantalla de SOPROP.	171
G.1	Pantalla principal de la utilería RAOULT.	172
G.2	Ejemplo de cálculo de RAOULT para el compuesto de benceno de la gasolina.	173
G.3	Conjunto de datos por default de RAOULT.DAT.	173
G.4	Modificación interactiva del conjunto de datos por default de RAOULT.	175
H.1	Archivo de datos de entrada de NTHICK.	176
H.2	Mensajes típicos de salida de NTHICK.	177
H.3	Estimación de la saturación del NAPL en NTHICK.	178

H.4	Perfil de la lente del archivo de salida *.HSS.	180
K.1	Estructura del archivo de entrada de HSSM-KO; parte 1.	183
K.2	Estructura del archivo de entrada de HSSM-KO; parte 2.	184
K.3	Estructura del archivo de entrada de HSSM-KO; parte 3.	185
K.4	Estructura del archivo de entrada de HSSM-KO; parte 4.	186
L.1	Estructura del archivo de datos de entrada de HSSM-T.	187

Lista de Tablas

1.1	Implementación de los módulos HSSM.	5
3.1	Comparación de las interfaces MS-DOS y MS-Windows.	16
3.2	Utilerías para el cálculo de datos para el HSSM.	17
4.1	Bosquejo de la interfaz de HSSM-WIN.	18
4.2	Lista de empaque de archivos para la interfaz Windows del modelo HSSM.	20
4.3	Resumen de comandos de HSSM-WIN.	24
4.4	Unidades requeridas para las simulaciones del modelo HSSM.	32
4.5	Resumen de relaciones de conductividad hidráulica.	37
4.6	Densidades y viscosidades de NAPL a 20°C.	40
4.7	Tensiones superficiales de varios combustibles (<i>Wu y Hottel</i> , 1991).	41
4.8	Archivos usados por las interfaces de HSSM.	51
4.9	Interruptores de datos de HSSM-KO para la creación de archivos de datos de entrada TSGPLUME (HSSM-T).	52
4.10	Gráficas de HSSM.	54
4.11	Resumen de comandos de HSSM-WIN.	59
5.1	Problema 1 propiedades hidráulicas.	64
5.2	Problema 1 propiedades del medio poroso.	65
5.3	Problema 1 parámetros de conductividad hidráulica y de la curva de presión capilar.	66
5.4	Problema 1 propiedades de la fase de hidrocarburo (NAPL).	66
5.5	Problema 1 parámetros de control de la simulación.	68
5.6	Problema 2 propiedades hidráulicas.	71
5.7	Problema 2 parámetros derivados de las propiedades hidráulicas.	72
5.8	Problema 2 parámetros de control de simulación.	75
5.9	Problema 2 parámetros del modelo HSSM-T.	75
6.1	Contenido del archivo principal de salida de HSSM.	77
6.2	Datos de entrada.	78
6.3	Localización del frente NAPL.	82
6.4	Localización del frente del compuesto	84
6.5	Salida del modelo OILENS-descripción de la lente NAPL.	86
6.6	Salida del modelo OILENS-contaminantes acuosos.	88
6.7	Perfil de saturación y concentración.	90
6.8	Perfil radial a través de la lente NAPL.	92
6.9	Resumen del archivo de salida de HSSM-T.	94
A.1	Resumen rápido de los comandos de HSSM en MS-DOS.	102
A.2	Lista de empaque de archivos para la interfaz HSSM-DOS.	103
A.3	Unidades requeridas para HSSM.	108
A.4	Resumen de relaciones de conductividad.	111
A.5	Densidades y viscosidades a 20°C.	116
A.6	Tensiones superficiales de varios combustibles.	118
A.7	Interruptores de datos de HSSM-KO para la creación de archivos de datos de entrada TSGPLUME (HSSM-T).	136
A.8	Archivos requeridos para el programa de presentaciones gráficas de HSSM-PLT.	139
A.9	Resumen rápido de los comandos de HSSM-PLT.	140
A.10	Gráficas del modelo HSSM.	144
B.1	Problema 1 interruptores de opciones de impresión.	145
B.2	Problema 1 propiedades del medio poroso.	146

B.3	Problema 1 parámetros de conductividad hidráulica y de la curva de presión capilar.	146
B.4	Problema 1 Propiedades hidráulicas.	147
B.5	Problema 1 propiedades de la fase de hidrocarburos (NAPL).	147
B.6	Problema 1 parámetros de control de simulación.	148
C.1	Propiedades promedio de los suelos determinadas según <i>Brakensiek et al.</i> (1981).	153
C.2	Parámetros de Brooks y Corey para arenas seleccionadas.	153
C.3	Estadística descriptiva de los datos de <i>Carsel y Parrish</i> (1988): contenido saturado de agua y contenido residual de agua.	153
C.4	Estadística descriptiva de los datos de <i>Carsel y Parrish</i> (1988): n y α	154
C.5	Estadística descriptiva de los datos de <i>Carsel y Parrish</i> (1988): conductividad hidráulica.	154
C.6	Coefficientes de regresión según <i>Rawls y Brakensiek</i> (1985).	155
C.7	Características de partición.	157
C.8	Mezcla de pseudo-gasolina (<i>Baehr y Corapcioglu</i> , 1987).	158
C.9	Coefficientes de partición combustible/agua medidos.	158
E.1	Parámetros equivalentes de la curva de presión capilar.	168
F.1	Rango de valores de parámetros producidos por las ecuaciones de regresión de <i>Rawls y Brakensiek</i> (1985).	171
H.1	Datos de entrada requeridos para NTHICK.	176
H.2	Ejemplo de secuencia de resultados de NTHICK y HSSM-KO.	179

Lista de Símbolos y Siglas

en Latín

$B(T)$	Flujo de masa dependiente del tiempo de las ecuaciones D.9 y D.10
b_o	Espesor de hidrocarburo (NAPL) en el pozo de observación
b_{ijk}	Coefficiente de regresión en ecuación C.6
C	Coefficiente en ecuación C.5
C_b	Concentración del benceno en la gasolina
c_o	Concentración de la fase de NAPL y Concentración pico (ecuación D.13)
$c_o(ini)$	Concentración inicial del compuesto en el NAPL
c_{oj}	Concentración del constituyente número j
c_s	Concentración de la fase sólida
c_w	Concentración de la fase de agua
c_{wo}	Concentración de la fase de agua del compuesto en equilibrio
D_L	Coefficiente de dispersión longitudinal
D_o	Espesor medio de hidrocarburo (NAPL) de la formación
D_T	Coefficiente de dispersión horizontal transversal
D_V	Coefficiente de dispersión vertical transversal
d_{pl}	Profundidad de la base de la zona contaminada
f_b	Fracción de masa del benceno en la gasolina
f_{oc}	Fracción de carbón orgánico del medio
g	Aceleración de la gravedad
H_s	Profundidad de encharcamiento
h_c	Carga capilar
h_{ce}	Carga de entrada de aire
h_{ceij}	Presión de entrada para un sistema fluido i-j
h_{cea0}	Presión de entrada para un sistema NAPL-aire
h_{ceow}	Presión de entrada para un sistema agua-NAPL
h_{os}	Carga del NAPL en la fuente
K_{ej}	Conductividad efectiva con respecto al flujo j
K_{eo}	Conductividad efectiva con respecto al NAPL
$K_{eo}(S_o, S_{w(avg)})$	Conductividad efectiva para el NAPL
K_{ew}	Conductividad efectiva con respecto al agua
K_{sw}	Conductividad hidráulica vertical saturada
K_{sj}	Conductividad saturada respecto al fluido j
K_{so}	Conductividad hidráulica saturada de la fase NAPL
k_d	Coefficiente de partición suelo/agua
k_o	Coefficiente de partición NAPL/agua
k_{oc}	Coefficiente de partición del carbón orgánico
k_{rj}	Permeabilidad relativa respecto al fluido j

en Latín (continuación)

k_{rw}	Permeabilidad relativa con respecto al agua
$k_{rw(max)}$	Permeabilidad relativa máxima con respecto al agua durante la infiltración
m	Parámetro del modelo de van Genuchten
\dot{m}_{infil}	Flujo de masa por recarga
\dot{m}_{diss}	Flujo de masa de contaminantes por disolución de la lente NAPL (ecuación D.10)
n	Parámetro del modelo de van Genuchten
$P_c, P_c(S)$	Presión capilar
PC	Por ciento de arcilla
PS	Por ciento de arena
p_{baw}	Presión de burbujeo (o entrada) en un sistema compuesto de agua y aire, y asociada con la carga de entrada, h_{ce}
p_{bij}	Presión de burbujeo (o entrada) en un sistema compuesto de los fluidos i y j
p_{cij}	Presión capilar entre los fluidos i y j
p_{cao}	Presión capilar NAPL-aire
p_{cow}	Presión capilar agua-NAPL
Q_{KOPT}	Flujo volumétrico de entrada a la lente
Q_{loss}	Suma de las pérdidas volumétricas debidas a disolución y entrapamiento de la fase NAPL en las zonas saturadas
Q_{radial}	Flujo volumétrico de salida desde el cilindro central
Q_{out}	Pérdida del NAPL por disolución y entrapamiento con la saturación residual
q_1, q_2	Flujos de NAPL de cada lado de la arista frontal del NAPL invasor
q_o	Flujo de NAPL
q_w	Flujo de agua
q_{wi}	Velocidad media anual de recarga
R_d	Coefficiente de retardo
R_s	Radio de la lente de petróleo en la fuente
R_T	Radio de la lente NAPL
S	Saturación
S_1, S_2	Saturaciones del NAPL de cada lado de la arista frontal del NAPL invasor
S_{ir}	Saturación residual del fluido i
S_j	Saturación del fluido j
S_*	Cantidad definida por ecuación E.4
S_o	Saturación de NAPL
$S_{o(max)}$	Saturación de NAPL en la lente
S_{ors}	Saturación residual del acuífero con NAPL
S_{orv}	Saturación residual de NAPL en la zona vadosa
S_t	Saturación total de líquidos $S_t = S_w + S_o$
S_w	Saturación de agua
$S_{w(avg)}$	Saturación de agua determinada por la recarga
S_{wr}	Saturación residual de agua
s_k	Solubilidad de la especie k en el agua
t	Tiempo
v	Velocidad de filtración
X, x	Dirección a lo largo del eje longitudinal de la estela (la dirección de flujo del agua subterránea)
Y, y	Dirección transversal al eje X
z	Profundidad debajo de la superficie
	En Apéndice C.3 altura arriba del nivel freático
z_{ao}	En Apéndice C.3 elevación de la presión capilar cero en un sistema air-LNAPL
z_{aw}	En Apéndice C.3 elevación de la presión capilar cero en un sistema aire-agua
z_{ow}	En Apéndice C.3 elevación de la presión capilar cero en un sistema LNAPL-agua

en Griego

α	Parámetro del modelo de van Genuchten
α_L	Dispersividad longitudinal
α_T	Dispersividad horizontal transversal
α_V	Dispersividad vertical transversal
β	Función de b_o en ecuación C.24
γ_k	Coefficiente de actividad de la especie k
$\Delta\rho_{ij}$	Diferencia en densidad entre los fluidos i y j
$\Delta\rho_{ao}$	Diferencia en densidad entre aire y NAPL
η	Porosidad
Θ_j	Contenido reducido de la fase de humedecimiento
Θ_t	Contenido reducido total líquido
Θ_w	Saturación reducida de agua
θ_j	Contenido volumétrico del fluido j
θ_{jr}	Contenido líquido residual del fluido j
θ_m	Contenido volumétrico máximo de agua
θ_o	Contenido volumétrico de NAPL
θ_w	Contenido volumétrico de humedad
θ_{wr}	Contenido volumétrico residual de agua
λ	Índice de distribución del tamaño de poro
λ^*	Constante de decaimiento de primer orden (Apéndice D)
μ_j	Viscosidad dinámica del fluido j
μ_o	Viscosidad dinámica del NAPL
μ_w	Viscosidad dinámica del agua
ρ_b	Densidad global del suelo
ρ_j	Densidad del fluido j
ρ_g	Densidad de la gasolina
ρ_o	Densidad del NAPL
ρ_s	Densidad de los sólidos
ρ_w	Densidad del agua
σ	Desviación estándar de la distribución del contaminante transversal a la estela
σ_{ij}	Tensión interfacial entre fluidos i y j
σ_{ao}	Tensión superficial del NAPL
σ_{aw}	Tensión superficial del agua
σ_{ow}	Tensión interfacial entre el NAPL y el agua
χ	Constante en ecuación C.24
ω_j	Peso de molecular del constituyente número j
ω_o	Peso molecular medio de la fase NAPL

Abreviaturas y Siglas

CSMoS	Center for Subsurface Modeling Support Centro para Apoyo de Modelado del Subsuelo
DNAPL	Denser-than-water Nonaqueous Phase Liquid Líquido de fase no acuosa más densa que el agua
KOPT	Kinematic Oily Pollutant Transport (vadose zone module of HSSM) Transporte Cinemático del Contaminante Aceitoso (módulo de zona vadosa de HSSM)
HSSM	Hydrocarbon Spill Screening Model Modelo de Evaluación de Derrames de Hidrocarburos
HSSM-DOS	DOS menu program for HSSM Programa del menú DOS para HSSM
HSSM-KO	KOPT and OILENS portion of HSSM Porción KOPT y OILENS de HSSM
HSSM-PLT	DOS plotting program for HSSM Programa de graficado en DOS para HSSM
HSSM-T	TSGPLUME portion of HSSM Porción TSGPLUME de HSSM
HSSM-WIN	Windows interface program for HSSM Programa de interfaz de Windows para HSSM
IMTA	Instituto Mexicano de Tecnología del Agua
LNAPL	Lighter-than-water Nonaqueous Phase Liquid Líquidos de fase no acuosa menos densos que el agua
NAPL	Nonaqueous Phase Liquid Líquidos de fase no acuosa
NRMRL	National Risk Management Research Laboratory Laboratorio Nacional de Investigación para el Manejo de Riesgos
OILENS	HSSM Module for NAPL lens motion and chemical dissolution into the aquifer Módulo HSSM para el movimiento de la lente NAPL y la disolución química al acuífero
PRE-HSSM	DOS preprocessor for HSSM Preprocesador de DOS para HSSM
RSKERL	Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory Laboratorio de Investigación Ambiental Robert S. Kerr
SPRD	Subsurface Protection and Remediation Division División de Protección del Subsuelo y de Remediación
TSGPLUME	Transient Source Gaussian Plume model (aquifer module of HSSM) Estela de Fuente Transitoria Tipo Gaussiana (módulo del acuífero de HSSM)
USEPA	United States Environmental Protection Agency Agencia de Protección del Ambiente de los E. U. A.

Agradecimientos

Español

Los autores desean agradecer a Susan Roberts-Shultz el desarrollo original del código de OILENS; a Mike Johnson el desarrollo original del código de TSGPLUME; a Donald Collings el desarrollo del pre-procesador para DOS; a Mark Lee el desarrollo de los programas REBUILD y de los menús de DOS; a Julia Mead y Sarah Hendrickson las pruebas repetitivas de los conjuntos de datos de HSSM; al Dr. Jeffrey A. Johnson, Dr. Varadhan Ravi y Rick Bowers las pruebas extensas de beta y a los usuarios de HSSM que han informado sobre la necesidad de correcciones y ampliaciones para la primera versión. El primer autor desea expresar su gran agradecimiento a Julia Mead y Sarah Hendrickson la ayuda en la preparación de la documentación, tanto en inglés como en la versión del idioma español del modelo.

El traductor desea expresar su agradecimiento a la señorita Maura Ocampo García por los trabajos de mecanografía y formación inicial del texto en español.

English

The authors express their appreciation to Susan Roberts-Shultz for the original development of the OILENS code; to Mike Johnson for the original development of the TSGPLUME code; to Donald Collings for developing the DOS preprocessor; to Mark Lee for developing the REBUILD and DOS menu programs; to Julia Mead and Sarah Hendrickson for repeated testing of HSSM data sets; to Dr. Jeffrey A. Johnson, Dr. Varadhan Ravi and Rick Bowers for extensive beta testing; and to the users of HSSM who have reported needs for corrections and extensions to the first version. The first author expresses his deep appreciation to Julia Mead and Sarah Hendrickson for assistance in preparing the documentation for both the English and Spanish Language versions of the model.

The translator expresses his appreciation to Miss Maura Ocampo García for her assistance in preparing the manuscript and the initial formatting of the text in Spanish.

Capítulo 1

Introducción

Cuando fluidos que son inmiscibles en el agua (los llamados líquidos de fase no acuosa o NAPL)* se introducen al subsuelo, estos permanecen como fluidos distintos, fluyendo en forma separada de la fase acuosa. Los fluidos menos densos que el agua (LNAPL)† migran hacia abajo a través de la zona vadosa, pero al alcanzar el nivel freático, tienden a formar lentes encima del acuífero. Generalmente, los fluidos están compuestos de mezclas complejas de compuestos químicos individuales, de manera que resulta una contaminación del acuífero por la disolución de varios constituyentes del LNAPL. Este documento describe un modelo de evaluación denominado Modelo para Evaluación de Derrames de Hidrocarburos (HSSM)‡ para estimar los impactos de este tipo de contaminante en los acuíferos freáticos. El modelo se basa en un tratamiento aproximado del flujo a través de la zona vadosa, el esparcido de un LNAPL a lo largo del nivel freático, y el transporte miscible de un solo compuesto químico del LNAPL a través de un acuífero freático hacia varios puntos receptores. Las áreas potenciales para el uso del modelo HSSM son la respuesta en casos de emergencia, las fases iniciales de investigación de un sitio, la localización de sitios para instalaciones, y programas para tanques de almacenamiento subterráneo.

La guía del usuario esta organizada en secciones que describen las suposiciones en las que se basa el modelo, los datos de entrada requeridos y la mecánica de la corrida del modelo. Se proporcionan interfaces separadas de MS-DOS y MS-Windows para el modelo. Cada interfaz tiene la capacidad para cargar y editar los conjuntos de datos de entrada, correr el modelo y presentar las gráficas de los resultados. Las ventajas y desventajas de cada interfaz se describen brevemente con objeto de ayudar al usuario en la selección de la interfaz apropiada para la configuración de su software y equipo. A continuación de la descripción de las interfaces, se presentan varios problemas ejemplo que ilustran los pasos necesarios para implantar y correr el modelo.

1.1 Significado del Nombre Modelo HSSM

Cada palabra en el nombre del modelo se usa más adelante como punto de partida para una discusión de algunos temas relacionados con el uso del modelo. La información específica sobre los valores de los parámetros del modelo y las instrucciones para el uso del modelo se dan en capítulos posteriores.

1.1.1 Hidrocarburo

En el modelo HSSM, se supone que el LNAPL (o *hidrocarburo*) esta formado por dos componentes. El primer componente es el LNAPL mismo, que es un líquido que esta separado y no se mezcla con el agua subterránea. El modelo contiene un conjunto de ecuaciones para seguir la trayectoria del movimiento de la fase LNAPL. Varios de los resultados y las gráficas producidas por el modelo ilustran la distribución de la fase LNAPL. La segunda componente se menciona como un *constituyente químico* del LNAPL, ya que los LNAPL típicos están formados de muchos compuestos químicos individuales. El modelo HSSM traza la trayectoria de transporte de uno de estos compuestos químicos. Ya que el compuesto químico puede disolverse en el agua del subsuelo, puede ser transportado por el agua subterránea y contaminar puntos receptores en el sentido del gradiente. Por ejemplo, el modelo HSSM puede usarse para simular un derrame de gasolina. El benceno podría ser el compuesto químico

*En Inglés: Non aqueous Phase Liquid, NAPL

†En Inglés: Light Non aqueous Phase Liquid, LNAPL

‡En Inglés: Hydrocarbon Spill Screening Model, HSSM

de interés. Todo el resto de los compuestos químicos que forman la gasolina se tratarían como parte del LNAPL. Cuando se requiera determinar el impacto de otro constituyente de la gasolina, digamos el tolueno, el compuesto químico sería el tolueno. De esta manera, el modelo HSSM podría correrse para varios de los compuestos químicos importantes del LNAPL. El usuario del modelo podría desarrollar un sentir para el comportamiento de los diferentes compuestos químicos comparando los resultados.

El modelo HSSM está diseñado para los LNAPL. No es apropiado para los NAPL más densos que el agua (DNAPL)[§], ya que se supone que el NAPL "flota" sobre el nivel del agua. Sin embargo, se podría usar el módulo para la zona vadosa del modelo HSSM (Inciso 2.1) para un DNAPL, en vista de que el comportamiento cualitativo de ese módulo no es afectado por la densidad del fluido.

1.1.2 Derrame

Derrame se usa como un término genérico para un tiradero de LNAPL. El tiradero puede ser un derrame, una fuga u otro evento que permite que el LNAPL entre en el subsuelo. En el modelo HSSM deben conocerse algunos detalles del derrame, ya que se requieren como entrada del modelo. Estos detalles pueden incluir los tiempos del inicio y del final del derrame, el caudal de derrame del LNAPL o la profundidad de encharcamiento del LNAPL en la superficie.

1.1.3 Modelo de Evaluación

Los modelos de evaluación pueden incluir una variedad de procesos químicos e hidrológicos, pero generalmente no incluyen la heterogeneidad del subsuelo. La mayoría de los modelos de evaluación están en forma de soluciones analíticas de las ecuaciones que las gobiernan. Comúnmente deben hacerse simplificaciones con objeto de obtener estas soluciones analíticas. Como resultado, las implementaciones de modelos de evaluación en computadora usan únicamente cantidades relativamente pequeñas de tiempo de computadora. En general, los modelos de evaluación pueden usarse para estimar los impactos de contaminación, dadas sus suposiciones. El modelo HSSM es un modelo de evaluación; incluye una serie de fenómenos químicos e hidrológicos, supone homogeneidad en el subsuelo, se ejecuta rápidamente en computadoras personales PC y excluye algunos fenómenos. Por ejemplo, si se derrama la gasolina, se puede utilizar el modelo HSSM para dar una estimación tosca de las concentraciones de los compuestos de la gasolina en el agua. El modelo está únicamente destinado para dar resultados de orden de magnitud, en vista de que un número de los procesos potencialmente importantes se tratan en el modelo de una manera aproximada o se ignoran totalmente. También, no se esperaría calibrar el modelo ajustando las distribuciones espaciales de los parámetros, en vista de que la heterogeneidad no está incluida en el modelo.

Si se requiere la simulación de sitios heterogéneos complejos o si las otras aproximaciones hechas en el modelo HSSM son inaceptables, entonces se deberá usar un modelo más completo, tal como el código MOFAT desarrollado en el Virginia Polytechnic Institute (*Kuppussamy et al.*, 1987); el código SWANFLOW desarrollado por Geotrans, Inc. (*Faust*, 1985); el código MAGNUS desarrollado por Hydrogeologic, Inc. (*Huyakorn y Kool*, 1992); o el código VALOR desarrollado por el Electric Power Research Institute (*Abriola et al.*, 1992) en vez de, o además del modelo HSSM. Los usuarios potenciales del modelo HSSM deberían seguir con mucha atención la discusión siguiente de las suposiciones y limitaciones del modelo, de manera que puedan hacer una decisión informada sobre el uso del modelo.

1.2 Componentes del Modelo

La Figura 1.1 muestra un derrame típico de un contaminante LNAPL en la superficie del terreno. El LNAPL fluye hacia abajo a través de la zona vadosa debido a la gravedad y las fuerzas capilares. El LNAPL se desvía

[§]En Inglés: Dense Non aqueous Phase Liquid, DNAPL

de su trayectoria descendente debido a heterogeneidades geológicas que encuentra en su camino hacia el nivel freático. El agua de lluvia que se infiltra puede empujar el LNAPL hacia abajo en forma más rápida que como si se movería por sí mismo. Una vez en la vecindad del nivel freático, el LNAPL flota en la franja capilar, ya que es una fase no humectante que es menos densa que el agua. La fluctuación del nivel freático puede crear una zona de mancha que contiene LNAPL atrapado por causas naturales o por pozos. El contacto con el agua subterránea o el agua de recarga que se infiltra ocasiona la disolución de los compuestos químicos del LNAPL, resultando en la contaminación del acuífero. Los compuestos pueden lixiviarse a velocidades diferentes debido a sus propiedades diversas. Dependiendo de su volatilidad, los compuestos también pueden separarse hacia el aire de la zona vadosa.

Una vez dentro del acuífero, un mezclado limitado deja los compuestos en una banda relativamente angosta cerca de la cima del acuífero. Estos compuestos son transportados por advección y dispersión a través del acuífero. El acuífero así como la zona vadosa son heterogéneos y el flujo puede seguir trayectorias preferenciales.

El modelo HSSM se basa en una conceptualización simplificada de un derrame de LNAPL. La Figura 1.2 muestra la geometría supuesta para el modelo HSSM, que es una versión simplificada del escenario descrito en la Figura 1.1. Dentro de el modelo HSSM, el LNAPL sigue una trayectoria unidimensional desde la superficie hasta el nivel freático. Las propiedades del subsuelo se consideran como uniformes. El LNAPL esta formado por dos componentes: uno es la fase LNAPL y la otra es el compuesto químico de interés. En el nivel freático el LNAPL se esparce radialmente, lo que implica que el gradiente regional no tiene ningún efecto sobre el flujo del LNAPL. La disolución del compuesto químico obedece a la partición por equilibrio local, pero es movida por el flujo del agua subterránea y el agua de recarga que alcanza el nivel freático. El compuesto químico es transportado por advección y dispersión a puntos múltiples de recepción en el acuífero uniforme. Los detalles adicionales sobre estas suposiciones se dan más adelante.

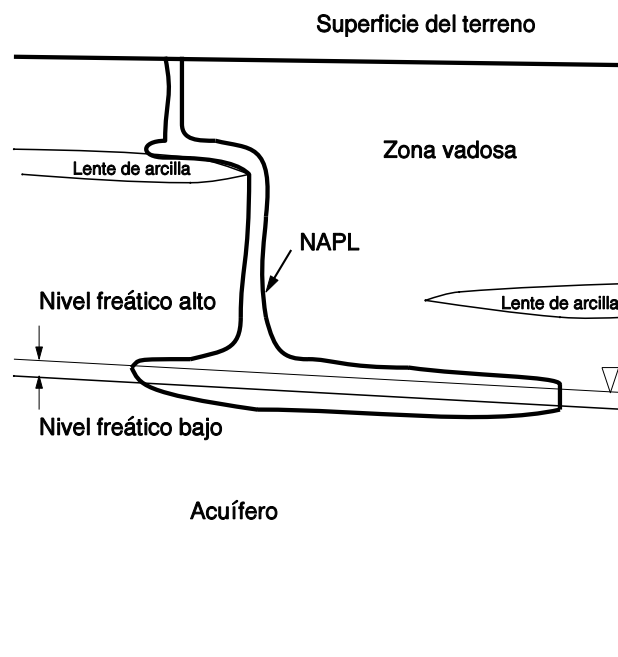


Figura 1.1: Vista esquemática del derrame de NAPL.

El modelo se compone de tres módulos con base en la conceptualización simplificada presentada arriba. Todos los módulos están en forma de soluciones semi-analíticas de las ecuaciones gobernantes, de manera que los módulos del modelo HSSM no usan discretización en la región de flujo ni técnicas iterativas de solución. Estas aproximaciones están diseñadas para ejecutarse rápidamente. En los párrafos siguientes se discute la base concep-

tual de los módulos. Los detalles matemáticos de los módulos se encuentran en *The Hydrocarbon Spill Screening Model (HSSM) Volume 2: Theoretical Background and Source Codes* (Charbeneau et al., 1995).[¶]

Con este modelo se tiene la intención de tratar el problema de flujo y transporte de LNAPL desde la superficie del terreno hasta un acuífero freático. En vista de que el interés principal está en la calidad del agua, un énfasis del modelo está en la determinación del tamaño del lente de NAPL y en el flujo de masa de los contaminantes hacia el acuífero. Estas cantidades definen la condición de la fuente para la contaminación del acuífero y deben estar basadas en fenómenos de flujo de fase múltiple en la zona vadosa. Los primeros dos módulos del modelo HSSM están orientados al flujo y transporte en la zona vadosa del LNAPL. Estos dos son los módulos Transporte Cinemático de Contaminantes Aceitosos (KOPT) y OILENS. El KOPT y el OILENS se combinan en un solo código de computadora, HSSM-KO, que proporciona una condición de fuente variable en el tiempo para el modelo del acuífero.

Un compuesto químico disuelto en ambos, la fase LNAPL y la del agua, es seguido por KOPT y OILENS. Una vez que este compuesto químico alcanza el nivel freático, contamina al acuífero por el contacto con el agua de recarga y por la disolución desde la lente de LNAPL. De esta manera, la tercera parte del modelo es el transporte a través del acuífero de un compuesto químico del LNAPL. Es notable que el flujo de masa desde OILENS es variable con el tiempo, de manera que el modelo del acuífero debe ser capaz de simular una condición de fuente variable en el tiempo. De acuerdo con el nivel de aproximación empleado en KOPT y OILENS, una selección conveniente es el modelo de Estela de Fuente Transitoria Gaussiana (TSGPLUME), que usa una solución analítica de la ecuación de advección-dispersión. El código TSGPLUME emplea técnicas numéricas diferentes que KOPT y OILENS; por lo tanto, no está incorporado dentro de HSSM-KO, sino más bien se implementa en el código de computadora HSSM-T. El modelo TSGPLUME toma el flujo de masa de disolución desde el módulo OILENS de HSSM-KO y calcula las concentraciones esperadas en una serie de puntos receptores aguas abajo.

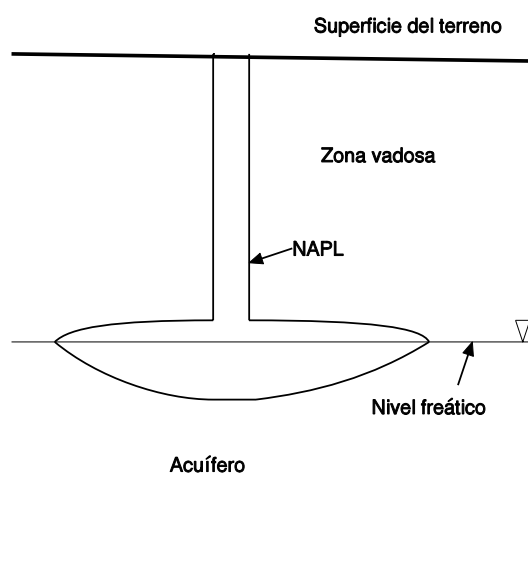


Figura 1.2: Vista esquemática de un derrame idealizado de NAPL empleado en el modelo HSSM.

La Tabla 1.1 resume los módulos que componen el modelo HSSM. Nótese que los nombres KOPT, OILENS y TSGPLUME se refieren a los modelos matemáticos, mientras que HSSM-KO y HSSM-T se refieren a las implementaciones en computadora de los modelos.

[¶]Título en español: *Modelo para Evaluación de Derrames de Hidrocarburos (HSSM) Volumen 2: Bases Teóricas y Códigos Fuente. En el Apéndice D se da una presentación concisa del contenido matemático de este documento.*

Región del Subsuelo	Modelo Matemático	Código de Computadora
Zona vadosa	KOPT	HSSM-KO
Nivel freático	OILENS	HSSM-KO
Acuífero	TSGPLUME	HSSM-T

Tabla 1.1: Implementación de los módulos HSSM.

La porción del subsuelo cubierta por cada módulo del modelo HSSM se muestra en la Figura 1.3. En el escenario del modelo se introduce la contaminación como un LNAPL que fluye desde cerca de la superficie hacia el nivel freático. Esta porción del evento de contaminación es modelado por KOPT y OILENS, como se indica en la Figura 1.3. A través del contacto con la recarga que se infiltra y el agua subterránea, los compuestos químicos del NAPL se disuelven y contaminan el acuífero. Se simula el transporte de un compuesto químico del NAPL por medio del modelo TSGPLUME.

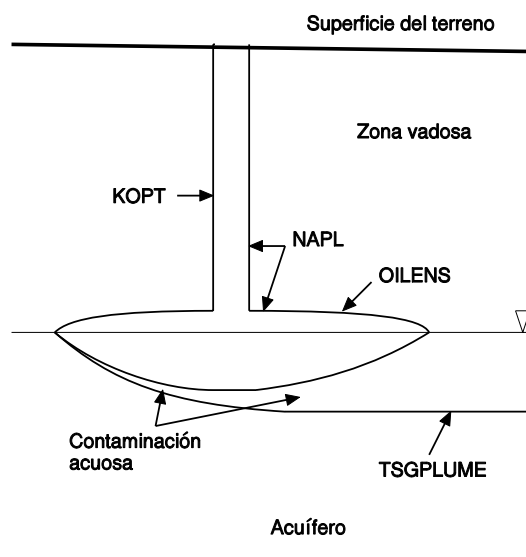


Figura 1.3: Esquema del modelo HSSM que muestra el empleo de cada módulo.

1.3 Obtención de una Copia del Modelo HSSM

EL modelo HSSM esta disponible en el Center for Subsurface Modelling Support (CSMoS) en el Subsurface Protection and Remediation Division, National Risk Management Research Laboratory. El Centro CSMoS distribuye en forma gratuita el software y la documentación, ya sea a través del ftp anónimo, de la home page de Internet de Kerr Lab, o un programa de intercambio de disquetes. El CSMoS también proporciona apoyo técnico para el software que distribuye. A continuación se dan los métodos actuales para la obtención del modelo HSSM. En vista de que las direcciones de computadora y los sistemas de distribución cambian con el tiempo, deberán ponerse en

contacto con el centro CSMoS, si se requiere información actualizada.

Para obtener el modelo HSSM a través de Internet Abra la dirección URL:

<http://www.epa.gov/ada/kerrlab.html>

y proceda al "Center for Subsurface Modeling Support CSMoS"^{||}. De ahí siga la conexión a Ground Water and Vadose Zone Models/Manuals. Existe una conexión hacia el modelo HSSM listada en esta página junto con "Installation Instructions for all CSMoS Software"^{**}, el cual debería bajarse. Los discos de instalación virtual, documentación en formato Adobe Acrobat (PDF), y archivos de datos ejemplo pueden bajarse de esta página (<http://www.epa.gov/ada/hssm.html>). El lector de Adobe Acrobat (PDF) puede obtenerse sin cargo de Adobe en la página Adobe en <http://www.adobe.com/acrobat/>.

Para obtener el modelo HSSM a través del ftp anónimo Use ftp para acceder a

`ftp.epa.gov`

El login es "anonymous" (anónimo) y cambie el directorio tecleando:

```
cd /pub/gopher/ada/models
```

El contenido del directorio puede revisarse tecleando

```
dir
```

Al teclear `dir hssm*.*` se despliegan los nombres de los archivos relacionados con el modelo HSSM. Todos los archivos del modelo HSSM pueden bajarse marcando

```
binary  
mget hssm*.*
```

Los archivos consisten de archivos *.zip comprimidos y archivos *.pdf de Adobe Acrobat. Las utilerías para descomprimir ("unzip") pueden encontrarse en ftp.pkware.com

El login es "anonymous" (anónimo) y cambie el directorio tecleando:

```
cd /pub/pkware
```

Los archivos de las utilerías para descomprimir ("pkunzip") pueden bajarse marcando

```
binary  
get pkz204g.exe  
o  
get pkZWS201.exe
```

El lector de pdf de Adobe Acrobat (Adobe Acrobat reader) puede encontrarse en la dirección de ftp. siguiente ftp.adobe.com

^{||}Centro para Apoyo de Modelado del Subsuelo

^{**}Instrucciones de Instalación para todo el software del centro CSMoS

El login es "anonymous" (anónimo) y cambie el directorio tecleando:

```
cd /pub/adobe/acrobatreader/win/2.x
```

El contenido del directorio puede revisarse tecleando

```
dir
```

Los archivos del lector de pdf pueden bajarse marcando

```
binary  
mget acrospan.*
```

Para obtener el modelo HSSM a través de un intercambio de disquetes, envíe una carta de solicitud junto con un disquete de 3.5 pulgadas de alta densidad a la dirección siguiente:

Center for Subsurface Modeling Support
Subsurface Protection and Remediation Division
National Risk Management Research Laboratory
United States Environmental Protection Agency
P.O. Box 1198
Ada, Oklahoma 74820
TEL: 405-436-8586
FAX: 405-436-8529

Por favor indique si requiere la versión para DOS o para Windows. Si requiere ambas interfaces, adjunte dos disquetes formateados.

El paquete completo del modelo HSSM consiste del documento

Modelo de Evaluación de Derrames de Hidrocarburos (HSSM) Guía del Usuario

y dos disquetes de alta densidad de 3.5". Los disquetes contienen:

Para Windows:

el disquete HSSM-1-w, la Interfaz para Windows del modelo HSSM-WIN

Para DOS:

el disquete HSSM-1-d, la Interfaz para DOS del modelo HSSM-DOS

La documentación del modelo HSSM y la del usuario son del dominio público. Cualquier persona puede copiarla o distribuirla.

La documentación en idioma inglés incluye también un segundo volumen de la guía del usuario, denominado *The Hydrocarbon Spill Screening Model (HSSM) Volume 2: Theoretical Background and Source Codes*, EPA/600/R-94/039b, que describe las bases teóricas del modelo y contiene los códigos fuente en FORTRAN para el modelo. Para los usuarios del modelo de la versión en idioma español se da en el Apéndice D un resumen de la teoría, en la que se basa el modelo HSSM.

Capítulo 2

Suposiciones en las Que se Basa el Modelo HSSM

En los párrafos siguientes se discute la base conceptual de KOPT, OILENS y TSGPLUME. Esta discusión tiene por objeto dar una comprensión clara de las suposiciones y limitaciones de cada módulo del modelo HSSM. Para mayor información, se presenta una revisión concisa del desarrollo matemático del modelo en el Apéndice D.

2.1 Módulo Transporte Cinemático del Contaminante Aceitoso (KOPT)

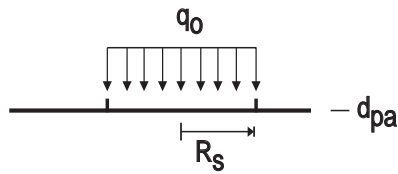
El modelo del Transporte Cinemático del Contaminante Aceitoso (KOPT)* simula el flujo de la fase LNAPL y el transporte de un compuesto químico del LNAPL desde la superficie hasta el nivel freático. Se supone que el LNAPL se libera en o debajo de la superficie del terreno en cantidad suficiente para formar una fase fluida distinta del agua. Como resultado, la cantidad de LNAPL liberada es mucho mayor que aquella que produciría únicamente contaminación disuelta en la fase acuosa. Se idealiza el sistema de flujo como consistente de una región fuente circular que sobreyace a un acuífero freático a una profundidad especificada. Aunque el flujo real en la zona vadosa es tri-dimensional, el modelo KOPT trata el flujo y transporte a través de la zona vadosa como uni-dimensional. Se desprecia el esparcido lateral de contaminantes por fuerzas capilares, así como el esparcido debido a la heterogeneidad, ya que se supone que el suelo es de composición uniforme. Para situaciones donde el LNAPL se libera sobre un área relativamente grande, el flujo real es aproximadamente uni-dimensional en el centro. Para fuentes contaminantes que son de extensión superficial pequeña, el transporte lateral de contaminantes puede ser importante. Sin embargo, al tratar el flujo como uni-dimensional, el modelado es conservador, ya que se supone que todo el contaminante se mueve hacia abajo y contribuye a la contaminación del acuífero. En la realidad, algo puede quedarse atrás debido a un atrapado por la estratificación o esparcido lateral.

El derrame de la fase LNAPL puede simularse de tres maneras (Figura 2.1):

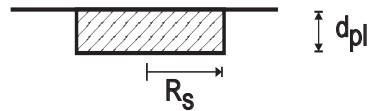
1. La liberación de un LNAPL puede ocurrir a un caudal conocido para una duración especificada. Esta situación ocurriría si se libera un volumen conocido de LNAPL durante un cierto período de tiempo. El volumen del LNAPL dividido entre la duración y el área de liberación determina la velocidad de liberación, q_o . Si el flujo del LNAPL excede la conductividad máxima efectiva del LNAPL, K_{eo} , parte del LNAPL escurrirá sobre la superficie.
2. Puede colocarse un volumen conocido de LNAPL en un intervalo especificado a una profundidad especificada, d_{pi} . Cuando se inicia la simulación, el LNAPL puede comenzar a fluir fuera de la zona especificada, si se excede la capacidad de retención del suelo para el LNAPL.
3. La última opción es la especificación de una profundidad constante de encharcamiento con LNAPL para una cierta duración. Este caso representa un tanque con una fuga lenta o un tanque con fugas dentro de un terraplén. En cualesquiera de estas situaciones, se estima o se conoce la profundidad de encharcamiento del LNAPL. Se tienen dos opciones para esta condición de frontera. En la primera, el encharcamiento pasa abruptamente a cero al final del período de encharcamiento. En la segunda, la profundidad de encharcamiento disminuye gradualmente al final del período de encharcamiento.

Se supone que el flujo de la fase LNAPL ocurre dentro del suelo que contiene una cantidad uniforme de agua. En el modelo KOPT, la cantidad de cada fluido se expresa como saturación, S , que se define como la fracción

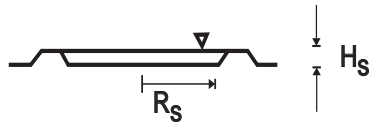
*En Inglés: Kinematic Qily Pollutant Transport, KOPT



1. Representación de una Fuente de Flujo



2. Representación de una Fuente de Volumen



3. Representación de una Fuente de Carga Constante

Figura 2.1: Opciones de derrames en el modelo HSSM.

del espacio poroso llenada por un fluido determinado. La saturación de agua corresponde al valor promedio de la velocidad de recarga anual o una saturación especificada de agua. Al usar ese enfoque, se desprecian los efectos temporales del clima. La justificación de este enfoque viene del hecho que en suelos uniformes el perfil de humedad de suelo muestra poca variación excepto cerca de la superficie (Charbeneau y Akgian, 1991). Se requieren muchos datos para simular los eventos de precipitación en el tiempo para desarrollar un perfil de humedad del suelo no-uniforme y variable en el tiempo. El nivel de esfuerzo involucrado no está acorde con el propósito del modelo como una metodología de evaluación. Weaver (1991) presentó los resultados de un modelo que ilustra los efectos de precipitaciones sobre los LNAPL en el sitio. Este trabajo mostró que al simular combustibles tales como gasolina, frecuentemente el LNAPL alcanza el nivel freático rápidamente. De esta manera la simulación de sucesiones largas de precipitaciones puede ser de poca utilidad, si el objetivo de la modelación es la estimación del tiempo de llegada de la gasolina al nivel freático.

De acuerdo con la práctica común de la ciencia del suelo (Richards, 1933), el efecto del flujo de aire en el transporte de la fase LNAPL se desprecia en el modelo KOPT. La presencia de las fases de agua y aire se incorpora por el uso de un modelo no-histerético, de tres fases, de permeabilidad relativa. Este modelo es una aproximación razonable de los fenómenos de escala de poro que ocurren en un flujo de tres fases, pero la naturaleza real de estas relaciones es una causa importante de incertidumbre en este y la mayoría de los otros modelos de flujo de fase múltiple. El modelo usa propiedades medidas del suelo (parámetros de la curva de presión capilar) para aproximar la permeabilidad relativa. El modelo no incluye el transporte en fracturas o macroporos.

Se logra una eficiencia al correr el modelo en primer lugar al despreciar los efectos del gradiente capilar en la mayoría de los aspectos de flujo. Esto ocasiona que las ecuaciones gobernantes lleguen a ser ecuaciones hiperbólicas, que pueden ser resueltas por el método generalizado de características (Charbeneau et al., 1995). Un efecto importante de esta suposición sobre los resultados de la simulación es, que se idealiza el borde frontal del LNAPL que se mueve en el suelo como un frente abrupto (Figura 2.2). Algunos experimentos de laboratorio

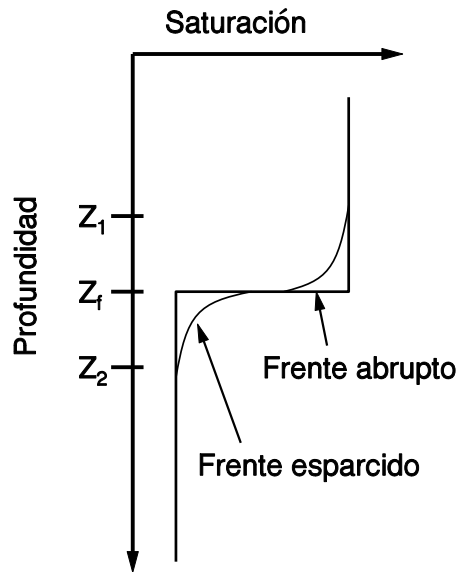


Figura 2.2: Comparación entre frentes abruptos y esparcidos.

en paquetes uniformes de arena *Reible et al.* (1990) muestran perfiles del NAPL en el suelo que tienen fronteras casi totalmente abruptas. Se han encontrado resultados similares en los experimentos de visualización de flujo conducidos en arenas casi uniformes en el Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory (RSKERL) reportados por *Weaver et al.* (1994). La Figura 2.3 muestra un resultado experimental para un derrame de gasolina hacia una arena uniforme. Se utilizaron valores de parámetro medidos de manera independiente para simular el experimento. Queda claro que el KOPT es capaz de simular los principales aspectos cualitativos del flujo, porque la forma del frente simulado del NAPL se ajusta a los datos experimentales. Se obtuvo una coincidencia cuantitativa ajustando valores de los parámetros dentro de sus rangos medidos. En el Volumen 2 de la documentación del modelo HSSM se presentan detalles de un experimento similar (*Charbeneau et al.*, 1995).

Ya que el gradiente capilar tiene un impacto dramático sobre la capacidad de infiltración del suelo, se usa el modelo aproximado Green-Ampt (*Green y Ampt*, 1911) para estimar la capacidad de infiltración durante la aplicación de la fase LNAPL. Esto da una estimación mejorada del flujo en el suelo, bajo una condición de flujo o de encharcamiento de carga constante en la superficie.

En los modelos KOPT y OILENS, el LNAPL se trata como una mezcla de dos componentes. Se supone que el LNAPL en sí es soluble en el agua y sorbente. Debido a los efectos del agua de recarga y del contacto con el agua subterránea, el LNAPL puede disolverse. Esto puede ser significativo para fases altamente solubles del LNAPL. Sin embargo, se supone que las propiedades de transporte del LNAPL (densidad, viscosidad, presión capilar, permeabilidad relativa) no varían. El segundo componente es el compuesto químico que puede partirse entre la fase de LNAPL, la fase acuosa y el suelo. Este compuesto del LNAPL se considera como el contaminante primario de interés. Las concentraciones de este compuesto se informan en la salida del modelo y se grafican por

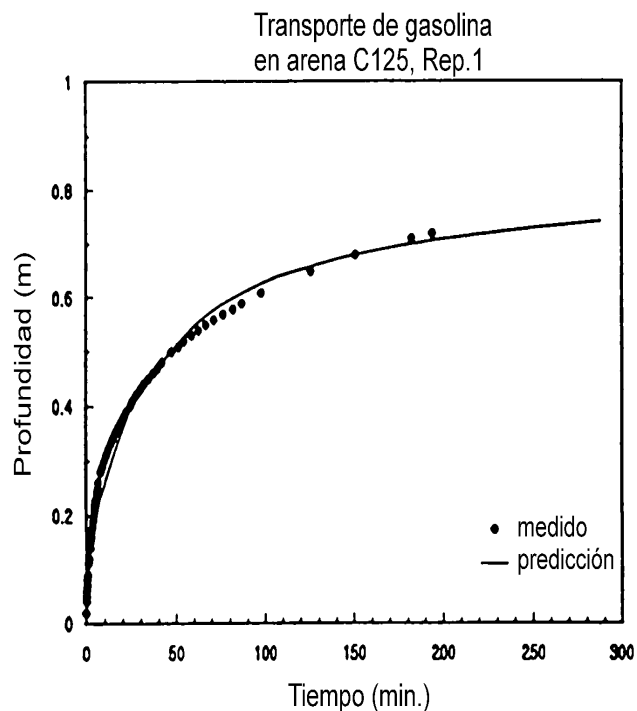


Figura 2.3: Comparación entre datos experimentales y el modelo KOPT.

medio de los post-procesadores.

Se usa un enfoque cinemático en KOPT para el transporte del compuesto químico, que resulta en un modelo que desprecia la dispersión. Se supone que el movimiento químico es causado exclusivamente por advección del agua y el LNAPL. Los contaminantes hidrofóbicos que residen en primer lugar en la fase LNAPL se transportarán principalmente con el LNAPL. Se supone que el compuesto químico, que es el segundo componente de la fase LNAPL, discutido arriba, se parte entre el LNAPL, el agua y el suelo, de acuerdo con relaciones lineales de partición de equilibrio. El flujo de masa constituyente en el acuífero proviene del agua de recarga que se contamina por el contacto con la lente y de la disolución que ocurre como flujo de agua subterránea debajo de la lente. La concentración del compuesto químico en el acuífero está limitada por su solubilidad efectiva de mezclado, que es menor que la solubilidad de la fase pura en el agua.

2.2 Módulo OILENS

Si se suelta un volumen suficientemente grande de hidrocarburos, entonces el LNAPL alcanza el nivel freático. Típicamente, esto ocurre en un tiempo relativamente corto para los LNAPL, como gasolina, que tienen viscosidades bajas. El módulo OILENS simula el esparcido radial de la fase del LNAPL en el nivel freático y la disolución del compuesto químico. Si se dispone de suficiente carga, se desplaza el nivel freático hacia abajo; se inicia el esparcido lateral; y la porción de OILENS del modelo arranca. El módulo OILENS se basa en tres aproximaciones importantes. Primero, el esparcido del LNAPL es puramente radial, lo que implica que la inclinación del nivel freático regional es pequeña, suficiente para ser insignificante para el movimiento de la lente. En segundo lugar, el espesor se determina únicamente por la flotación (relaciones de Ghyben-Herzberg). En tercer lugar, la forma de la lente está dada por las suposiciones de Dupuit, donde se supone que el flujo es horizontal y que el gradiente

se aproxima a la variación de la carga dividida entre la distancia horizontal. Estas tres suposiciones conducen a una formulación eficiente del modelo, lo que se refleja en sus requerimientos computacionales bajos.

Ambos, el espesor de la lente en la formación y el radio de la lente aumentan durante la fase inicial de esparcido (Figura 1.2). La altura de la lente depende de la densidad y viscosidad de la fase LNAPL, las características del derrame y la conductividad hidráulica saturada del sistema. Por ejemplo, en un medio poroso determinado, el combustible diesel tendería a formar lentes más altas que la gasolina por su viscosidad más elevada. Al principio las lentes crecerán en altura porque el LNAPL entra en la lente a una velocidad mas alta que como se mueve radialmente. Luego, después de que declina la velocidad de la fuente, la lente se adelgaza mientras continúa esparciéndose lateralmente. El hidrocarburo residual se deja tanto arriba como debajo de la lente que se esparce en forma activa durante este período (Figura 2.4). El espesor calculado por OILENS es un espesor promediado del LNAPL en la formación (Apéndice C.3, *Schwille* (1967)) y no necesariamente esta directamente relacionado con los espesores observados en los pozos de observación (*Kemblowski y Chiang*, 1990).

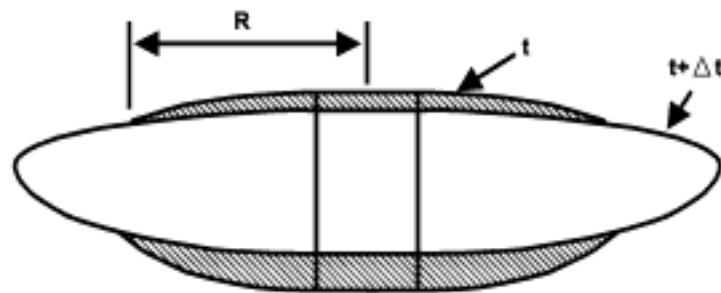


Figura 2.4: Configuración de la lente durante la fase de adelgazamiento.

2.3 Módulo de Estela de Fuente Transitoria Tipo Gaussiana (TSGPLUME)

El transporte en el acuífero del compuesto químico se simula por el Modelo de Estela de Fuente Transitoria Tipo Gaussiana (TSGPLUME)[†] que usa una solución analítica bidimensional promediada verticalmente de la ecuación de advección-dispersión. Dos consideraciones importantes son la condición de frontera para el acuífero y las suposiciones usadas al aplicar el modelo planar bidimensional.

Las condiciones de frontera se sitúan en el borde en el sentido hacia aguas abajo del gradiente de la lente y toman la forma de una distribución de concentración tipo gaussiana con el pico directamente en el sentido hacia aguas abajo del centro de la lente (Figura 2.5). La concentración pico de la distribución gaussiana se ajusta a través del tiempo de manera que el flujo de masa simulado desde la lente se iguala con el que entra al acuífero. El ancho de la distribución gaussiana permanece constante y se considera de manera que cuatro desviaciones estándar son igual al diámetro representativo de la lente. Aunque el tamaño de la lente varía con el tiempo, se usa un diámetro constante en el modelo TSGPLUME para la condición de fuente del acuífero. Una elección razonable para el diámetro de la lente es el diámetro que ocurre cuando el flujo de masa dentro del acuífero es máximo. Esta elección asegura que el flujo de masa pico hacia el acuífero ocurra a través de una lente de tamaño apropiado.

Aunque el modelo del acuífero sea bidimensional en el plano horizontal, no es necesario ni se supone de antemano el mezclado completo del compuesto químico en el espesor del acuífero. El mezclado vertical se representa por la profundidad de penetración de la estela en el acuífero y se calcula a partir de la cantidad de dispersión vertical debajo de la lente más el flujo advectivo debido a la infiltración a través de la lente, siguiendo el enfoque de *Huyakorn et al.* (1982). Si la profundidad de penetración calculada excede el espesor acuífero, entonces la

[†]En Inglés: Transient Source Gaussian PLUME, TSGPLUME

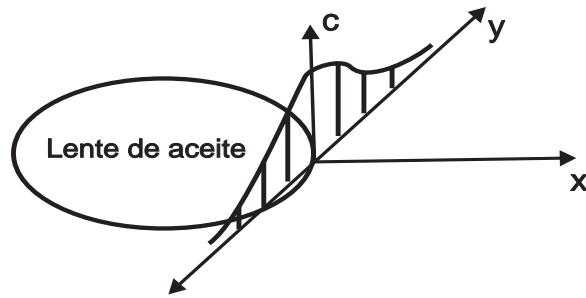


Figura 2.5: Configuración de la fuente tipo gaussiana usada en TSGPLUME.

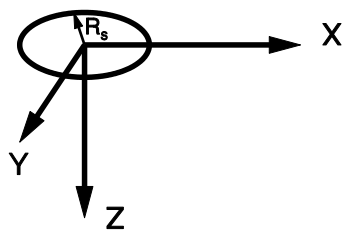
estela penetra totalmente en el acuífero; y el modelo permite la dilución de la estela por recarga difusa. Si la profundidad de penetración es menor que el espesor acuífero, entonces el espesor de la estela se toma como la profundidad de penetración. En este último caso, la recarga simplemente empuja la estela a mayor profundidad y el espesor de penetración permanece constante.

La Figura 2.6 muestra los sistemas de coordenadas para los tres módulos del modelo HSSM. Para los módulos KOPT y OILENS, se supone que la fuente de contaminación es un círculo de radio, R_s , ubicado en la superficie del terreno. El origen de coordenadas se ubica en el centro de la fuente. X es la dirección hacia aguas abajo, y Y es la dirección horizontal transversal. El eje Z indica hacia abajo de manera que la profundidad es igual al valor de la coordenada Z. En el módulo TSGPLUME, se supone que la fuente de contaminación es un círculo de radio R_T , ubicado sobre el nivel freático. El tamaño de la fuente se toma como un radio calculado en el módulo OILENS. El origen de coordenadas (X_T, Y_T) se supone que se localiza en el extremo de aguas abajo de la fuente de contaminación. La implementación en el modelo HSSM-T de TSGPLUME ajusta las coordenadas de X usadas por el modelo HSSM-KO a los valores X_T requeridos por TSGPLUME ($X_T = X - R_T$). Las coordenadas escritas en los archivos de salida y de graficado son las usadas por KOPT y OILENS (X,Y,Z).

En el módulo TSGPLUME, se supone que el flujo de agua es uni-dimensional, de manera que la advección del contaminante se simula únicamente en dirección longitudinal (X_T) del terreno. Sin embargo, el compuesto puede ser transportado por dispersión en ambas direcciones longitudinal (X_T) y transversal (Y_T). Como en muchas soluciones analíticas, se supone que el acuífero es uniforme. El flujo de masa en el acuífero varía con el tiempo, y la historia de la concentración en el punto receptor se determina por integración de la solución de entrada constante y la distribución del flujo de masa variable en el acuífero.

Los resultados del módulo TSGPLUME son historias de concentración en puntos de recepción especificados por el usuario. En estos puntos, el modelo calcula la concentración del contaminante en la fase acuosa empezando en el tiempo en el cual la concentración se eleva por primera vez arriba del valor límite (tiempo A en la Figura 2.7). Este tiempo se determina mediante un algoritmo de búsqueda que usa la solución analítica para determinar el tiempo más próximo en el que la concentración este arriba del umbral. Típicamente, el valor de umbral se fija en $1 \mu g/l$ por parte del usuario del modelo. El cálculo de la concentración en el punto de recepción continúa en intervalos de Δt , como lo fije el usuario. El intervalo de tiempo se acorta en el tiempo B a un valor pequeño a fin de registrar la concentración pico. En caso necesario, se acorta el intervalo más aun a fin de asegurarse que se encuentre el pico. Una vez que la concentración sea reducida abajo del pico (tiempo C), se incrementa gradualmente el intervalo de tiempo para volver a ser igual al de Δt original. El cálculo continúa hasta que la concentración descienda abajo del umbral (tiempo D).

Condición de la Fuente de KOPT y OILENS en el Punto de Derrame



Condición de la Fuente de TSGPLUME en el Nivel Freático

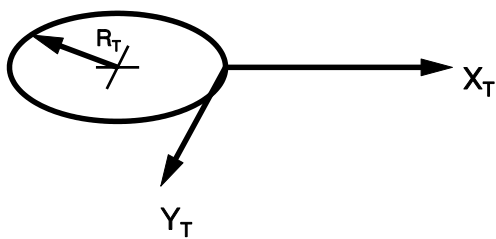


Figura 2.6: Sistemas de coordenadas para los módulos KOPT, OILENS y TSGPLUME del modelo HSSM

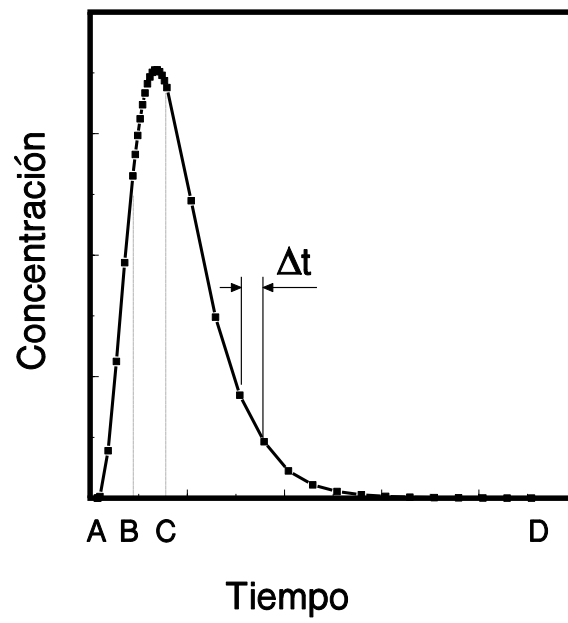


Figura 2.7: Representación esquemática de la evolución de la concentración según el módulo TSGPLUME.

Capítulo 3

Opciones de Interfaz

Se proporcionan dos interfaces para ayudar al usuario correr el modelo HSSM. La primera interfaz fue desarrollada para el sistema de operación Windows de Microsoft. Esta interfaz consiste del programa de interfaz de Windows, HSSM-WIN, y los dos programas de simulación: HSSM-KO y HSSM-T. El modelo HSSM-WIN se usa para crear y editar los conjuntos de datos de entrada, ejecutar los modelos HSSM-KO y HSSM-T y graficar los resultados del modelo. La interfaz de Windows se describe en el Capítulo 4, denominada "Interfaz MS-Windows, HSSM-WIN."

- DOS
 - Ventajas
 - * Se logra el desarrollo mas rápido de los cálculos del modelo (para cualquier computadora dada) en la interfaz de DOS.
 - * La interfaz DOS puede correr en una maquina con capacidad limitada de procesamiento y una memoria RAM limitada. El código funcionará por lo tanto en forma lenta en una máquina 286 con 640 kiloBytes de RAM.
 - Desventajas
 - * El preprocesador es interactivo pero no es gráfico.
- Windows
 - Ventajas
 - * Un solo programa de entorno ejecuta todas las funciones necesarias del modelo.
 - * Los Datos se capturan en forma directa sobre pantallas gráficas.
 - * Presentación simultánea de todas las salidas del modelo.
 - * Presentación simultánea de las salidas de simulaciones con valores diferentes de parámetros.
 - * Capacidad de cortar y empastar con otras aplicaciones de Windows.
 - Desventajas
 - * Los cálculos efectuados por HSSM-KO y HSSM-T son mas lentos bajo la interfaz de Windows por el efecto del entorno de Windows.
 - * Se requiere una maquina con suficiente capacidad de procesamiento y memoria para correr Windows en forma efectiva. Típicamente esto sería una 386 o superior con por lo menos 4 megaBytes de RAM.
 - * Se requiere de cierto nivel de experiencia con Windows.
 - * Se consume más memoria por Windows que por DOS.

Tabla 3.1: Comparación de las interfaces MS-DOS y MS-Windows.

La segunda interfaz se desarrolló para el sistema operativo MS-DOS. En este caso la interfaz consiste de cuatro programas: PRE-HSSM, HSSM-KO, HSSM-T y HSSM-PLT. El PRE-HSSM se usa para crear y editar archivos de datos de entrada; HSSM-KO y HSSM-T ejecutan los cálculos del modelo, y HSSM-PLT se usa para trazar y producir la salida de los resultados del modelo. Los cuatro programas pueden correrse individualmente o bien

el programa HSSM-DOS puede usarse como un sistema simple de menú. La interfaz de DOS se describe en el Apéndice A "La interfaz MS-DOS, HSSM-DOS."

Cada una de las interfaces puede usarse para crear y editar los archivos de datos de entrada, correr el modelo y graficar los resultados. La interfaz Windows de Microsoft permite una manipulación extensa de la salida del modelo, exhibición simultánea de todas las salidas principales del modelo, y presentación simultánea de resultados de varias simulaciones. Con objeto de ayudar en la selección de una interfaz de usuario, la Tabla 3.1 describe algunas ventajas y desventajas de cada interfaz. La información detallada sobre la corrida del modelo HSSM con cada una de las interfaces se da en la sección o apéndice respectivos. Cada una contiene la misma información sobre la estimación de los valores de los parámetros del modelo, de manera que el usuario disponga de la información de los parámetros en donde se describan los procedimientos de entrada.

Se proporcionan tres programas de utilería para simplificar el cálculo de ciertos valores de parámetros de entrada. Los programas de utilería, que se enumeran en la Tabla 3.2, se relacionan como sea necesario en donde se describen los valores de los parámetros. La información de antecedentes y las instrucciones para correr los programas de utilería se proporcionan en los apéndices.

Parámetro(s)	Programa de Utilería
Propiedades hidráulicas del suelo	SOPROP
Coefficientes de partición de equilibrio NAPL/Agua	RAOULT
Saturación promedio de NAPL para OILENS	NTHICK o NTHICK2

Tabla 3.2: Utilerías para el cálculo de datos para el HSSM.

Capítulo 4

Interfaz de MS-Windows, HSSM-WIN

La interfaz de MS-Windows, HSSM-WIN, proporciona una interfaz conveniente para crear y editar los archivos de datos, correr el modelo HSSM, visualizando las salidas de varias corridas al mismo tiempo, y exportando gráficas hacia otras aplicaciones de Windows. Esta interfaz se desarrolló a partir de la interfaz de modelado ShowFlow, desarrollada en la Universidad de Texas en Austin (Tauxe, 1990) y se describe en este capítulo de la guía del usuario.

4.1 Descripción General de la Interfaz Microsoft Windows

Las funciones principales de la interfaz se plantean en la Tabla 4.1. Los detalles necesarios se proporcionan en las secciones anotadas en la tabla.

Función de la Interfaz	Incisos	Páginas
1. Instalación de HSSM-WIN	4.2 y 4.3	19 y 20
2. Operación de la interfaz HSSM-WIN, Resumen de comandos de la interfaz	4.4	23
3. Creación de conjuntos de datos	4.5	25
4. Edición de parámetros de entrada	4.6.1 y 4.6.3 a 4.6.6	29 y 31 a 44
5. Corrida de los modelos HSSM-KO y HSSM-T	4.5.3 y 4.7	26 y 48
6. Graficado de los resultados de HSSM	4.5.4	27
7. Interpretación de las gráficas de HSSM	4.8	54
8. Contenido de los archivos de salida de HSSM	6	77

Tabla 4.1: Bosquejo de la interfaz de HSSM-WIN.

A continuación se presenta el procedimiento general para usar HSSM-WIN. Después de instalar HSSM-WIN, debe crearse un conjunto de datos seleccionando el menú "Editar" de HSSM-WIN (Inciso 4.5). EL modelo HSSM-WIN contiene cuatro pantallas para editado de datos (cuadros de diálogo) que se usan sucesivamente para crear los conjuntos completos de datos de entrada para los modelos HSSM-KO y HSSM-T (Incisos 4.6.1 y 4.6.3 a 4.6.6). Una vez que esté satisfecho el usuario con el conjunto de datos, entonces se guardan los datos con un nombre de archivo nuevo o se puede escribir sobre un archivo existente. Este nombre de archivo se carga en la memoria del modelo HSSM-WIN y se usará cuando se lleve a cabo la simulación.

Los modelos HSSM-KO y HSSM-T se ejecutan desde la interfaz de Windows. En vista de que HSSM-KO y HSSM-T son programas independientes, éstos deben correrse sucesivamente para completar toda la simulación. El inciso 4.7 describe la ejecución de estos programas. Una vez que haya terminado cada uno, permanece una

ventana de DOS en la pantalla, que debe ser cerrada por el usuario antes de continuar. Esta característica se proporciona porque es importante ver los mensajes escritos por los programas en la pantalla. (El programa Windows cerraría normalmente la ventana de DOS inmediatamente después de la terminación de los programas y el usuario no podría ver el conjunto final de mensajes).

Cuando se termina una simulación, pueden graficarse los resultados con el concepto Graficar del menú del modelo HSSM-WIN. Pueden presentarse seis gráficas por la interfaz, y el usuario puede seleccionar aquellas que él o ella quisieran inspeccionar (Inciso 4.5.4). EL modelo HSSM-WIN permite el copiado de gráficas a otras aplicaciones de Windows (Inciso 4.5.8), la exhibición simultánea de resultados de simulaciones múltiples (Inciso 4.5.7), y la impresión de las gráficas (Inciso 4.5.6).

4.2 Requisitos del Sistema

El modelo HSSM-WIN es una aplicación escrita para el ambiente gráfico Windows de Microsoft. Para usar la interfaz de Windows, el usuario debería estar familiarizado en forma general con computadoras personales, DOS, Windows, y el modelo HSSM. Se aconseja a los usuarios que estudien los diversos aspectos de Windows, ya que muchas de las capacidades del modelo HSSM-WIN requieren un conocimiento de las funciones de Windows. Hay varios requisitos para su sistema:

EQUIPO:

Para *386 modo mejorado*, una computadora personal con el procesador Intel 80386 (o superior) y 2 megabytes (MB) o más de memoria (640K de memoria convencional y por lo menos 1024K de memoria extendida).

Para *el modo estándar*, una computadora personal con el procesador Intel 80286 (o mayor) y 1 megabyte o más de memoria (640K de memoria convencional y por lo menos 256K de memoria extendida).

Para *el modo real*, una computadora personal con el procesador Intel 8086 u 8088 (o mayor) y 640K de memoria convencional. El programa Windows 3.1 y los posteriores no apoyan el modo real.

Un disco duro y por lo menos una de unidad de disco flexible.

Un monitor de video apoyado por Windows (con resolución EGA o mejor).

Una impresora apoyada por Windows.

Se recomienda enfáticamente un ratón apoyado por Windows.

La cantidad de memoria disponible del sistema bajo Windows puede verificarse abriendo una ventana a DOS y tecleando el comando MEM de DOS. Se presentará la cantidad de memoria disponible para correr una aplicación de DOS. Esta cantidad debe exceder aproximadamente a los 400 kilobytes requeridos por el modelo HSSM-KO. Si no se dispone de suficiente memoria bajo Windows, los modelos HSSM-KO y HSSM-T pueden correrse bajo DOS y los resultados pueden graficarse posteriormente mediante el modelo HSSM-WIN.

SOFTWARE:

Windows de Microsoft versión 3.0 o posterior*.

El programa Windows requiere MS-DOS o PC-DOS versión 3.1 o posterior.

*El Programa HSSM-WIN ha sido probado y corre bajo Windows 95

4.3 Instalación

4.3.1 Lista de Empaque de los Archivos

La Tabla 4.2 muestra los archivos que se encuentran en el disquete de distribución HSSM-1-w del modelo HSSM-WIN.

Archivo	Objetivo
HSSM-WIN.EXE	Programa para la interfaz de Windows
HSSM-KO.EXE	Módulos KOPT y OILENS del modelo HSSM
HSSM-T.EXE	Módulo TSGPLUME del modelo HSSM
HSSM-KO.PIF	Archivo de Información de Windows (pif) para HSSM-KO.EXE
HSSM-T.PIF	Archivo de Información de Windows (pif) para HSSM-T.EXE
REBUILD.EXE	Programa de recuperación para simulaciones interrumpidas
REBUILD.PIF	Archivo de Información de Windows (pif) para REBUILD.EXE
README.TXT	Este archivo contiene información sobre cambios que han ocurrido desde la escritura de la guía del usuario.
RAOULT.EXE	Utilería para efectuar el cálculo de la ley de Raoult.
RAOULT.DAT	Conjunto de datos por default para la utilería RAOULT.
SOPROP.EXE	Utilería para estimar las propiedades de los suelos con las ecuaciones de regresión de <i>Rawls y Brakensiek</i> (1985).
NTHICK.EXE	Utilería para estimar el espesor de NAPL a la altura del nivel freático.
SYSTEM\COMMDLG.DLL	Librería de liga dinámica de Windows proporcionada para usuarios de Windows 3.0.

Tabla 4.2: Lista de empaque de archivos para la interfaz Windows del modelo HSSM.

En el disquete HSSM-2 se distribuyen varios problemas ejemplo, incluyendo aquellos presentados en el Capítulo 5. Asegúrese de hacer copias de respaldo de estos archivos en otros disquetes y de proteger los disquetes de distribución contra escritura.

4.3.2 Copiado de Archivos al Disco Duro

Esta sección describe la instalación del modelo HSSM-WIN desde el sistema DOS, que es el procedimiento más sencillo de instalación. Verifique el archivo **README.TXT** para información sobre procedimientos automatizados de instalación que se encuentran en desarrollo a la fecha de este escrito. Los usuarios experimentados de Windows pueden instalar el programa usando el Administrador de Archivos de Windows. Para mayor información sobre el Administrador de Archivos, consulte su material de referencia de Windows.

Después de respaldar el disquete HSSM-1-w, se deberá crear un sub-directorio para el modelo tecleando el comando DOS:

```
MKDIR C:\HSSM
```

donde HSSM es el nombre del subdirectorio de HSSM-WIN. Con el disquete HSSM-1-w en el puerto A, copie todos los archivos desde el disquete al directorio HSSM sobre el disco duro, tecleando:

```
COPY A:\*.* C:\HSSM
```

(El disquete HSSM-1-w puede estar en otro puerto, digamos el B, debiéndose teclear mas bien "B:" en vez de "A:" en el comando anterior.) Los problemas ejemplo y los archivos de salida contenidos en el disquete HSSM-2 deberán instalarse en un directorio separado. Crea el directorio para los problemas ejemplo tecleando:

```
MKDIR C:\HSSM\EXAMPLE
```

Los archivos se copian a este directorio tecleando:

```
COPY A:\*.* C:\HSSM\EXAMPLE
```

Se pueden y deberían crear subdirectorios para cada simulación de HSSM. Por ejemplo, para crear un directorio PROJECT1, teclee el comando:

```
MKDIR C:\HSSM\PROJECT1
```

Seleccionando el subdirectorio PROJECT1 al usar el modelo HSSM, todos los archivos de entrada y salida para la simulación estarán en C:\HSSM\PROJECT1.

Los usuarios de Windows 3.0 necesitarán también copiar la librería de liga dinámica **COMMDDL.DLL** desde el subdirectorio SYSTEM en el disquete de distribución al subdirectorio SYSTEM de su directorio de Windows sobre el disco duro tecleando:

```
COPY A:\SYSTEM\COMMDDL.DLL C:\WINDOWS\SYSTEM
```

Los usuarios de Windows 3.1 ya tienen este archivo. El usuario deseará probablemente agregar ahora HSSM-WIN a un grupo Administrador de Programas como se describe en la siguiente sección.

4.3.3 Agregado de HSSM a un Grupo Administrador de Programas

El programa HSSM-WIN debería agregarse a un grupo Administrador de Programas de manera que el HSSM-WIN pueda ser ejecutado marcando con el ratón sobre su icono. Se dan dos procedimientos para esta operación:

1. Con ambos, el Administrador de Archivos y el Administrador de Programas que ocupan lugares diferentes en la pantalla como se muestra en la Figura 4.1, simplemente arrastre el nombre del archivo **HSSM-WIN.EXE**

al grupo manejador de Programas, donde aparecerá como un icono.

2. De manera alternativa, Ud. puede usar el comando "Archivo" "Nuevo" de Windows para especificar un nuevo grupo de programas y concepto.

Para el grupo de programas:

Seleccione el botón del grupo de programas

Marque con el ratón el botón "ACEPTAR"

Teclee HSSM como descripción

Marque con el ratón el botón "ACEPTAR"

Para el concepto de programa:

Seleccione el botón de concepto de programa

Marque con el ratón el botón "ACEPTAR"

Teclee HSSM como descripción

Teclee C:\HSSM\HSSM-WIN.EXE como línea de comando

Teclee C:\HSSM como directorio de trabajo

Marque el botón "ACEPTAR" con el ratón

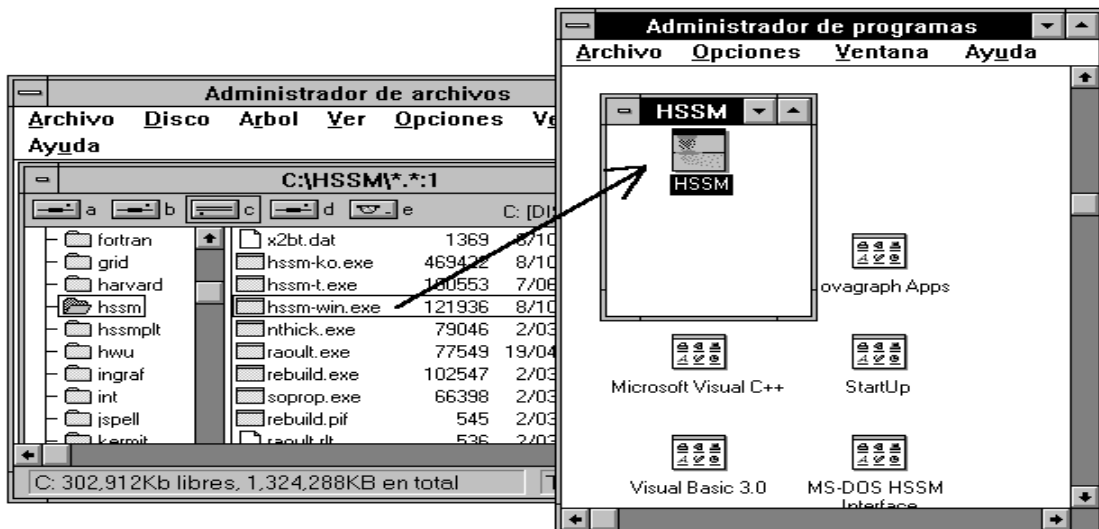


Figura 4.1: Instalación de HSSM-WIN en un grupo Administrador de programas.

Una vez que se haya cargado exitosamente el modelo HSSM-WIN en su sistema, deberá verificar el archivo **CONFIG.SYS**. El programa HSSM-KO abre un número de archivos temporales y el **CONFIG.SYS** debe estar configurado de manera que pueda abrirse un número suficiente de archivos. El archivo **CONFIG.SYS** en su sistema necesita incluir la línea

FILES = 30

(Un número mayor de treinta también trabajará.) Después de modificar el archivo **CONFIG.SYS**, deberá volver a arrancar su sistema para permitir que se efectúe el cambio. En el Apéndice J se discute la instalación de ambas interfaces de Windows y de DOS en una sola computadora.

4.4 Uso del Modelo HSSM-WIN

4.4.1 Arranque

Como cualquier otra aplicación de Windows, el modelo HSSM-WIN aparecerá en un grupo Administrador de Programas como un ícono, y puede arrancarse simplemente por un marcado doble con el ratón colocando el cursor sobre el ícono.

El modelo HSSM-WIN puede arrancarse también desde el Administrador de Archivos de Windows por medio de doble-marcaje con el ratón sobre el archivo denominado **HSSM-WIN.EXE**. Si no tiene un ratón, seleccione "Correr..." desde el menú "Archivo" (ALT+A seguido por C) y teclee "C:\HSSM\HSSM-WIN.EXE" en el cuadro de diálogo. Se limpiará la pantalla y aparecerá la ventana principal de HSSM-WIN.

Aparece una variedad de opciones de menú en la *barra de menú* en la parte superior de la ventana HSSM-WIN (Figura 4.2). Estas opciones de menú son los encabezados para operaciones conexas que aparecerán en un submenú debajo de cada concepto de menú. Para mayor información sobre el uso de la interfaz estándar de Windows, consulte su documentación de Windows.

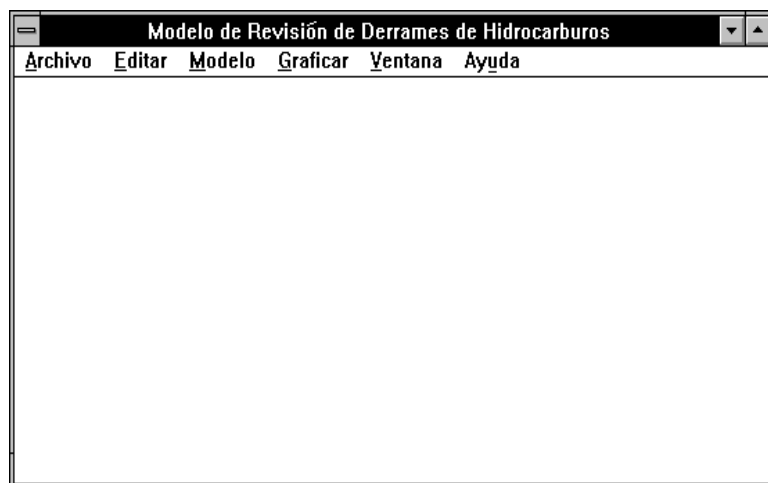


Figura 4.2: Pantalla inicial de HSSM-WIN.

Cuando aparece por primera vez HSSM-WIN en la pantalla, algunos conceptos del menú se escriben en un color diferente, o están *desactivados*. Esto significa que esos comandos no están disponibles en este momento, ya que no se han cargado aún ningún dato ni parámetros en el programa. Por ejemplo, los comandos de Guardar y Graficar están desactivados, ya que no existe aún ningún dato para guardar o graficar. Las opciones disponibles incluyen Archivo Abrir y Editar, para abrir un archivo de entrada existente o editar uno desde el principio. Una vez que se hayan cargado datos, todas las opciones del menú quedan disponibles.

4.4.2 Resumen de Comandos del Menú

La Tabla 4.3 contiene un listado de todos los comandos del modelo HSSM-WIN. Cada comando de HSSM-WIN es cualquiera de lo siguiente:

1. Una opción del menú de la barra del menú principal (encabezados de columna 1 a 6 de la Tabla 4.3, ver Figura 4.2),
2. Enlistados en un submenú de bajada (conceptos en columnas 1 a 6 de la Tabla 4.3), o
3. Enlistados en el menú del sistema (conceptos en columna 7 de la Tabla 4.3).

(Se accede al menú del sistema marcando dos veces con el ratón sobre el ícono en la esquina superior izquierda de la ventana o pulsando ALT + BARRA ESPACIADORA en el teclado). Algunos de los comandos son seguidos por una elipse (...), que significa que se requiere de más información antes de ejecutarlo. Uno de los conceptos del menú en HSSM-WIN puede tener subrayado una letra, o puede estar seguido de un *acelerador* (tales como "Graficar Resultados CTRL+G"). Estos son códigos abreviados para el teclado. El usuario que este familiarizado con el programa puede encontrar frecuentemente que el teclado es más rápido que el ratón. En el Inciso 4.10 se presenta una descripción de cada comando.

Resumen de Comandos de HSSM-WIN							
	Archivo (1)	Editar (2)	Modelo (3)	Graficar (4)	Ventana (5)	Ayuda (6)	Menú del Sistema (7)
(a)	Nuevo	Datos Generales...	Correr HSSM-KO	Graficar Resultados...	en Cascada	Acerca de Tamaño	Reestable- cer
(b)	Abrir...	Datos Hidrológicos...	Correr HSSM-T	Copiar Gráfica	en Mosaico HSSM...	Acerca de HSSM-WIN...	Ajustar
(c)	Guardar	Datos de la fase de Hidro- carburos...	Correr REBUILD	Imprimir Gráfica	Arreglar Iconos		Mover
(d)	Guardar Como...	Datos de Simulación del Modelo...		Cerrar Gráfica	Cerrar Todo		Minimizar
(e)	✓ Comprobar Tiempos de Archivos			Fonts	Lista de Gráficas		Maximizar
(f)	Salir de HSSM-WIN						Cerrar
(g)							Cambiar a...

Tabla 4.3: Resumen de comandos de HSSM-WIN.

4.5 Empleo de HSSM-WIN para Efectuar Simulaciones del Modelo HSSM

Las secciones siguientes dan los procedimientos específicos para correr las Simulaciones del modelo HSSM empleando los comandos de HSSM-WIN. Las opciones de menú de HSSM-WIN se refieren mediante el número de columna y letra del renglón en la Tabla 4.3. Por ejemplo, el concepto de la opción Abrir de la barra de menús Archivo se designa *1.b*.

4.5.1 Creación de Nuevos Conjuntos de Datos de Entrada

1. Limpie cualquier nombre existente y datos de archivos seleccionando "Nuevo" desde el menú "Archivo" (*1.a*). Este paso puede saltarse, si no se han usado archivos anteriormente durante la actual sesión de HSSM-WIN.
2. Llame al Editor de Archivos de Entrada seleccionando "Editar" (*2*) de el menú HSSM-WIN (o use el acelerador Ctrl+E).
3. Digite los datos en cada uno de los cuatro Editores de Archivos de Entrada (*2.a* hasta *2.d*) como se describe en los Incisos 4.6.3 a 4.6.6, y marque con el ratón sobre "ACEPTAR" (ENTRAR) para salir del editor.
4. Guarde el archivo con el comando "Guardar" desde el menú "Archivo" (*1.c*). Cuando se solicite un nombre nuevo, teclee un nombre de hasta ocho caracteres. No hay necesidad de agregar la extensión **.DAT**, ya que el programa HSSM-WIN lo hará.

4.5.2 Edición de Conjuntos de Datos de Entrada Existentes

1. Abra un archivo de entrada existente para editar siguiendo el procedimiento que se da abajo:

Escoja la opción "Abrir..." desde el menú "Archivo" (*1.b*). El campo de diálogo de Abrir Archivos enumerará los nombres pertinentes de archivos en el directorio por default, como se muestra en la Figura 4.3.

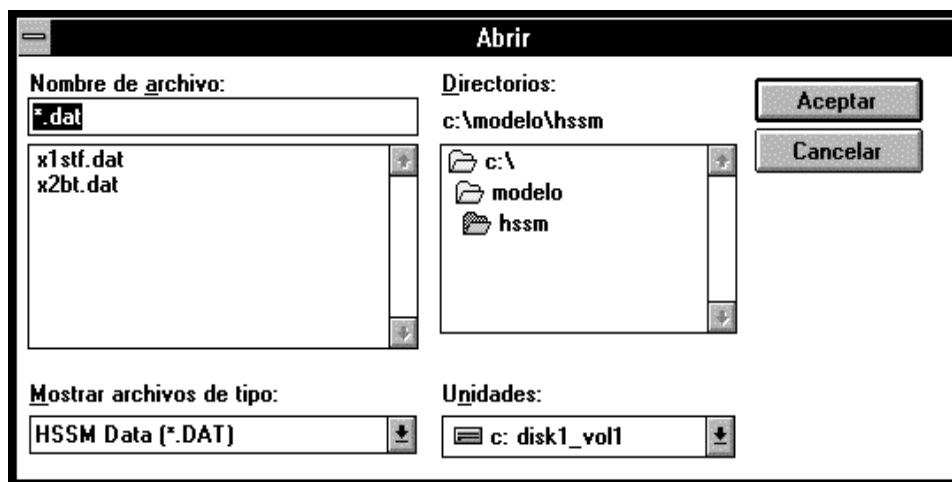


Figura 4.3: Cuadro de diálogo abrir archivo.

Revise la lista de nombres utilizando la barra de desplazamiento vertical con el ratón.

Si aparece aquí el nombre del archivo deseado, marque doblemente con el ratón sobre el nombre para abrirlo. (Con el teclado, teclee el nombre en el cuadro y seleccione ENTRAR para abrir el archivo. Si decide no abrir un archivo, seleccione ESC para anular.)

2. Llame al Editor de Archivos de Entrada seleccionando "Editar" (2) del menú HSSM-WIN (o use el acelerador Ctrl+E).
3. Capture los datos en cada uno de los cuatro Editores de Archivos de Entrada (2.a hasta 2.d) como se describió en los Incisos 4.6.3 a 4.6.6, y marque con el ratón sobre el "ACEPTAR" (ENTRAR) para salir del editor.
4. Guarde el archivo.
 - Si quiere escribir encima de el archivo original, simplemente seleccione la opción "Guardar" desde el menú "Archivo" (1.c).
 - Si quiere seleccionar un nombre nuevo con el comando "Guardar Como" desde el menú "Archivo" de HSSM-WIN (1.d). Cuando se pide un nombre nuevo de archivo, teclee un nombre de hasta ocho caracteres. No hay necesidad de agregar la extensión .DAT, ya que HSSM-WIN lo hará.

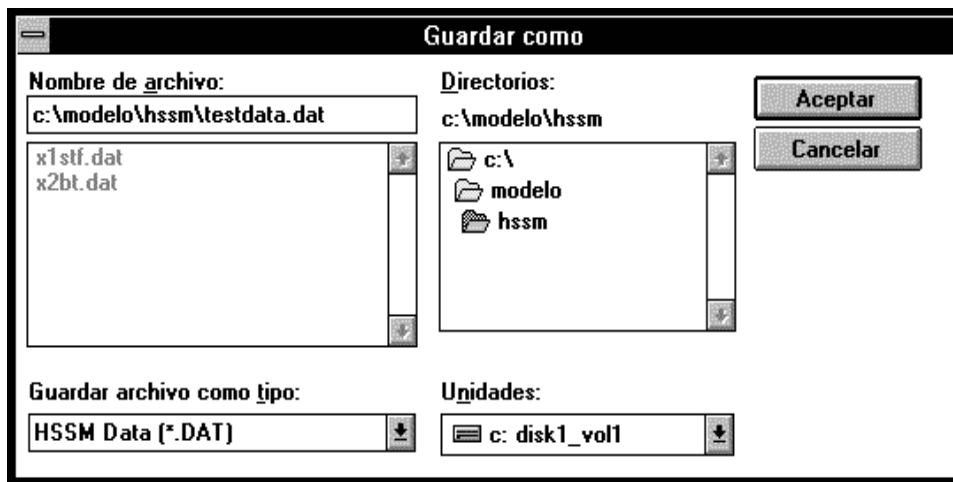


Figura 4.4: Cuadro de diálogo para guardar archivo como.

4.5.3 Corrida del Modelo

Seleccione "Modelo" (3) para efectuar las dos partes de los cálculos del modelo HSSM.

1. El modelo HSSM-KO se ejecuta seleccionando "Correr HSSM-KO" (3.a). El modelo HSSM-KO lee todo el archivo de datos de entrada y ejecuta las simulaciones de los modelos KOPT y OILENS. El modelo HSSM-KO produce luego un archivo separado de datos de entrada para el modelo HSSM-T, que contiene algunos de los datos de entrada del modelo HSSM-KO y algunos de los resultados del modelo HSSM-KO, que se requieren para el modelo HSSM-T.
2. Después de la terminación exitosa del modelo HSSM-KO, el segundo paso es correr el modelo HSSM-T, seleccionando "Correr HSSM-T" (3.b). Estos dos programas son programas DOS, de manera que el programa Windows debe crear procesos en DOS a fin de poder correr estos códigos. El Inciso 4.7 muestra los mensajes de pantalla producidos cuando se ejecutan los modelos HSSM-KO y HSSM-T.

NOTA: Si se tienen que cambiar los parámetros para el modelo TSGPLUME (HSSM-T) después de haber ejecutado HSSM-KO, será necesario editar el juego de datos y debe correrse nuevamente el modelo HSSM-KO.

4.5.4 Graficado de los Resultados del Modelo

1. Para generar gráficas de los datos, se selecciona "Graficar" (4) y "Graficar Resultados..." (4.a) para obtener el cuadro de diálogo para Exhibición de Gráficas (Figura 4.5).

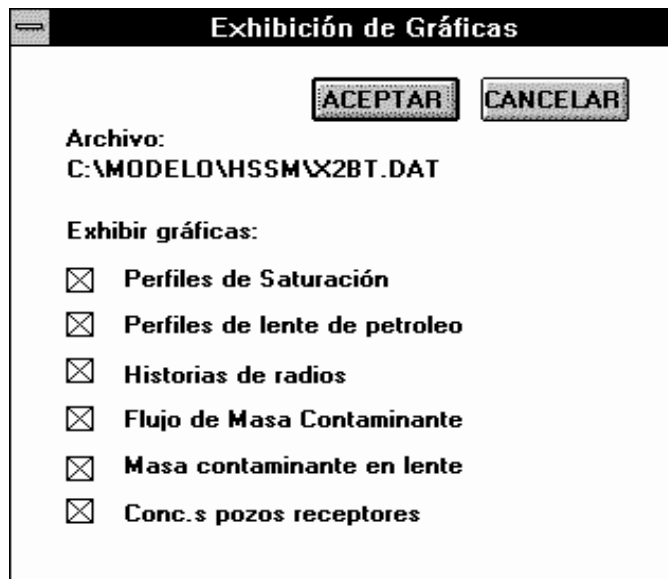


Figura 4.5: Cuadro de diálogo para exhibición de gráficas.

2. Seleccione las gráficas por hacer, marcando con el ratón los cuadros de selección. Una "X" en el cuadro significa que ha sido seleccionado. Para hacer esto desde el teclado, oprima la tecla "TAB" para mover el realzado al cuadro deseado y la BARRA ESPACIADORA para activar o desactivar.
3. Seleccione "ACEPTAR" para dibujar las gráficas.
4. Para cerrar una gráfica, seleccione "Cerrar" del menú de graficar del sistema Windows , o marque con el ratón dos veces (4.d) sobre el icono del menú del sistema en la esquina superior izquierda de la ventana de gráficas. El cierre de gráficas no requeridas proporciona mas espacio en la memoria para otras gráficas o programas.

4.5.5 Graficado de Resultados a Partir de una Simulación Previa

1. Cargue el conjunto de datos, seleccionando "Abrir" desde el menú "Archivo" (1.b).
2. Para generar gráficas a partir de los datos, seleccione "Graficar" (4) y "Graficar Resultados..." (4.a) para obtener la ventana de diálogo de gráficas.
3. Seleccione las gráficas por hacer, marcando con el ratón sobre los cuadros correspondientes. Una "X" en el cuadro significa que este ha sido seleccionado. Para hacer esto desde el teclado, oprima la tecla "TAB" para mover el realzado al cuadro deseado y la BARRA ESPACIADORA para activar o desactivar el cuadro.
4. Seleccione "ACEPTAR" para dibujar las gráficas.
5. Para cerrar una gráfica, seleccione "Cerrar" desde el menú de graficar del sistema Windows de Gráficas, o (4.d) marque doblemente con el ratón sobre el icono del menú de sistema en la esquina superior izquierda de la ventana de Gráficas. Al cerrar las gráficas no requeridas se obtiene más espacio en la memoria para otras gráficas o programas.

4.5.6 Impresión de una Gráfica

1. Genere una gráfica como se describió anteriormente.
2. Desde el menú “Graficar”, seleccione la opción “Imprimir Gráfica” de (4.c).
3. Después de unos pocos segundos aparecerá un mensaje que dice “Enviando gráfica al administrador de Impresoras”, con la opción de cancelar el trabajo de impresión. A menos que se quiera cancelar el trabajo, espere hasta que desaparezca el mensaje. Esto significa que la imagen ya se envió a su destino y HSSM-WIN está listo para continuar.

NOTA: Las gráficas pequeñas se imprimirán en forma relativamente rápida, pero las imágenes más grandes tomarán más tiempo. Una gráfica de página entera puede tomar varios minutos, dependiendo de la sofisticación de la impresora y del software del administrador de impresoras y de la disponibilidad de memoria libre y del espacio en el disco duro.

4.5.7 Comparación Entre Varias Simulaciones

1. Edite o cree un archivo de entrada, corra la simulación y grafique los resultados. Si ya se han corrido las simulaciones y existen los archivos de gráficas, entonces cargue el nombre del archivo con “Abrir” y “Archivo” (1.b) y escoja el comando “Graficar” para presentar las gráficas (4.a). Empleando el comando de Minimizar, reduzca cada una de las gráficas a un icono. Los iconos se exhibirán a lo largo de la base del de la ventana HSSM-WIN. Haga esto para las simulaciones que desee comparar.
2. Restaure las gráficas que desee comparar, ya sea marcando doblemente con el ratón sobre el icono o bien seleccionando las gráficas enlistadas en en el menú del cuadro de diálogo de “Windows” (5.e). Puede escoger tantas gráficas como Ud. desee.
3. Use el comando “Mosáico” en el menú “Windows” (5.b) para redibujar las gráficas como en la Figura 4.6.
4. Si lo desea, se pueden ajustar los tamaños de las ventanas gráficas para ajustar sus escalas “arrastrando” las esquinas o lados con el ratón o usando los comandos de Mover y Ajustar desde el menú de sistema de la ventana de gráficas de Windows (7.c y 7.d).
5. Para ver los valores de los parámetros de una corrida particular, abra el archivo en cuestión e inspeccione los datos usando los Editores de Archivo de Entrada (2.a hasta 2.d).

NOTA: Cada gráfica en la pantalla consume hasta cierta cantidad de KB de memoria que se liberan al cerrar una ventana gráfica. Cuando se tienen varias gráficas y/u otras aplicaciones corriendo, el programa HSSM-WIN o el programa Windows pueden determinar que no existe suficiente memoria libre o recursos para crear otra gráfica. En este caso, se le pedirá al usuario que termine algo para crear más espacio en la memoria.

4.5.8 Copiado de una Gráfica al Portapapeles

Los programas de Windows tienen la capacidad para transferir directamente imágenes de pantalla desde una aplicación de Windows a otra. Por ejemplo, una gráfica de HSSM-WIN puede copiarse a un documento de un procesador de palabras. El Portapapeles de Windows se usa como un punto de almacenamiento intermedio para tales transferencias.

1. Genere una gráfica como se describió arriba.
2. Desde el menú “Graficar” (4), escoja la opción “Copiar Gráfica” (4.b). Esto copia la gráfica al Portapapeles en un formato de mapa de bits y reemplaza cualquier dato previo del Portapapeles.
3. Para ver el contenido del Portapapeles en cualquier tiempo, corra el programa del Portapapeles.

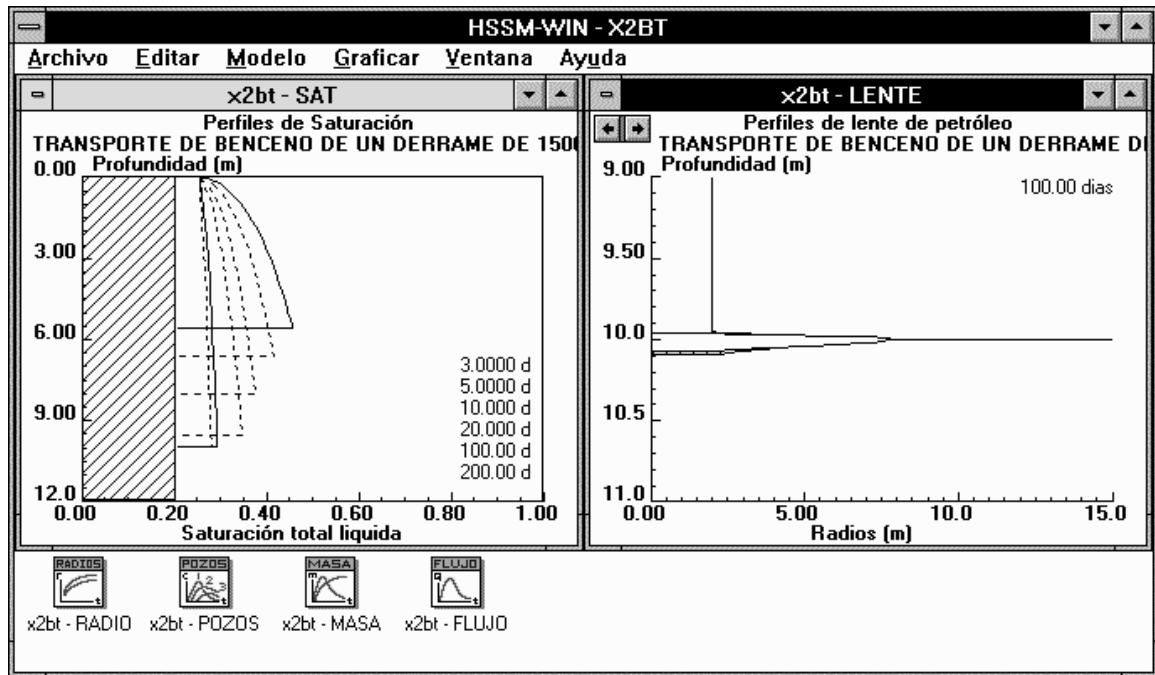


Figura 4.6: Comparación de gráficas de dos simulaciones diferentes.

4. Para pegar una gráfica en otra aplicación, busque el comando "Pegar" en el menú de esa aplicación, si esta disponible. Debe estar enlistado bajo el submenú de "Editar". La Figura 4.7 muestra una gráfica de HSSM-WIN pegada en PAINTBRUSH.
5. Los mapas de bits copiados al Portrapeles pueden guardarse también como archivos *.CLP, de manera que las gráficas puedan guardarse para uso posterior.

4.5.9 Salir del Modelo HSSM-WIN

Se puede salir del modelo HSSM-WIN seleccionando "Archivo" y "Salir de HSSM-WIN" (1.f). También se puede salir del programa marcando doblemente con el ratón sobre el menú del sistema en la esquina superior izquierda (equivalente a seleccionar 7.f). Si no se ha guardado algún trabajo, el modelo HSSM-WIN alertará al usuario para guardarlo antes de cerrar el programa.

4.6 Editar y Crear Conjuntos de Datos del Modelo HSSM

Las secciones siguientes describen todos los parámetros requeridos para el modelo HSSM. Las secciones también proporcionan orientación sobre como determinar valores apropiados para los parámetros. Para mayor conveniencia, se proporcionan formas en blanco de cada una de estas pantallas en el Apéndice N. Estas formas son útiles para armar los conjuntos de datos y pueden copiarse para un uso repetido. Los usuarios experimentados del modelo pueden desear editar sus propios conjuntos de datos en forma directa; el Apéndice K muestra la estructura de los archivos de datos de entrada para los modelos HSSM-KO y HSSM-T.

4.6.1 Uso de los Editores de los Archivos de Entrada - Técnicas Comunes

Lo que sigue son instrucciones para el empleo del editor para las pantallas de datos de entrada (denominados cuadros de diálogo). Cada uno de los cuadros de diálogo requieren el uso de las características que se describen

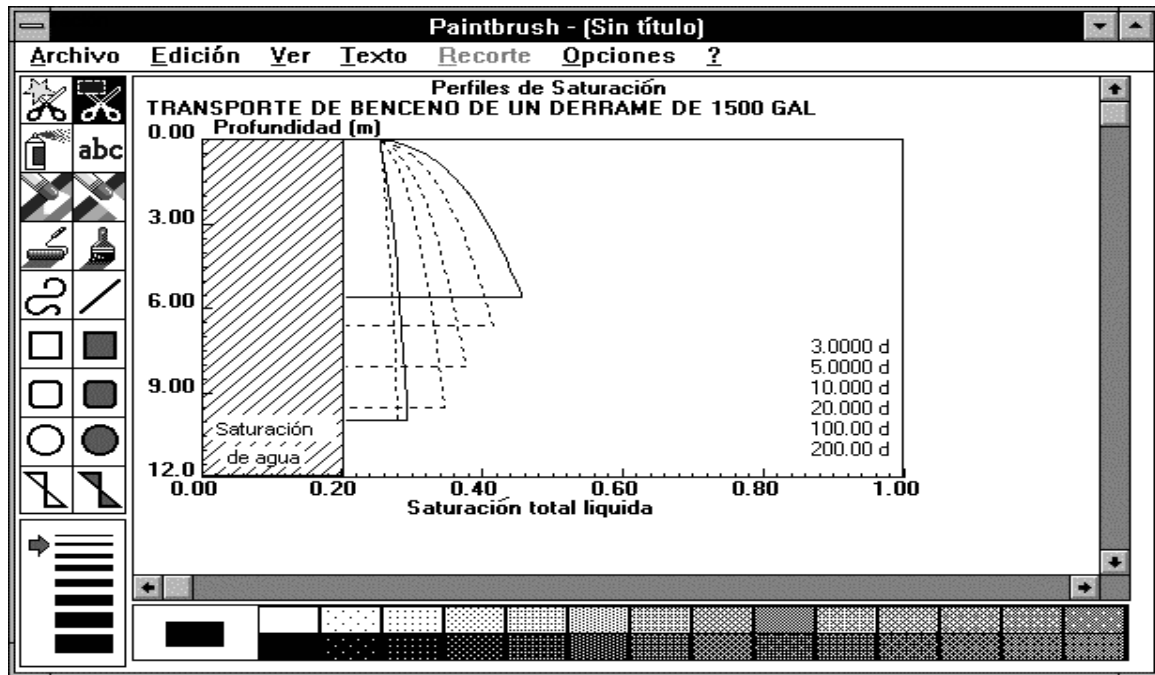


Figura 4.7: Gráfica de HSSM-WIN pegada en PAINTBRUSH.

más adelante.

1. Los cuadros de diálogo del editor de archivos de entrada son el método de HSSM-WIN para editar el archivo de entrada para los modelos. Son presentados seleccionando "Editar" y una de las opciones de datos desde el menú de HSSM-WIN. Esta sección discute las técnicas generales para navegar alrededor y editar los datos en estos cuadros de diálogo, que se ilustran desde la Figura 4.9 hasta la Figura 4.12.
2. El Modelo HSSM-WIN adopta los métodos estándar de Windows para seleccionar y editar texto:

Para *seleccionar* una palabra entera o una entrada numérica, simplemente marque doblemente con el ratón sobre la entrada o jale con el ratón (manteniendo oprimido el botón) sobre la selección deseada. El texto seleccionado aparece en video invertido. Cualquier tecleado que se haga ahora reemplazará el texto seleccionado. Si no quiere reemplazar el texto sino más bien editarlo, use el ratón o las teclas de flechas para situar el cursor en el cuadro. La tecla de BORRAR borrará hacia la derecha del cursor, y la tecla de RETROCESO hacia la izquierda.
3. Desplácese hacia los otros campos de texto al lado de cada descripción de parámetro, ya sea con el ratón o con la tecla de TABULADOR. (Para moverse hacia atrás, use SHIFT+TABULADOR.) Edite los contenidos de cada ventana como desee.
4. *Los botones de radio* se usan para escoger entre opciones que se excluyen mutuamente que aparecen en varios cuadros de diálogo. Dependiendo de la selección que se haga, pueden desactivarse algunos campos de entrada o se activan como sea apropiado. Los botones de radio se seleccionan, ya sea marcando con el ratón o bien utilizando las teclas de flechas ↑ y ↓ para desplazamiento y la BARRA ESPACIADORA para seleccionar.
5. *Los cuadros* de marcate se usan para activar o desactivar opciones que no sean exclusivas. Estas se seleccionan también con la BARRA ESPACIADORA.
6. Acepte los valores nuevos eligiendo el botón de "ACEPTAR" (ENTRAR). La tecla "Cancelar" (ESC) abandonará cualquier cambio que se haya hecho.

Los cuadros de diálogo para los Parámetros Hidráulicos, los Parámetros de la Fase de Hidrocarburos y los Parámetros de Simulación contienen un cuadro de marcate denominado "Activar comprobación de rango". Este cuadro normalmente esta marcado y ocasiona que el modelo HSSM-WIN verifique cada parámetro para asegurarse que cada parámetro se encuentre dentro de los límites permisibles. Cada campo se comprobará para caracteres ilegales o valores fuera-de-rango, en cuyo caso aparecerá un mensaje de error como en la Figura 4.8. Al reconocer este mensaje con "ACEPTAR," el usuario tendrá la oportunidad de editar el campo con error hacia donde el modelo HSSM-WIN haya movido el apuntador. El desactivar la opción de comprobación de rango ocasiona que el modelo HSSM-WIN no compruebe los valores de los parámetros.



Figura 4.8: Ejemplo de un mensaje de error en la entrada de datos.

7. Después de salir del cuadro de diálogo para editar, los cambios se encuentran en la memoria de HSSM-WIN, pero aún no están guardados en un archivo. Use los comandos "Guardar" o "Guardar Como" para guardarlos.

NOTA: Para inspeccionar las gráficas que se encuentran debajo mientras se asignan valores a los parámetros, la ventana de Editar (como cualquier otra) puede quitarse casi totalmente de la pantalla arrastrando su barra de títulos.

4.6.2 Unidades Requeridas para las Simulaciones del Modelo HSSM

Las unidades siguientes se usan en el modelo HSSM y se enumeran con su uso y abreviación (Tabla 4.4). Debe tenerse cuidado para asegurar que todos los parámetros de entrada se conviertan a este conjunto de unidades. Como un recordatorio, se enlistan las unidades requeridas para cada parámetro discutido abajo.

4.6.3 Parámetros Generales del Modelo

El cuadro de diálogo **Parámetros Generales** (Figura 4.9) contiene títulos, interruptores de impresión, interruptores de módulo y nombres de archivos.

Títulos para la Corrida En el modelo HSSM-WIN se usa un título de tres líneas para la corrida. Estas cadenas de texto se incluyen en todos los archivos de salida y de graficado. La primera línea se usa también como título para la gráfica. Si la gráfica es demasiado pequeña para dibujar, la ventana gráfica contendrá únicamente las tres líneas del título.

Interruptores de impresión

Crear archivos de salida Si se elige este interruptor, los archivos de salida serán generados por los modelos. La situación normal es la de escoger esta opción.

Cantidad	Unidad
Tiempo	día
Profundidad	metro
Viscosidad Dinámica	centipoise
Densidad	gramos/cm ³
Tensión Superficial	dina/cm
Concentración	miligramos/litro
Coefficiente de Partición Suelo-Agua	litros/kilogramo
Dispersividad	metro
Varios	adimensionales

Tabla 4.4: Unidades requeridas para las simulaciones del modelo HSSM.

Eco de impresión de datos únicamente

Correr los Modelos Este interruptor le indica al modelo ya sea correr y crear los archivos de gráficas o solamente imprimir en eco los datos de entrada. Se recomienda imprimir en eco, para verificar el archivo de entrada antes de hacer la corrida de simulación.

Interruptores de módulo

Correr KOPT Correr el módulo KOPT de HSSM-KO. KOPT simula la infiltración del NAPL a través de la zona vadosa. El módulo KOPT debe correrse para correr OILENS o TSGPLUME.

Correr OILENS Correr el módulo OILENS de HSSM-KO, para simular el movimiento y disolución de la lente de hidrocarburo en el nivel freático. El módulo OILENS requiere también que se corra KOPT.

Escribir el archivo de entrada de TSGPLUME Escribe el archivo de datos de entrada para TSGPLUME (HSSM-T) cuando se corre el programa HSSM-KO. Esta opción debe seleccionarse si se va correr HSSM-T. El modelo HSSM-T, que simula el transporte del compuesto químico en el acuífero, se corre usando el comando "Run HSSM-T", únicamente después de haber corrido HSSM-KO.

Nombres de Archivos El modelo HSSM requiere el uso de un conjunto específico de archivos para producir archivos de salida y de gráficas. Estos nombres no pueden editarse, pero se incluyen para la información del usuario, ya que aparecerán en el directorio indicado después de correr el modelo. Los nombres cambian automáticamente cada vez que se guarda el archivo bajo un nombre nuevo. Los nombres y los propósitos de los archivos se enumeran en la Inciso 4.7.

Parámetros Generales del Modelo

Títulos de la Corrida

TRANSPORTE DE BENCENO DE UN DERRAME DE 1500 GALS.
 DE GASOLINA---1.15% DE BENCENO EN GASOLINA
 SUELO ARENOSO, PROPIEDADES SEGUN CARSEL Y PARRISH

ACEPTAR
CANCELAR

Interruptores de Impresión

Crear archivos de salida
 Eco de impresión de datos únicamente
 Correr modelos

Interruptores de Módulos

Correr KOPT
 Correr OILENS
 Escribir archivo de entrada HSSM-T

Nombres de Archivos

NOTA: Estos nombres de archivos se usarán si el archivo de datos se guarda bajo un nombre nuevo con la opción "Guardar Como"

C:\MODELO\HSSM\X2BT.DAT	Archivo de entrada HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X2BT.HSS	Archivo de Salidat HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X2BT.PL1	Archivo de gráfica 1 de HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X2BT.PL2	Archivo de gráfica 2 de HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X2BT.PL3	Archivo de gráfica 3 de HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X2BT.PMI	Archivo de entrada de HSSM-T
C:\MODELO\HSSM\X2BT.TSG	Archivo de salida de HSSM-T
C:\MODELO\HSSM\X2BT.PMP	Archivo de gráfica de HSSM-T

Figura 4.9: Cuadro de diálogo de parámetros generales.

4.6.4 Datos Hidráulicos

La ventana de diálogo **Parámetros Hidráulicos** (Figura 4.10) enumera los datos hidráulicos para el modelo.

PROPIEDADES HIDRAULICAS

Viscosidad dinámica del agua, μ (cp) Introduzca la viscosidad dinámica del agua en centipoise (cp). A 20°C la viscosidad del agua pura es 1.0 cp.

Densidad del agua, ρ (g/cm³) Introduzca la densidad del agua en g/cm³. A 20°C la densidad del agua pura es 1 g/cm³.

Tensión superficial del agua, σ (dina/cm) Introduzca la tensión superficial agua/aire en dina/cm. A 20°C la tensión superficial del agua pura es de 72.8 dina/cm. Puede ser apropiado un valor más bajo, digamos 65 dina/cm, para suelos y/o sitios contaminados.

Permeabilidad relativa máxima respecto al agua, k (), durante la infiltración Introduzca la permeabilidad máxima relativa del agua durante la infiltración. Ya que el aire se entrapa normalmente durante la infiltración, la conductividad hidráulica efectiva del suelo será menor que la conductividad saturada. La relación

PROPIEDADES HIDRAULICAS	
Viscosidad dinámica del agua (cp)	1.000
Densidad del agua (g/cm³)	1.000
Tensión superf. agua (dina/cm)	65.00
Valor máx. de k_{rw} durante inf.	.5000

PROPIEDADES DEL MEDIO POROSO	
Conductividad hidr. vert. sat. (m/d)	7.100
Razón de cond. hidr. horiz/vert	2.500
Porosidad	.4300
Densidad global (g/cm³)	1.510
Espesor saturado del acuífero (m)	15.00
Profundidad al nivel freático (m)	10.00
Parámetro de espesor capilar (m)	.1000E-01
Gradiente agua sub. (m/m)	.1000E-01
Dispersividad longitudinal (m)	10.00
Dispersividad transversal (m)	1.000
Dispersividad vertical (m)	.1000

Recarga	
<input checked="" type="radio"/> Velocidad media de recarga (m/d) valor:	
<input type="radio"/> Saturación	.1400E-02

Modelo de la curva de presión Capilar	
<input type="radio"/> Brooks y Corey	
<input checked="" type="radio"/> van Genuchten	
Lambda de Brooks y Corey	0
Carga de entrada de aire (m)	0
Saturación residual de agua	.1000
Alpha de van Genuchten (1/m)	4.500
n de van Genuchten	2.680

Archivo de Datos: C:\MODELO\HSSM\X2BT.DAT

Activar comprobación de rango

ACEPTAR Cancelar

Figura 4.10: Cuadro de diálogo de parámetros hidráulicos.

entre la conductividad efectiva con respecto al agua, K_{ew} , y la conductividad saturada con respecto al agua, K_{sw} , esta dada por

$$K_{ew} = K_{sw} k_{rw} \quad (4.1)$$

donde k_{rw} se llama la permeabilidad relativa con respecto al agua. La permeabilidad relativa es igual a cero cuando la saturación se encuentra cerca o abajo de la residual y es igual a uno cuando el medio poroso esta totalmente saturado con agua.

Para tomar en cuenta el entrapamiento de la fase aire, la conductividad máxima efectiva se restringe por el valor fijado para $k_{rw(max)}$. Los valores típicos varían de 0.4 a 0.6 (Bouwer, 1966); se usa frecuentemente 0.5 (p. ej. Brakensiek et al., 1981). Entonces se determina la saturación máxima de agua a partir de la función k_{rw} que es usada por el modelo HSSM. Se supone que el remanente del espacio poroso esta lleno de aire entrapado. Entonces se desecha la saturación de agua calculada a partir de $k_{rw(max)}$, ya que el modelo únicamente usa la saturación del aire entrapado.

Recarga Verifique el tipo de condición de recarga deseado. La recarga puede ser ya sea especificando una velocidad de recarga o bien una saturación de agua residual en la zona vadosa.

- Velocidad media anual de recarga, q (m/d)** Escoja esta opción para especificar un flujo de recarga.
- Saturación, S ()** Escoja esta opción para especificar una saturación constante de agua en el espacio poroso.

Quando se selecciona la recarga anual como entrada de recarga:

El valor introducido es la velocidad media anual de recarga. Por ejemplo, con una velocidad anual de recarga de 10 cm/año el valor capturado será:

$$2.74 \times 10^{-4} \frac{m}{d} = 10 \frac{cm}{año} \left(\frac{m}{100 cm} \right) \left(\frac{año}{365 d} \right) \quad (4.2)$$

El modelo HSSM-KO calcula la saturación de agua (fracción del espacio poroso que se llena de agua) a partir de la velocidad de recarga. Las velocidades grandes de recarga pueden ocasionar que el espacio poroso disponible se llene completamente de agua, de manera que no permite la infiltración del NAPL. Si se encuentran tales condiciones, se escribirá un mensaje de error en la pantalla.

Quando se selecciona la saturación como entrada de recarga:

Quando el 35% del espacio poroso esta lleno agua, entonces se pone aquí 0.35. Empleando el otro conjunto de unidades: si el contenido volumétrico de humedad es 0.14 y la porosidad 0.40, entonces se introduce aquí la saturación equivalente de 0.35.

Típicamente se emplearía aquí el contenido de humedad cerca o arriba de la *capacidad de campo*, después de convertirla a saturación. La relación entre el contenido volumétrico de humedad, θ_w , la porosidad, η , y la saturación, S_w , esta dada por $\theta_w = \eta S_w$. A partir del dato de entrada de saturación, el modelo HSSM-KO calcula el flujo correspondiente de agua.

Modelo de la Curva de Presión Capilar

- Brooks y Corey**
- van Genuchten**

Seleccione el modelo de presión capilar que se utilizará en los cálculos del modelo HSSM. En el Apéndice C.1 "Propiedades de Suelos" se da información adicional sobre la selección de los parámetros del modelo. Se pueden utilizar los parámetros del modelo ya sea según Brooks y Corey o bien según van Genuchten. El apéndice contiene valores típicos de parámetros para cada uno de estos modelos. Aunque el modelo HSSM esta diseñado para usar el modelo de Brooks y Corey, se pueden meter parámetros del modelo de van Genuchten como entrada. Los parámetros del modelo de van Genuchten se convierten a parámetros aproximadamente equivalentes del modelo de Brooks y Corey mediante un procedimiento desarrollado por *Lenhard et al.* (1989). Solamente se requieren meter los parámetros realizados para el modelo seleccionado.

Para el Modelo de Brooks y Corey: La ecuación del modelo de *Brooks y Corey* (1964) que describe la relación entre la saturación S_w y la carga capilar h_c esta dada por

$$\left(\frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right) = \left(\frac{h_{ce}}{h_c} \right)^\lambda \quad (4.3)$$

donde la saturación residual de agua, S_{wr} , la carga de entrada de aire, h_{ce} , y el índice de distribución del tamaño

de poro, λ , son parámetros de ajuste.

λ de Brooks & Corey El parámetro λ se llama el índice de distribución del tamaño de poro, y se determina ya sea ajustando el modelo de Brooks y Corey a la curva de presión capilar agua/aire $P_c(S_w)$ por medio de un procedimiento delineado por *Brooks y Corey* (1964), o por medio de un ajuste no-lineal de curvas (p. ej. *van Genuchten et al.*, 1991).

Carga de entrada de aire según Brooks & Corey, h_c , (m) Introduzca el valor absoluto de la carga de entrada de aire en metros. Este valor se determina como un parámetro de la curva de presión capilar agua/aire (vea el concepto λ de Brooks y Corey, arriba.)

Saturación residual de agua, S_{wr} Introduzca la saturación residual de agua, que se determina a partir de la curva de presión capilar medida (vea el concepto λ , de Brooks y Corey arriba.)

Para el modelo de van Genuchten:

NOTA: la selección del modelo de van Genuchten ocasiona que el modelo HSSM calcule parámetros aproximadamente equivalentes del modelo de Brooks y Corey, como se describe en el Apéndice E.

El modelo de van Genuchten esta definido por

$$\frac{\theta_w - \theta_{wr}}{\theta_m - \theta_{wr}} = \frac{1}{[1 + (\alpha h_c)^n]^m} \quad (4.4)$$

donde

- θ_w = contenido volumétrico de agua
- h_c = carga capilar con unidades de m
- θ_{wr} = contenido volumétrico residual de agua
- θ_m = contenido volumétrico máximo de agua
- α = un parámetro con unidades de m^{-1}
- n = un parámetro
- m = un parámetro (tomado como una función simple de n)

Para el modelo HSSM el término de contenido reducido de agua (el término del lado izquierdo del modelo de van Genuchten) se toma igual a

$$\frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \quad (4.5)$$

donde la saturación máxima de agua, θ_m , se igualó a la porosidad. Los parámetros del modelo de van Genuchten pueden ajustarse a datos medidos, utilizando un programa de ajuste como RETC (*van Genuchten et al.*, 1991).

Saturación residual de agua, S_{wr} Introduzca la saturación residual de agua, que se determina a partir de la curva de presión capilar medida.

α de van Genuchten Introduzca el valor del parámetro α de van Genuchten en unidades de m^{-1} .

n de van Genuchten Introduzca el valor del parámetro n de van Genuchten.

PROPIEDADES DEL MEDIO POROSO

Conductividad hidráulica vertical saturada, K (m/d) Introduzca el valor de la conductividad hidráulica vertical saturada de la fase agua, K_{sw} , en metros por día. La conductividad hidráulica saturada es uno de los parámetros más importantes del modelo. La estimación de este parámetro se describe en el Apéndice C.1 "Propiedades del Suelo." Este apéndice contiene datos de dos tabulaciones de propiedades de suelos.

Razón entre conductividad hidráulica horizontal y vertical "RKS" Introduzca el valor de la razón de la conductividad horizontal de la fase saturada de agua con la conductividad hidráulica vertical de la fase agua saturada. La anisotropía no se trata en forma directa en el modelo HSSM, más bien el modelo usa el producto de la razón de la conductividad hidráulica saturada "RKS" y la conductividad vertical saturada, K_{sw} , para determinar la conductividad hidráulica del acuífero. Esta última conductividad se usa también para determinar la conductividad efectiva para el NAPL para el esparcido de la lente. Las relaciones entre las conductividades se resumen en la Tabla 4.5.

Modelo y Región	Conductividad Hidráulica Empleada	Variables de HSSM
Zona vadosa (KOPT)	Vertical	K_{sw}
Lente de NAPL (OILENS)	Horizontal	$K_{sw} * RKS$
Acuífero (TSGPLUME)	Horizontal	$K_{sw} * RKS$

Tabla 4.5: Resumen de relaciones de conductividad hidráulica.

Porosidad, η Introduzca la porosidad, η , del acuífero.

Densidad global, ρ (g/cm^3) Introduzca la densidad global del suelo en g/cm^3 . La porosidad, η y la densidad global, ρ_b están relacionados por

$$\rho_b = \rho_s (1 - \eta) \quad (4.6)$$

donde ρ_s es la densidad de los sólidos. La densidad del cuarzo es aproximadamente $2.65 g/cm^3$. Los valores para la porosidad y la densidad global deben ser relacionados por la ecuación 4.6.

Espesor saturado del Acuífero (m) Introduzca el espesor saturado del acuífero en metros.

Profundidad al nivel freático (m) Introduzca la profundidad al nivel freático desde el punto de derrame en metros. Generalmente el punto de derrame se encuentra en la superficie del terreno.

Parámetro de espesor capilar (m) El parámetro de espesor capilar le da al modelo un espesor que debe formarse en la franja capilar antes de que ocurra el esparcido del NAPL. Típicamente, se deberá introducir un valor de 0.01 m para este parámetro. Esto resulta en un espesor pequeño de NAPL que se forma antes de que empiece el esparcido.

El parámetro de espesor capilar puede usarse también para incorporar el efecto de fluctuación del nivel freático sobre el radio de la lente. La fluctuación del nivel freático puede causar un entrapamiento del NAPL a través de una zona de mancha, y el NAPL entrapado no está disponible para el esparcido radial. Para incluir este efecto, el parámetro de espesor capilar deberá calcularse por medio de

$$\left(\begin{array}{c} \text{parámetro} \\ \text{espesor} \\ \text{capilar} \end{array} \right) = \frac{\text{espesor de zona de mancha} \times \text{saturación residual de NAPL}}{\text{saturación máxima de NAPL en la lente}} \quad (4.7)$$

El espesor de zona de mancha deberá tomarse como la fluctuación máxima del nivel freático, y la saturación residual de NAPL debería ser el promedio de los valores de las zonas saturada y vadosa. La saturación residual de NAPL y la saturación máxima de NAPL en la lente se describen en la ventana de diálogo de Datos de la Fase de Hidrocarburos (Inciso 4.6.5).

Gradiente de agua subterránea (m/m) Introduzca el gradiente del agua subterránea. Los gradientes naturales máximos típicos varían desde 0.005 hasta 0.02. En vista de que no se permiten pozos de bombeo en TSGPLUME, deberán usarse los gradientes naturales aquí.

Dispersividades del Acuífero α_L , α_T , α_V (m): Longitudinal, Horizontal Transversal, Vertical Transversal. Introduzca las dispersividades longitudinal, horizontal transversal y vertical transversal en metros. Las dispersividades están definidas por

$$\begin{aligned} D_L &= \alpha_L v \\ D_T &= \alpha_T v \\ D_V &= \alpha_V v \end{aligned} \quad (4.8)$$

donde D_L , D_T y D_V son los coeficientes de dispersión longitudinal, horizontal transversal y vertical transversal; α_L , α_T , y α_V son asimismo las dispersividades longitudinal, horizontal transversal y vertical transversal; y v es la velocidad de flujo en la dirección media de flujo.

El mezclado dispersivo en acuíferos resulta del transporte de solutos a través de medios porosos heterogéneos. Conforme se esparce la estela de contaminante, esta "experimenta" más heterogeneidad y el coeficiente aparente de dispersión aumenta. De esta manera los coeficientes de dispersión, D_L , D_T y D_V no son parámetros fundamentales, sino que presentan una dependencia de escala.

Gelhar et al. (1992) revisaron recientemente las dispersividades determinadas en 59 sitios y consideraron la confiabilidad de los coeficientes de dispersión. Concluyeron que no hay coeficientes de dispersión longitudinal altamente confiables a escalas mayores de 300 m. Es notable que a una escala determinada, se ha encontrado que las dispersividades varían de 2 a 3 ordenes de magnitud, aunque los valores más bajos son más confiables. Con base en estos datos, las dispersividades horizontales transversales son típicamente 1/3 hasta casi 3 ordenes

de magnitud más bajos que las dispersividades longitudinales. Las dispersividades verticales transversales son típicamente (aunque con base en un conjunto muy limitado de datos) 1-2 ordenes de magnitud más bajos que las dispersividades transversales horizontales. Los valores muy bajos de las dispersividades verticales transversales reflejan toscamente una estratificación horizontal de los materiales sedimentarios.

4.6.5 Datos de la Fase de Hidrocarburos (NAPL)

El cuadro de diálogo de **Parámetros de la Fase de Hidrocarburos (NAPL)** (Figura 4.11) contiene datos referentes a la naturaleza del hidrocarburo derramado y de un compuesto de interés.

PROPIEDADES DE LA FASE DE HIDROCARBUROS	
Densidad del NAPL (g/cm ³)	.7200
Viscosidad din. NAPL (cp)	.4500
Solubilidad del Hidrocarburo (mg/l)	10.00
Sat. res. NAPL en Acuífero	.1500
Sat. res. NAPL en Zona vadosa	.5000E-01
Coef. part. suelo/aqua (l/kg)	.8300E-01
Tens. superf. NAPL (dina/cm)	35.00

PROPIEDADES DE COMPUESTOS DISUELTOS	
<input checked="" type="checkbox"/> Existe Compuesto Disuelto	
Conc. inic. comp. en NAPL (mg/l)	8208.
Coef. partición NAPL/agua	311.0
Coef. partición suelo/aqua (l/kg)	.8300E-01
Solubilidad compuesto (mg/l)	1750.
<input type="checkbox"/> Vida med. Compuesto en acuíf.	.0000

DERRAME DE HIDROCARBUROS	
<input checked="" type="radio"/> Flujo especificado	
<input type="radio"/> Volúmen/Área especificado	
<input type="radio"/> Encharcamiento de carga const.	
<input type="radio"/> Encharc. var. desp. carga const.	
Flujo de NAPL (m/d)	.4522
Tiempo de inicio (d)	.0000
Tiempo de terminación (d)	1.000
Profundidad encharcamiento (m)	0
Volúmen/Área del NAPL (m)	0
Prof. inf. zona NAPL (m)	0

Figura 4.11: Cuadro de diálogo de parámetros de la fase de hidrocarburos.

PROPIEDADES DE LA FASE DE HIDROCARBUROS

Densidad del NAPL, ρ (g/cm³) Introduzca la densidad de la fase NAPL en g/cm³. Para simulaciones de OILENS, la densidad del NAPL debe ser menor que la del agua. Se pueden utilizar densidades mayores que la del agua si no se efectúa ninguna simulación de OILENS. En la Tabla 4.6 se dan algunas densidades típicas de NAPL.

Las densidades de los hidrocarburos se expresan a veces por medio de la escala de grados API (*Perry y Chilton, 1973*) adoptada por el American Petroleum Institute. Los grados API se definen como

$$^{\circ}API = \frac{141.5}{masa\ esp.} - 131.5 \quad (4.9)$$

donde masa específica es el peso específico del NAPL medido a 70°F dividido entre la gravedad específica del agua

medida a 60°F. La escala de grados API varía desde 0.0 hasta 100.0 y cubre una gama de gravedades específicas desde 1.076 hasta 0.6112.

Viscosidad dinámica del NAPL, μ (cp) Introduzca la viscosidad de la fase NAPL en centipoise. En la Tabla 4.6 se dan viscosidades típicas de NAPL.

Las densidades y viscosidades de las fases de NAPL y agua se usan en el modelo HSSM-KO para estimar la conductividad hidráulica saturada de la fase NAPL, K_{so} , por

$$K_{so} = K_{sw} \frac{\mu_w}{\mu_o} \frac{\rho_o}{\rho_w} \quad (4.10)$$

donde K_{sw} es la conductividad hidráulica saturada para agua, μ_w y μ_o son las viscosidades de agua y aceite, y ρ_w y ρ_o son las densidades respectivas.

Liquidos	Densidad g/cm ³	Viscosidad cp
Gasolina	0.75	0.45
Agua	1.00	1.00
Combustoleo No. 2	0.87	5.9
Aceite de Transmisión	0.89	80

Tabla 4.6: Densidades y viscosidades de NAPL a 20°C.

Solubilidad del hidrocarburo (NAPL) (mg/l) Introduzca la solubilidad del NAPL en agua en mg/l. Este coeficiente representa la solubilidad de todos los compuestos del NAPL, con excepción del compuesto químico que se simula. La solubilidad del compuesto químico se mete por separado. Además, este valor se usa únicamente por el modelo de una manera considerable cuando se usa un criterio particular de terminación. Por lo tanto, el valor de la solubilidad del NAPL no es un parámetro crítico.

El valor de la solubilidad del NAPL debe ser mayor que cero si se pone en 2. el **Criterio de terminación de Simulación de OILENS** (ver más adelante) "el esparcido de la lente NAPL se para." *Bauman* (1989) estimó que la solubilidad típica de gasolina es del orden de 50 a 200 mg/l.

Saturación residual del Acuífero con NAPL, S Introduzca la saturación residual de la fase NAPL en el acuífero. Vea las notas más adelante para la saturación residual del NAPL en la zona vadosa.

Saturación residual de NAPL en la zona vadosa, S Introduzca la saturación residual de la fase NAPL para la zona vadosa. Por definición, la fase NAPL no fluye con saturaciones iguales o menores a la residual. En este modelo, se supone que la saturación residual de NAPL es una constante conocida. Idealmente, esto se obtendría midiendo la curva de presión capilar NAPL/aire en presencia de la cantidad de agua que llena una porción del espacio poroso. Se reconoce que tratar la saturación residual del NAPL como una constante es una

suposición, ya que en realidad la saturación residual de NAPL puede variar con el gradiente hidráulico y con el tiempo conforme se intemperiza el NAPL (Wilson y Conrad, 1984). Típicamente, la saturación residual del NAPL en la zona vadosa es menor que la del acuífero (con las mismas propiedades del medio). Las saturaciones residuales típicas para hidrocarburos varían de 0.10 a 0.20 en la zona vadosa, y de 0.15 a 0.50 en la zona saturada (Mercer y Cohen, 1990). Estos valores corresponden más estrechamente a la "retención específica", como se emplea el término en la hidrología del agua subterránea, que como residuales verdaderos a valores de presión capilar elevados.

Coefficiente de partición suelo/agua (l/kg) Introduzca el coeficiente de partición de equilibrio lineal entre las concentraciones de la fase del suelo y del agua (c_s y c_w) de la fase de hidrocarburos. Igual que la solubilidad de la fase NAPL, mencionada arriba, este parámetro no es crítico. Este coeficiente se usa para estimar la partición de las fracciones disueltas del NAPL (p. ej., todas las sustancias químicas del NAPL con excepción del compuesto químico de interés). Para mayor información sobre la partición véase la discusión más adelante para el coeficiente de partición del compuesto suelo/agua.

Tensión superficial del NAPL, σ (dina/cm) Introduzca la tensión superficial del NAPL en dina/cm. La Tabla 4.7 muestra valores típicos de tensión superficial para varios productos del petróleo.

Líquido	Tensión superficial (dina/cm)
Gasolina	26
Kerosena	25-30
Gas oil	25-30
Fracciones de lubricantes	34
Combustoleos	29-32

Tabla 4.7: Tensiones superficiales de varios combustibles (Wu y Hottel, 1991).

PROPIEDADES DE COMPUESTOS DISUELTOS

Existe compuesto disuelto Marque este cuadro si se deberán llevar a cabo cálculos para un compuesto disuelto. Normalmente, esto se verificará para una simulación completa de transporte del modelo HSSM hacia un punto receptor.

Concentración inicial del compuesto en el NAPL, c () (mg/l) Introduzca la concentración inicial de la sustancia química disuelta en la fase NAPL en mg/l. El modelo HSSM idealiza el sistema de fase múltiple/multicomponente como consistente de una fase NAPL que contiene alguna fracción pequeña de un compuesto disuelto. El compuesto disuelto puede partirse entre los fluidos y el sólido. Aquí se introduce la concentración del compuesto químico en el NAPL. Por ejemplo, el benceno forma el 1.14% por masa de la mezcla idealizada de gasolina usada por (Baehr y Corapcioglu, 1987). La concentración inicial del benceno (el compuesto químico) en la gasolina (el NAPL o "el petróleo") esta dada por

$$C_b = f_b \rho_g \quad (4.11)$$

donde C_b es la concentración del benceno en la gasolina, f_b es la fracción de masa del benceno en la gasolina, ρ_g es la densidad de la gasolina. Por lo tanto

$$C_b \text{ (g/cm}^3\text{)} = \frac{1.14\%}{100} (0.73\text{g/cm}^3) = 0.0083\text{g/cm}^3 \quad (4.12)$$

Al convertir la concentración de la gasolina a las unidades requeridas se obtiene

$$C_b(\text{mg/l}) = C_b(\text{g/cm}^3) \left(\frac{1000\text{cm}^3}{\text{l}} \right) \left(\frac{1000 \text{ mg}}{\text{g}} \right) = 8300\text{mg/l} \quad (4.13)$$

Coefficiente de partición NAPL/agua, k Introduzca el coeficiente de partición de equilibrio lineal entre el NAPL y las concentraciones de la fase agua del compuesto químico. Por definición

$$c_o = k_o c_w \quad (4.14)$$

donde k_o es el coeficiente de partición adimensional entre las concentraciones de la fase NAPL (c_o) y la fase de agua (c_w) del compuesto químico. La k_o difiere para cada compuesto químico del NAPL. Por ejemplo, los coeficientes de partición medidos, k_o para benceno, tolueno, etilbenceno y o-xileno fueron 350, 1250, 4500 y 3630 en un estudio publicado por *Cline et al.* (1991). La partición de cada compuesto entre la fase NAPL y la fase acuosa también depende de la composición del NAPL. La estimación de k_o se discute en el Apéndice C.2 "Coeficiente de Partición NAPL/Agua." En el Apéndice G se describe un programa de utilería denominado RAOULT para efectuar los cálculos necesarios.

Coefficiente de partición Suelo/Agua, k (l/kg) Introduzca el coeficiente de partición de equilibrio lineal en litros por kilogramo entre el suelo y las concentraciones de la fase agua (c_s y c_w) del compuesto. Por definición

$$c_s = k_d c_w \quad (4.15)$$

donde k_d es el coeficiente en litros por kilogramo entre la fase sólida (c_s) y las concentraciones de la fase agua (c_w). k_d se estima generalmente a partir de la fracción de carbón orgánico del medio, f_{oc} , y el coeficiente de partición del carbón orgánico, k_{oc} como

$$k_d = f_{oc} k_{oc} \quad (4.16)$$

La Tabla C.7 en el Apéndice C enumera valores de k_{oc} para varios hidrocarburos.

Solubilidad del compuesto, s (mg/l) Introduzca la solubilidad en agua del compuesto químico en mg/l. La solubilidad introducida aquí es la solubilidad del “compuesto puro” que se tabula en varias fuentes (p. ej., *Mercer et al.* (1990); *Sims et al.* (1991); *U.S. Environmental Protection Agency* (1990)). En la Tabla C.7 se dan varios valores. La solubilidad se usa en el modelo HSSM para limitar la concentración de la fase agua. Si se seleccionan valores de k_o en forma apropiada (que implican concentraciones máximas de la fase acuosa mucho menores que las solubilidades de la fase pura) se hace este parámetro redundante para los NAPL compuestos de mezclas de compuestos químicos.

Vida media del compuesto en el acuífero (d) Introduzca la vida media del compuesto en el acuífero y marque el cuadro. Si no se marca el cuadro, el modelo HSSM-WIN pasa un valor muy grande al modelo, ocasionando que no haya decaimiento en el modelo TSGPLUME. Este valor se usa únicamente en el modelo TSGPLUME.

DERRAME DE HIDROCARBURO (NAPL)

El cuadro de Derrame de Hidrocarburo define, en parte, la condición de frontera para la simulación. Se proporcionan cuatro opciones para especificar la manera en que el NAPL entra al subsuelo. No se necesitan todos los parámetros del derrame para cada opción de derrame; los parámetros necesarios para la opción seleccionada son realizados por el modelo HSSM-WIN para la introducción de los valores específicos.

Opciones para el Derrame

Flujo especificado Especifica un flujo constante de NAPL, correspondiente a una velocidad conocida de aplicación de NAPL a la superficie del terreno por un intervalo de tiempo especificado. Se supone que el NAPL en exceso escurre en la superficie.

Volumen/área especificado Especifica un volumen por unidad de área de NAPL aplicado sobre una cierta profundidad. Esto resulta en un volumen fijo aplicado en forma instantánea, correspondiendo a un sistema de tratamiento de tierras o un relleno sanitario.

Encharcamiento a carga constante Especifica un encharcamiento a carga constante para una duración especificada. La profundidad de carga de encharcamiento pasa a cero en forma abrupta al final del derrame. Esta condición se usa para simular, por ejemplo, la ruptura de un tanque de hidrocarburos confinado dentro de una berma.

Encharcamiento variable después de un período de encharcamiento de carga constante Especifica un encharcamiento de carga constante para una duración especificada, seguido por una disminución gradual a cero carga conforme se infiltra el NAPL.

Parámetros del Derrame

Flujo de NAPL, q (m/d) Introduzca el flujo constante de NAPL en metros por día. Se supone que los flujos de la fase NAPL en exceso de la conductividad máxima efectiva de la fase de petróleo escurren superficialmente.

Tiempo de inicio (d) Introduzca el tiempo de inicio del derrame de NAPL en días. Generalmente, este es cero.

Tiempo de Terminación (d) Introduzca el tiempo de terminación del derrame de NAPL en días o el tiempo de terminación del encharcamiento de carga constante.

Profundidad de encharcamiento, H (m) Introduzca la profundidad de encharcamiento de carga constante en metros.

Volumen/área del petróleo (m^3/m^2) o (m) Introduzca el volumen de la fase NAPL por unidad de superficie que se coloca, ya sea en una instalación de tratamiento superficial o un relleno sanitario.

Profundidad inferior de la zona de NAPL (m) Introduzca la profundidad del fondo de la zona contaminada en metros.

4.6.6 Datos de Simulación del Modelo

La ventana de diálogo de los **Parámetros de Simulación del Modelo** (Figura 4.12) contiene datos que controlan las simulaciones, tales como los tiempo de inicio y terminación, número y localización de pozos, etc.

PARAMETROS DE CONTROL DE SIMULACION

Radio de la lente de petróleo en la fuente, R (m) Introduzca el radio de la fuente de contaminante en metros. Cuando no se desee la simulación de OILENS (La corrida de OILENS no se selecciona en la ventana de diálogo de Parámetros Generales del Modelo), se puede efectuar una simulación *por unidad de área*, introduciendo 0.5642 como radio de la fuente. El área resultante de la fuente es 1.0 m^2 .

Factor de multiplicación del radio Se sugiere un valor de 1.001 para el factor de multiplicación del radio (FMR). El FMR se usa para multiplicar el radio de la fuente para iniciar el modelo OILENS. Esto es necesario, ya que las ecuaciones de OILENS son singulares en el radio de la fuente. Al iniciar la simulación a una pequeña distancia del radio verdadero, se evita esta singularidad. Sin embargo, este procedimiento, introduce un error de balance de masa en la solución, de manera que se deberá usar el valor mínimo para FMR que permita proceder con la simulación. En ningún momento el valor de FMR deberá exceder 1.1. Cuando se encuentre la singularidad, el modelo OILENS presentará el siguiente mensaje de error

SE ENCONTRO SINGULARIDAD DE OILENS, AUMENTE FMR

Entonces se deberá incrementar el FMR, y probar nuevamente la simulación.

Si persiste este problema, asegúrese que se haya incluido la fluctuación del nivel freático en la simulación, empleando un valor apropiado del parámetro de espesor capilar (página 38).

Parámetros de Simulación

PARAMETROS DE CONTROL DE SIMULACION		Archivo:	<input type="button" value="ACEPTAR"/>
Radio fuente de la lente NAPL (m).	2.000	C:\MODELO\HSSM\X2BT.DAT	<input type="button" value="CANCELAR"/>
Factor de multiplicación del radio.	1.001	<input checked="" type="checkbox"/> Activar comprobación de rango	
Sat. máx. NAPL en lente NAPL.	.3236	PERFILES DE LA LENTE	
Tiempo term. simulación (d)	2500.	Introduzca tiempo (d) para cada uno de hasta 10 perfiles	
Interv. máx. tiempo solución (d)	20.00		1 100.0
Tiempo mínimo entre intervalos de tiempo impresos (d)	.1000		2 200.0
Criterio de terminación de Simulación OILENS <input type="radio"/> Tiempo especificado por usuario <input type="radio"/> Esparcido de la lente NAPL se para <input type="radio"/> Flujo máx. masa contaminante al acuífero <input checked="" type="radio"/> Contaminante lixiviado de la lente Fracción de masa remanente.1000E-01			3 3.000
			4 5.000
			5 10.00
			6 20.00
			7
		Número de perfiles	8
			9
			10
PARAMETROS DEL MODELO HSSM-T		LOCALIZACION POZOS RECEPTORES	
Porc. máx. radio contam. (%)	101.0	Introduzca coordenadas para cada uno de hasta de 6 pozos	
Concentración min. de salida (mg/l)	.1000E-02		1 25.00 .0000
Tiempo de inicio (d)	100.0		2 50.00 .0000
Tiempo de terminación (d)	5000.		3 100.0 .0000
Incremento de tiempo (d)	50.00	Número de pozos	4 150.0 .0000
			5
			6

Figura 4.12: Cuadro de diálogo para datos de simulación del modelo.

Saturación máxima de NAPL en la lente NAPL, S^* Introduzca la saturación de la fase NAPL en la lente. En el modelo HSSM, la lente se idealiza como una lente uniformemente saturada, aunque en realidad la saturación de NAPL varía dentro de la lente. El espesor de la lente en el modelo HSSM representa la relación del volumen de la lente con su área. La estimación de la saturación de la lente de NAPL se discute en el Apéndice C.3, y en el Apéndice H se describe una utilidad denominada NTHICK para efectuar los cálculos necesarios.

Tiempo de terminación de la simulación (d) Introduzca el tiempo de terminación de la simulación en días. Este debe especificarse siempre, aunque se disponga de otras opciones para parar y que puedan sobrepasar el tiempo máximo de simulación.

Intervalo máximo de tiempo de solución (d) Introduzca el intervalo máximo de tiempo de solución en días. Este debería especificarse tan alto como sea posible, aunque las rutinas internas de corrección de errores limitarán con frecuencia el tamaño real del intervalo tomado. Generalmente son aceptables valores de hasta 25 días. Los intervalos demasiado grandes pueden introducir errores de balance de masa en los resultados del modelo.

Tiempo mínimo entre intervalos de tiempo impresos y comprobaciones de balance de masa (d) Introduzca el tiempo mínimo entre intervalos de tiempo impresos en días. Aunque el modelo usa una solución de ecuación diferencial ordinaria de intervalo de tiempo variable, a veces durante la simulación el modelo HSSM toma intervalos de tiempo muy pequeños. Los resultados de estos intervalos son de poca utilidad y aumentan dramáticamente el tamaño de los archivos de salida. Este parámetro evita la salida de cada intervalo de solución y debería fijarse entre 0.1 o 0.25 días. Este parámetro no afecta la simulación misma, sino que únicamente la

información de salida.

Para la mayoría de las sustancias químicas que se lixivian de la lente, después de que haya pasado el pico del flujo de masa al acuífero, existe un periodo de tiempo relativamente largo cuando el flujo de masa al acuífero declina lentamente. Durante este período de tiempo, el tiempo mínimo fijado por el usuario entre los intervalos de tiempo impresos puede sobrepasarse a fin de reducir el tamaño de los archivos de salida y de gráficas. Se agrega un criterio adicional de que el flujo de masa debe cambiar por lo menos en 1.0 por ciento para que se saquen los resultados. Esta característica no se puede sobrepasar por el usuario.

Criterio para la terminación de la simulación de OILENS El criterio para la terminación de la simulación de OILENS determina como termina la simulación de HSSM-KO. En vista de que no es posible predecir cuando ocurrirán ciertos eventos durante la simulación, varias de las opciones ocasionan la terminación de la simulación únicamente después de que haya ocurrido el evento de interés. En estos casos se sobrepasa de tiempo especificado por el usuario y la simulación continúa hasta que ocurra el suceso.

NOTA: Para usar el modelo HSSM-T se deberá seleccionar la cuarta opción, "Contaminante lixiviado de la lente".

1. **Tiempo especificado por el usuario** Se detiene en el tiempo de terminación de simulación especificado arriba.
2. **Se para el esparcido de la lente NAPL** Se para la simulación cuando se detiene el esparcido de la lente NAPL. Si no se forma ninguna lente NAPL antes del tiempo especificado de terminación, entonces se detiene la simulación en el tiempo especificado de terminación. Si se forma una lente, el tiempo de terminación se sobrepasa y la simulación continúa hasta que se detenga el esparcido de la lente NAPL. Cuando la solubilidad de fase NAPL está cercana a cero, es posible que, en el modelo, el movimiento de la lente no pueda parar nunca, ya que la teoría cinemática predice que se requiere una cantidad de tiempo infinito para que todo el NAPL pase a una profundidad determinada. El NAPL gotea hacia la lente durante la simulación, y el movimiento de la lente de NAPL se detiene cuando el flujo hacia la lente cae debajo del flujo de disolución NAPL al acuífero. Si la solubilidad del NAPL es cero y no se simula ningún compuesto químico, ningún NAPL es disuelto y el movimiento puede continuar en forma indefinida. Para evitar este problema, se requiere para esta situación *una solubilidad de NAPL diferente de cero* (vea Parámetros de la Fase de Hidrocarburos).
3. **Flujo máximo de masa contaminante al acuífero** Se detiene la simulación cuando ocurra el flujo máximo del compuesto químico hacia el acuífero. Si no se forma ninguna lente de NAPL antes del tiempo de terminación especificado, la simulación se detiene en el tiempo de terminación especificado. Si se forma una lente, se sobrepasa el tiempo de terminación y la simulación continúa hasta que ocurra el flujo de masa máximo.
4. **El contaminante lixiviado de la lente se reduce abajo de una fracción dada de la masa total en la lente** Se detiene la simulación cuando la masa contaminante en la lente NAPL cae abajo de una fracción de la masa máxima contaminante que había estado contenida dentro de la lente durante toda la simulación. La fracción es especificada por el usuario. Si no se forma ninguna lente de NAPL antes del tiempo de terminación especificado por el usuario (arriba), la simulación se detiene en el tiempo especificado.

Fracción remanente de masa Introduzca el criterio de detención del factor masa para el criterio de terminación anterior 4. "Contaminante lixiviado de la lente". Se deberá usar un dos por ciento (0.02) o menos para este factor.

PARAMETROS DEL MODELO TSGPLUME

Los siguientes valores de parámetro se usan únicamente en el modelo TSGPLUME.

Porcentaje máximo del radio de contaminante (%) Introduzca el porcentaje del radio máximo de contaminante que deberá emplearse en la simulación de TSGPLUME, que requiere un radio constante para el flujo de masa de entrada.

Ya que el radio de la lente de NAPL cambia en forma continua durante parte de la simulación, puede no ser posible preseleccionar un radio apropiado de la lente para el módulo TSGPLUME. Sin embargo, es deseable ajustar el radio de la lente al flujo pico de masa hacia el acuífero. De esta manera la simulación de TSGPLUME puede usar el radio que ocurre en el tiempo de flujo máximo de masa. Con este enfoque el flujo de masa no se diluye demasiado debido a un radio grande de la lente. (Ni se "condensa" debido a un radio demasiado pequeño). El radio de la lente que ocurre al tiempo del flujo máximo de masa se selecciona automáticamente si se introduce 101 para el porcentaje máximo del radio de contaminante. De esta manera, el valor recomendado de este parámetro es 101. Puede ser deseable para los usuarios determinar el efecto de variar el tamaño de la fuente sobre las concentraciones en el acuífero.

Concentración mínima de salida (mg/l) Introduzca la concentración mínima (mg/l) que deberá incluir el módulo TSGPLUME en la salida. Las concentraciones inferiores a este valor se reportarán como cero. Se requiere un valor no igual a cero de este parámetro para una ejecución apropiada del módulo TSGPLUME. Típicamente, una concentración de 0.001 mg/l es apropiada para la concentración mínima.

Tiempo de iniciación (d) Introduzca el tiempo de iniciación en días para la simulación de TSGPLUME. Vea nota abajo.

Tiempo de terminación (d) Introduzca el tiempo de terminación en días para la simulación de TSGPLUME. Vea nota abajo.

Incremento de tiempo (d) Introduzca el incremento de tiempo en días para la salida del módulo TSGPLUME entre los tiempos de inicio y terminación especificados arriba. Típicamente, un valor de 50 o 100 días es adecuado para el incremento de tiempo.

NOTA: Antes de correr el modelo, no es posible adivinar con precisión cuando llega el contaminante en o pasa un punto receptor determinado. El modelo HSSM-T sobrepasará los tiempos de inicio y terminación establecidos por el usuario, lo que le permite al modelo producir historias de concentración suaves continuas en el punto receptor. Se ha hecho un esfuerzo especial en el modelo HSSM-T para calcular cuando llega el contaminante primero al punto receptor y cuando la concentración pico. La duración del flujo de masa hacia el acuífero se usa para determinar un incremento de tiempo propuesto para la salida del modelo HSSM-T. Si la centésima parte de la duración del flujo de masa de entrada es mayor que el incremento de tiempo especificado por el usuario, se le propone al usuario aumentar el incremento de tiempo:

*** TSGPLUME RECOMIENDA CAMBIAR EL INCREMENTO DE TIEMPO
*** DE 0.5000 DIAS A 98.60 DIAS
*** ACEPTA EL CAMBIO ? (S O N)

El modelo HSSM-T hace al usuario una oferta que no debería rehusar, por lo menos para una simulación inicial. Si la curva de historia de concentración resultante no es suficientemente continua, el usuario puede reducir el incremento de tiempo para que el modelo HSSM-T produzca un espaciado más fino en el tiempo. Si el usuario no acepta el cambio, se le propone decidir entre el incremento original de tiempo o introducir un nuevo incremento de tiempo.

PERFILES DE LA LENTE NAPL

Número de perfiles Introduzca el número de perfiles de saturación de KOPT vs profundidad (Gráfica de **Perfiles de Saturación**) y el espesor de la lente OILENS vs. el radio (Gráfica de **Perfiles de Lente NAPL**). Ambos se producen en los tiempos especificados junto con las aproximaciones de balance de masa. Se permiten hasta diez perfiles.

Perfiles de tiempo Introduzca hasta diez tiempos de perfil en días. El número de entradas se truncará automáticamente para ajustar el valor de **Número de perfiles** mencionado arriba.

LOCALIDADES RECEPTORAS

Estos valores se usan únicamente para el modelo TSGPLUME.

Número de pozos Introduzca el número de pozos (un máximo de seis) para el cual TSGPLUME deberá calcular la concentración vs el tiempo para la gráfica de **Concentraciones en Pozos**.

Ubicación de pozos Introduzca hasta seis localizaciones de pozos, como coordenadas X y Y en metros. X es la dirección a lo largo de eje longitudinal de la estela (la dirección del flujo del agua subterránea) y Y tiene dirección transversal al eje X. El origen del sistema de coordenadas se localiza en el centro de la fuente (véase Figura 2.6). El número de entradas será truncado dependiendo del **Número de pozos** mencionado arriba.

4.7 Corrida de los Módulos KOPT, OILENS y TSGPLUME

Este Inciso describe la operación de los módulos HSSM-KO y HSSM-T. Estos programas son el corazón del modelo de simulación. Ambos módulos son programas DOS que son ejecutados seleccionando los conceptos del menú HSSM-WIN. Una vez que se haya creado un archivo de datos de entrada, se ejecuta el módulo HSSM-KO, seleccionando el concepto de menú "Correr HSSM-KO" (3a en Tabla 4.3). La Figura 4.13 muestra la primera pantalla que aparece cuando se ejecuta HSSM-KO. Esta pantalla identifica el modelo y los autores. Oprimiendo la tecla de retorno, se presenta la pantalla de declaraciones (Figura 4.14). Tome nota cuidadosa de los mensajes de prevención. Se requiere de un juicio científico e ingenieril sano para aplicar los modelos y el usuario es responsable de la aplicación del modelo.

En la Figura 4.15 se presenta una lista los nombres de archivo usados por HSSM-KO y HSSM-T. Los nombres deben seguir una convención estricta de nombramiento para que el módulo TSGPLUME (HSSM-T) y el post-procesador funcionen adecuadamente. La Tabla 4.8 da los nombres de archivo requeridos. Para conveniencia del

```

*****
*
*                               *
*                               *
*                               *
*      MODELO DE REVISION DE DERRAMES DE HIDROCARBUROS      *
*                               *
*      INCLUYENDO LOS MODELOS KOPT, OILENS Y TSGPLUME        *
*                               *
*                               *
*      JAMES W. WEAVER                                         *
*      UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY          *
*      R.S. KERR ENVIRONMENTAL RESEARCH LABORATORY            *
*      ADA, OKLAHOMA 74820                                     *
*                               *
*      SE INCLUYE EL MOVIMIENTO DE LA LENTE DE               *
*      ACEITE--HIDROCARBURO SOBRE EL NIVEL FREATICO          *
*                               *
*      RANDALL CHARBENEAU, SUSAN SHULTZ, MIKE JOHNSON        *
*      ENVIRONMENTAL AND WATER RESOURCES ENGINEERING          *
*      THE UNIVERSITY OF TEXAS AT AUSTIN                       *
*                               *
*                               *
*      VERSION 1.10                                           *
*                               *
*****

```

Figura 4.13: Pantalla introductoria de HSSM-KO.

usuario los nombres de archivo correctos se generan automáticamente por cualesquiera de las interfaces. Estos no deberían ser modificados por el usuario.

Como se resume en la Tabla 4.8, hay ocho archivos asociados a cada simulación, cada uno con el mismo prefijo (ocho caracteres o menos) pero con extensiones diferentes (tres caracteres). *.DAT identifica un archivo de datos, que es editado por HSSM-WIN o PRE-HSSM y que se lee por el programa HSSM-KO como un archivo de entrada. El módulo HSSM-KO genera hasta otros cinco archivos: *.HSS, *.PL1, *.PL2, *.PL3 y *.PMI. Los archivos de gráficas, *.PL1, *.PL2, y *.PL3 contienen datos que usan los programas HSSM-WIN o HSSM-PLT para generar gráficas, y el archivo de salida *.HSS, contiene datos cuidadosamente formateados y etiquetados como referencia. EL modelo HSSM-KO produce opcionalmente el archivo *.PMI, que es un archivo de entrada para el programa HSSM-T. El modelo HSSM-T en sí produce dos archivos similares: *.PMP (un archivo de gráficas), y *.TSG (un archivo de texto formateado).

Como se indica en la Figura 4.15, el usuario puede ya sea correr HSSM-KO ó salirse de el programa. Al iniciar una simulación, el modelo escribe mensajes en la pantalla conforme avanzan los cálculos. Estos permiten al usuario seguir la simulación. La Figura 4.16 contiene un conjunto típico de mensajes de pantalla para una simulación.

Al terminar la simulación de HSSM-KO, la ventana de DOS permanece abierta de manera que cualquier mensaje de error permanezca sobre la pantalla. La ventana se cierra al marcar con el ratón sobre su menú de sistema (esquina superior izquierda) y seleccionar salir.

La implementación HSSM-T de TSGPLUME esta diseñada para que se use con HSSM-KO. Si el conjunto de datos para HSSM-KO tiene los interruptores puestos de una manera apropiada, y si el compuesto químico disuelto de interés llega al nivel freático (ya sea mediante la formación de una lente NAPL o por lixiviado de una cuerpo de NAPL inmovilizado en la zona vadosa), entonces se crea un conjunto de datos de entrada para

```

*****
*                               ADVERTENCIA:                               *
* ESTE PROGRAMA SIMULA EL COMPORTAMIENTO IDEALIZADO                       *
* DE CONTAMINANTES DE FASE ACEITOSA EN MEDIOS POROSOS                     *
* IDEALIZADOS, Y NO SE PRETENDE SU APLICACION A                           *
* SITIOS HETEROGENEOS.                                                    *
* LOS RESULTADOS DEL MODELO NO HAN SIDO VERIFICADOS                       *
* POR ESTUDIOS DE LABORATORIO NI DE CAMPO.                                *
* LEA LA GUIA DEL USUARIO PARA MAYOR INFORMACION                          *
* ANTES DE TRATAR DE USAR ESTE PROGRAMA.                                  *
* NI LOS AUTORES, LA UNIVERSIDAD DE TEXAS, NI EL                         *
* GOBIERNO DE LOS ESTADOS UNIDOS ACEPTAN CUALQUIER                     *
* RESPONSABILIDAD COMO RESULTADO DEL USO DEL                              *
* CODIGO. LA U.S. E.P.A NO ENDOSA OFICIALMENTE                            *
* EL USO DE ESTE CODIGO.                                                  *
*****

```

Figura 4.14: Pantalla de declaraciones.

```

NOMBRES DE ARCHIVOS DE SALIDA Y DE GRAFICAS:
ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA DE HSSM-KO  BENZENE.DAT
SALIDA DE HSSM-KO                        BENZENE.HSS
GRAFICA 1 DE HSSM-KO                     BENZENE.PL1
GRAFICA 2 DE HSSM-KO                     BENZENE.PL2
GRAFICA 3 DE HSSM-KO                     BENZENE.PL3
ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA DE HSSM-T  BENZENE.PMI
SALIDA DE HSSM-T                        BENZENE.TSG
GRAFICA DE HSSM-T                       BENZENE.PMP

PARA CORRER HSSM-KO                      MARQUE <RETORNO>
PARA SALIRSE                             MARQUE 1

```

Figura 4.15: Nombre de archivos de salida y opciones de corrida.

TSGPLUME al correr HSSM-KO. Las banderas necesarias y las condiciones necesarias para la generación del archivo de datos de TSGPLUME se resumen en la Tabla 4.9. Estos parámetros se describen en detalle en el Inciso 4.6.6

Una vez que se haya corrido HSSM-KO y se haya producido un archivo de entrada de HSSM-T, podrá ejecutarse HSSM-T seleccionando el concepto de Correr HSSM-T del menú (3b en Tabla 4.3). Cuando se ejecute HSSM-T, aparecerán mensajes en la pantalla como se muestran en la Figura 4.17. Después de oprimir retorno, aparecerán los nombres de archivo para la simulación como se indica en la Figura 4.18.

Cuando se ejecuta HSSM-T, se escribe un conjunto de mensajes sobre la pantalla (Figura 4.19). Estos mensajes informan al usuario sobre el avance de la simulación. El ejemplo mostrado tiene solo una localidad receptora; cuando se usen más receptores, se producirán más mensajes como estos.

Al terminar la simulación de HSSM-T, la ventana de DOS permanece abierta de manera que cualquier mensaje de error permanezca en la pantalla. La ventana se cierra marcando con el ratón el menú del sistema (esquina superior izquierda) y seleccionando salir.

Extensión	Creado por	Usado por	Objetivo
.DAT	HSSM-WIN ó PRE-HSSM	HSSM-KO	entrada de datos
.PMI	HSSM-KO	HSSM-T	entrada de datos
.HSS	HSSM-KO	el usuario	salida de texto
.TSG	HSSM-T	el usuario	salida de texto
.PL1	HSSM-KO	HSSM-WIN ó HSSM-PLT	datos para gráficas
.PL2	HSSM-KO	HSSM-WIN ó HSSM-PLT	datos para gráficas
.PL3	HSSM-KO	HSSM-WIN ó HSSM-PLT	datos para gráficas
.PMP	HSSM-T	HSSM-WIN ó HSSM-PLT	datos para gráficas

Tabla 4.8: Archivos usados por las interfaces de HSSM.

```

*** ENTRADA DE DATOS
*** INICIALIZACION DE DATOS
*** INICIO DE LA SIMULACION
*** INFILTRACION DEL PETROLEO
*** REDISTRIBUCION DEL PETROLEO
*** COMPUESTO QUIMICO LLEGA AL NIVEL FREATICO
*** SE FORMA LENTE DE PETROLEO
*** PERFIL A LOS      15.00 DIAS
*** PERFIL A LOS      30.00 DIAS
*** PERFIL A LOS      90.00 DIAS
*** PERFIL A LOS     130.00 DIAS
*** PERFIL A LOS     175.00 DIAS
*** FIN DE SIMULACION
*** POST-PROCESADO
*** CREANDO ARCHIVO DE SALIDA:
*** BENZENE.HSS
*** PROCESANDO CONTENIDO DEL ARCHIVO DE GRAFICAS
*** REEMPACANDO ARCHIVO 18
*** REEMPACANDO ARCHIVO 19
*** CREANDO ARCHIVO DE GRAFICA DE KOPT/OILENS:
***   BENZENE.PL1
*** CREANDO ARCHIVO DE GRAFICA DE KOPT/OILENS:
***   BENZENE.PL2
*** CREANDO ARCHIVO DE GRAFICA DE KOPT/OILENS:
***   BENZENE.PL3
*** CREANDO ARCHIVO DE DATOS PARA TSGPLUME:
***   BENZENE.PMI
*** FIN DE HSSM

```

Figura 4.16: Mensajes de pantalla típicos de HSSM-KO.

Condición del interruptor	Cuadro de Diálogo	Efecto
<input checked="" type="checkbox"/> Crear archivos de salida	General	Produce archivos de salida y de gráficas
<input checked="" type="checkbox"/> Correr KOPT	General	Corre el módulo KOPT
<input checked="" type="checkbox"/> Correr OILENS	General	Corre el módulo OILENS
<input checked="" type="checkbox"/> Existe compuesto disuelto	Fase de Hidrocarburo	Compuesto químico incluido en la simulación.
<input checked="" type="checkbox"/> Escribir archivo de entrada de HSSM-T	General	Intenta crear datos de entrada de TSGPLUME (HSSM-T.EXE).
Criterio de terminación de la Simulación de OILENS	Parámetros de simulación	Termina simulación de HSSM-KO.EXE cuando se queda una pequeña fracción del compuesto químico en la lente de petróleo.
<input type="radio"/> Contaminante lixiviado de la lente		
Tiempo "largo" de terminación de simulación	Parámetros de Simulación	Permite un tiempo suficiente de simulación para que el compuesto químico llegue al nivel freático antes de terminar la simulación.

Tabla 4.9: Interruptores de datos de HSSM-KO para la creación de archivos de datos de entrada TSGPLUME (HSSM-T).

```

*****
*
*           TSGPLUME
*
*   MODELO DE ESTELA GAUSSIANA DE FUENTE TRANSITORIA
*
*
*           MIKE JOHNSON
*           RANDALL CHARBENEAU
*           THE UNIVERSITY OF TEXAS AT AUSTIN
*
*           JIM WEAVER
*   ROBERT S. KERR ENVIRONMENTAL RESEARCH LABORATORY
*   UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY
*
*           VERSION 1.00
*****

```

Figura 4.17: Pantalla introductoria de HSSM-T.

NOMBRES DE ARCHIVOS DE SALIDA Y DE GRAFICAS:

HSSM-KO	ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA	BENZENE.DAT
HSSM-KO	SALIDA	BENZENE.HSS
HSSM-T	ENTRADA	BENZENE.PMI
HSSM-T	SALIDA	BENZENE.TSG
HSSM-T	GRAFICA	BENZENE.PMP

PARA CORRER TSGPLUME	MARQUE <RETORNO>
PARA SALIR	MARQUE 1

Figura 4.18: Nombres de archivos de salida de HSSM-T y opciones de corrida.

```
*** ENTRADA DE DATOS
*** INICIALIZACION DE DATOS
*** CALCULANDO PRECISION DE PUNTO FLOTANTE
***
*** INICIO DE COMPUTACION PARA RECEPTOR      1
*** CALCULANDO EL TIEMPO DEL TALON DE LA HISTORIA
*** ALGORITMO DE BUSQUEDA TERMINADO EN 6 ITERACIONES
*** CALCULO TERMINADO A LOS  18.18    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  18.44    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  33.41    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  48.38    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  63.35    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  78.32    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  83.32    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  88.32    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  93.32    DIAS
```

(se omiten los otros mensajes similares)

```
*** CALCULO TERMINADO A LOS  553.3    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  603.3    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  653.3    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  703.3    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  753.3    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  803.3    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  853.3    DIAS
***
*** ARCHIVO DE SALIDA:
***   BENZENE1.TSG
*** ARCHIVO DE GRAFICA:
***   BENZENE1.PMP
*** FIN DE TSGPLUME
```

Figura 4.19: Mensajes típicos de pantalla de HSSM-T.

4.8 Presentación Gráfica de la Salida de HSSM

Se pueden generar automáticamente seis gráficas a partir de una simulación exitosa de HSSM. Estas gráficas proporcionan un resumen visual de los resultados de la simulación e incluyen información de cada uno de los tres módulos de HSSM. La Tabla 4.10 da información acerca de cada una de las gráficas que se proporcionan.

Título	Módulo de HSSM	Descripción
Perfiles de saturación	KOPT	Saturaciones de líquido de la zona vadosa desde la superficie hasta el nivel freático
Perfiles de la lente NAPL	OILENS	Sección transversal de la lente de NAPL sobre el nivel freático
Historia del radio de la lente NAPL	OILENS	Historia del radio de la lente NAPL y radio efectivo del contaminante
Historia del flujo de masa del contaminante	OILENS	Historia del flujo de masa desde la lente NAPL hacia el acuífero
Balance de masa contaminante de la lente NAPL	OILENS	Historia de la masa en la lente NAPL
Historias de concentración de los receptores	TSGPLUME	Historia de las concentraciones de contaminante en los puntos receptores

Tabla 4.10: Gráficas de HSSM.

En los Incisos siguientes se describe cada una de las gráficas junto con una figura ejemplo.

4.8.1 Perfiles de Saturación

Los perfiles de saturación (Figura 4.20) representan la distribución simulada de fluidos en la zona vadosa. La zona asciurada a la izquierda representa la supuesta saturación uniforme de agua. Entre la saturación de agua y "1.0" se grafican los perfiles de NAPL. Los perfiles se crean en los tiempos de perfilado seleccionados por el usuario antes de correr el modelo. Los tiempos de perfilado se enumeran sobre la parte inferior derecha de la figura. Los tiempos corresponden a los perfiles graficados de la derecha a la izquierda (es decir, el perfil mas exterior corresponde a el tiempo más temprano). Puede resultar que los tiempos de perfilado no queden graficados a tiempos convenientes para la exhibición de los resultados. El usuario podrá desear volver a correr el modelo con tiempos modificados a fin de producir una secuencia deseada de perfiles.

4.8.2 Perfiles de la Lente NAPL

La gráfica del perfil de la lente (Figura 4.21) ilustra la configuración de la lente a los tiempos de perfilado seleccionados por el usuario. La gráfica ilustra la configuración de la lente en la vecindad del nivel freático (eje vertical). El nivel freático esta indicado por la línea horizontal. El eje horizontal muestra el radio de la lente que se inicia en la fuente (radio = 0.0) hasta cierta distancia más allá de el borde de la lente. La línea vertical desde la parte superior hacia la lente indica la contaminación en la zona vadosa debido a la fuente. Los perfiles de saturación dan la variación en el tiempo de la saturación dentro de esta región. El cuerpo lenticular muestra la configuración del NAPL que se esta esparciendo activamente. Las áreas asciuradas (que son apenas visibles

en este ejemplo) indican la región de las zonas vadosa y saturada donde hay NAPL residual. Estas regiones se desarrollan conforme se forma la lente NAPL y luego decae. Para pasar a través de la secuencia de perfiles de la lente, marque con el ratón sobre los botones de flecha en la parte superior izquierda de la gráfica.

4.8.3 Historia del Flujo de Masa Contaminante

La historia del flujo de masa contaminante (Figura 4.22) muestra el flujo de masa del contaminante hacia el acuífero como una función del tiempo. Este flujo de masa se usa como condición de frontera de entrada para HSSM-T. Conforme se forma la lente NAPL, el flujo de masa hacia el acuífero se incrementa rápidamente, debido al radio creciente de la lente NAPL. Si se corta la fuente, como ocurre en este ejemplo, el flujo de masa hacia el acuífero declina debido a la lixiviación del contaminante hacia el acuífero. Típicamente, el flujo de masa muestra un efecto de "coleo". De hecho, si esta gráfica no muestra un descenso del flujo de masa hacia el acuífero, entonces el flujo de masa de entrada hacia HSSM-T quedó truncado y los resultados de HSSM-T son probablemente erróneos.

4.8.4 Historia del Radio de NAPL

La historia del radio de la lente de NAPL muestra el radio de la lente como una función del tiempo (Figura 4.23). El radio de la lente aumenta rápidamente conforme la gasolina entra a la lente. Luego la lente tiende hacia un radio límite.

4.8.5 Balance de Masa de la Lente de Contaminante de NAPL

El balance de masa de la lente contaminante de NAPL (Figura 4.24) muestra la masa de contaminante contenida dentro de la lente de NAPL como una función del tiempo. La gráfica traza también la masa acumulativa de contaminante que se ha disuelto en el agua subterránea desde la lente. Conforme la masa contenida dentro de la lente declina, la masa acumulada disuelta se incrementa en forma proporcional.

4.8.6 Historias de Concentración de los Receptores

Las historias de concentración de los receptores (Figura 4.25) muestran las concentraciones predichas en los puntos receptores seleccionados por el usuario. Las concentraciones arriba del umbral especificado se grafican como una función del tiempo para cada localización de receptor. Debe tenerse cuidado para identificar el valor de umbral que se le da al modelo a fin de asegurarse que el valor no se fijó demasiado alto y como resultado se tracen historias de concentración truncadas en esta gráfica.

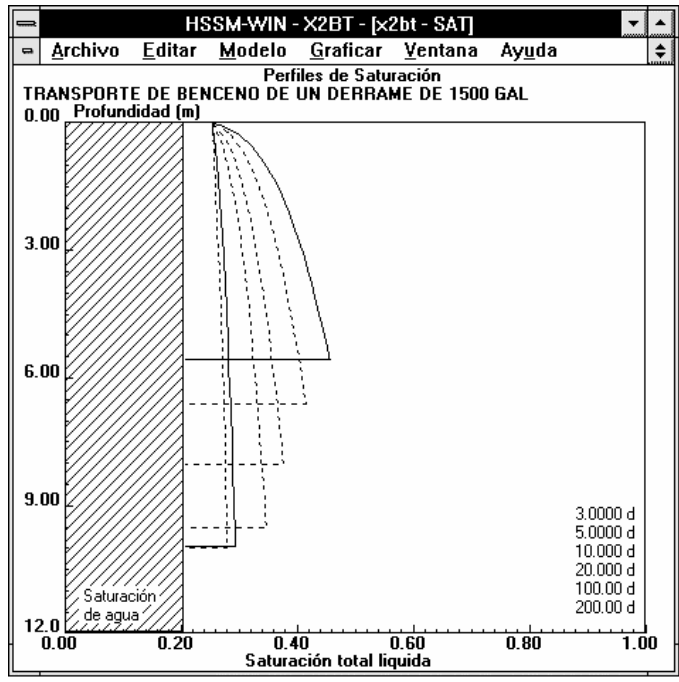


Figura 4.20: Perfiles típicos de saturación.

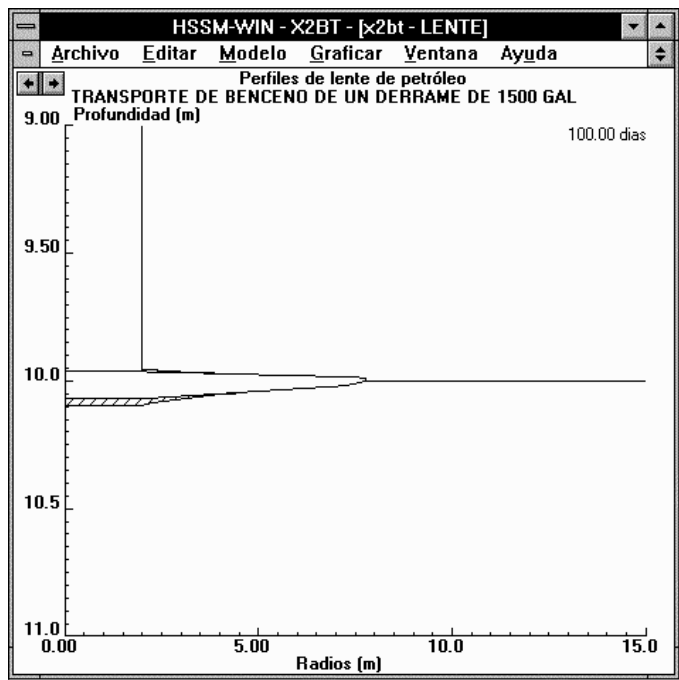


Figura 4.21: Perfil típico de lente de NAPL.

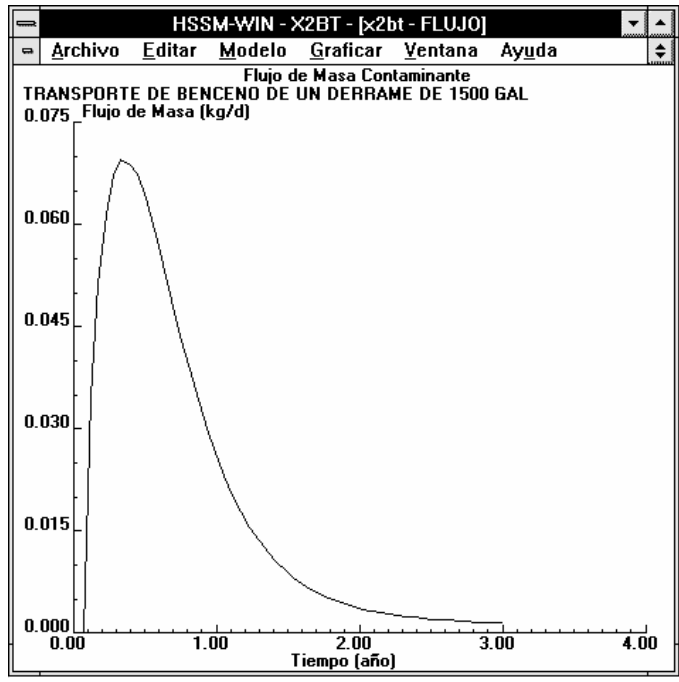


Figura 4.22: Historia típica del flujo de masa contaminante.

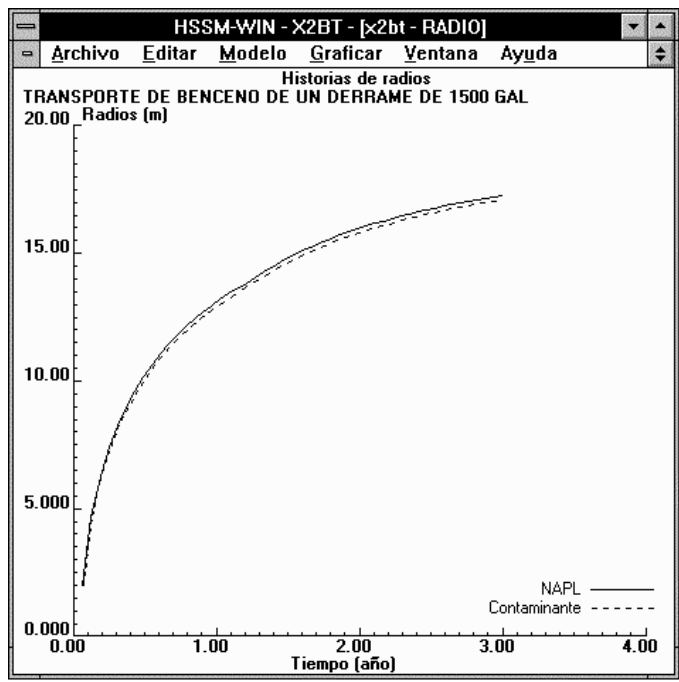


Figura 4.23: Historia típica del radio de la lente de NAPL.

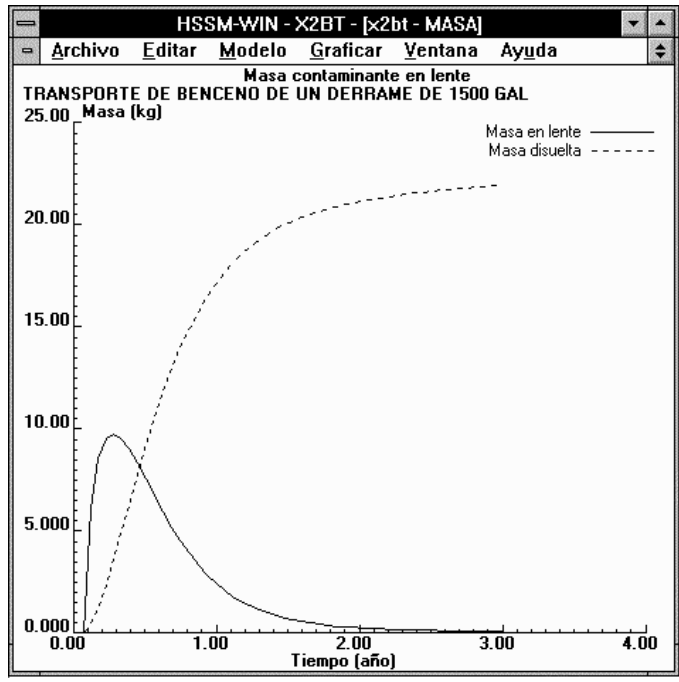


Figura 4.24: Balance de masa contaminante típico en lente de NAPL.

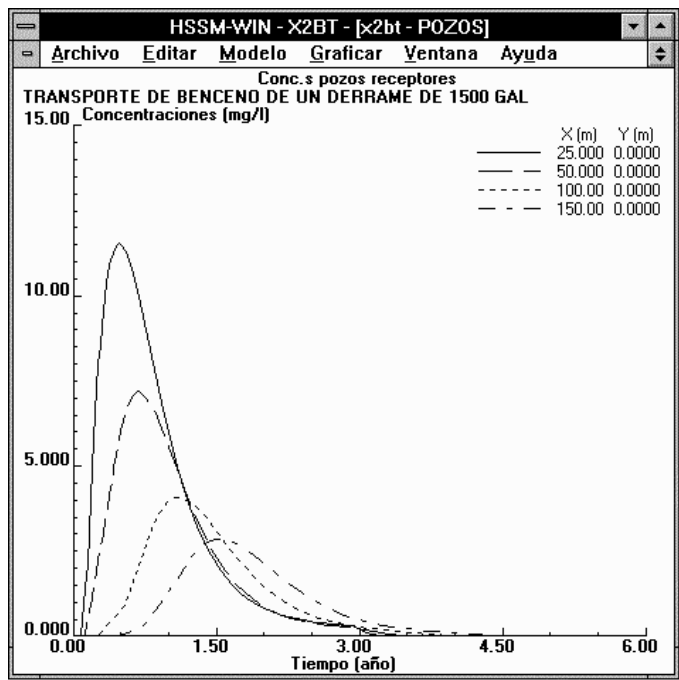


Figura 4.25: Historias típicas de concentraciones en receptores.

4.9 Una Nota acerca de la Eficiencia de Usar la Interfaz de Windows

Los módulos computacionales de HSSM (HSSM-KO y HSSM-T) se ejecutan más rápidamente bajo DOS que bajo Windows. Dentro de Windows, los modelos HSSM-KO y HSSM-T corren más rápidamente como un proceso de pantalla completa que en una ventana de DOS. En algunos casos, la manera más eficiente en tiempo para usar la interfaz de Windows es usar HSSM-WIN como un preprocesador para crear varios archivos de datos de entrada, luego salirse de HSSM-WIN y correr HSSM-KO y HSSM-T bajo DOS (Apéndice A.9). Los comandos para correr HSSM-KO y HSSM-T desde DOS son

HSSM-KO name.dat

HSSM-T name.pmi

en donde **name.dat** es el conjunto de datos de entrada creado por HSSM-WIN y **name.pmi** es el archivo de datos de entrada de HSSM-T creado al correr HSSM-KO. Los resultados pueden ser inspeccionados al volver a entrar a HSSM-WIN y trazar las gráficas de los resultados.

4.10 Relación de Comandos del Menú

Este inciso enumera cada comando de HSSM-WIN y describe brevemente su acción. El número y letra itálicos se refieren a las columnas y renglones de la Tabla 4.11, respectivamente.

Comandos de HSSM-WIN							
	Archivo (1)	Editar (2)	Modelo (3)	Graficar (4)	Ventana (5)	Ayuda (6)	Menú del Sistema (7)
(a)	Nuevo	Datos Generales...	Correr HSSM-KO	Graficar Resultados...	en Cascada	Acerca de Tamaño	Reestable- cer
(b)	Abrir...	Datos Hidrológicos...	Correr HSSM-T	Copiar Gráfica	en Mosaico HSSM...	Acerca de HSSM-WIN...	Ajustar
(c)	Guardar	Datos de la fase de Hidro- carburos...	Correr REBUILD	Imprimir Gráfica	Arreglar Iconos		Mover
(d)	Guardar Como...	Datos de Simulación del Modelo...		Cerrar Gráfica	Cerrar Todo		Minimizar
(e)	✓ Comprobar Tiempos de Archivos			Fonts	Lista de Gráficas		Maximizar
(f)	Salir de HSSM-WIN						Cerrar
(g)							Cambiar a...

Tabla 4.11: Resumen de comandos de HSSM-WIN.

Archivo (1) El menú Archivo enumera comandos para manipular archivos, e incluye la opción para Salir de

HSSM-WIN.

Nuevo (1.a) Nuevo limpia la memoria de parámetros y nombres de archivo, restaurando HSSM-WIN a su condición de arranque.

Abrir... (1.b) El cuadro de diálogo Abrir (Figura 4.3, página 25) se usa para abrir un archivo de datos. Este archivo contiene los datos de entrada para los programas del modelo. Una vez abierto por HSSM-WIN, los datos están disponibles para editar o guardar bajo un nombre nuevo.

Guardar (1.c) Guardar guardará los ajustes actuales de los parámetros en el archivo actual, que se exhibe en la barra de encabezado de HSSM-WIN.

Guardar Como... (1.d) El cuadro de diálogo Guardar Como (Figura 4.4, página 26) pedirá un nombre alternativo de archivo bajo el cual se guardarán los datos actuales. Al teclear el nombre, es suficiente introducir únicamente el prefijo (los primeros ocho o menos caracteres). HSSM-WIN agregará la extensión apropiada si no lo ha hecho.

Comprobar tiempos de creación de Archivos (1.e) Esta selección verifica los tiempos de creación o modificación de archivos para evitar que se ejecute HSSM-T con un archivo de entrada obsoleto. Normalmente, si se ha modificado un archivo de entrada de HSSM-KO, no deberá correrse HSSM-T antes de que se haya corrido o vuelto a correr HSSM-KO.

Cuando se activa esta selección, se impide que se corra HSSM-T si el archivo de datos de entrada de HSSM-KO tiene una fecha/hora posterior a la del archivo de entrada de HSSM-T. También se verifican los archivos de gráficas para ver si estos tienen fechas anteriores a los archivos de entrada, en cuyo caso se le pide al usuario volver a correr el modelo. A veces, cuando se mueven los archivos desde un directorio a otro, el usuario puede desear pasar encima de esta característica de seguridad.

Salir de HSSM-WIN (1.f) Esta selección se usa para terminar HSSM-WIN y limpiar la pantalla de todas las gráficas.

Editar (2)

Datos Generales (2.a) se usa para activar varios interruptores del modelo y para seleccionar títulos para las gráficas.

Datos Hidráulicos (2.b) se usa para introducir las variables hidráulicas.

Datos de la Fase de Hidrocarburo (2.c) se usa para seleccionar parámetros relacionados con la fase NAPL y el compuesto químico.

Datos de Simulación del Modelo (2.d) se usa para introducir opciones que controlan las simulaciones en HSSM-KO y HSSM-T.

En los incisos 4.6.3 a 4.6.6 (páginas de 31 a 44) se da información sobre el significado y los valores apropiados para cada concepto en los cuadros de diálogo de entrada de datos.

Modelo (3)

Correr HSSM-KO (3.a) Hace que se ejecute HSSM-KO usando el archivo actual de datos de entrada de HSSM-KO.

Correr HSSM-T (3.b) Hace que se ejecute HSSM-T usando el archivo actual de datos de entrada de HSSM-T.

Correr RECONSTRUIR (3.c) Hace que se ejecute RECONSTRUIR e intenta recuperar archivos temporales de una corrida interrumpida o no exitosa.

Gráficar (4) El cuadro de diálogo **Presentar Gráficas (4.a)** (Figura 4.5, página 27) pedirá al usuario cuales gráficas deberá generar y las dibujará sobre la pantalla.

En el caso de que no se ha formado ninguna lente de petróleo o que no se corrió el modelo TSGPLUME, algunas gráficas no estarán disponibles para presentación, y sus cuadros de marcaje estarán vacíos. Al tratar de seleccionar estos cuadros se producirá un mensaje sobre su no-disponibilidad. Por ejemplo, en la Figura 4.5 (página 27) no están disponibles las Concentraciones de los Pozos Receptores.

Copiar Gráfica (4.b) copia el contenido de la ventana gráfica a su tamaño y configuración actuales, a la Ventana de Portapapel, una utilería de almacenamiento de datos disponible en todas las aplicaciones de Windows. Una vez que se haya copiado a Portapapel, la gráfica puede transferirse a otras aplicaciones tales como PAINTBRUSH o WRITE usando el comando "Pegar" dentro de esas aplicaciones. No se puede pegar nada en HSSM-WIN, pero las gráficas pueden exportarse de esta manera como bitmaps.

Imprimir Gráfica (4.d) imprime una copia de la gráfica en la impresora que sea reconocida actualmente en Windows. (La selección de impresoras esta disponible a través del tablero de control de Windows). HSSM-WIN intentará hacer una copia al tamaño actual de la ventana gráfica sobre la página impresa, de manera que lo que aparece en la ventana gráfica aparecerá sobre el papel. Las gráficas pequeñas se imprimen bastante rápidamente (varios segundos), pero las más grandes tomarán más tiempo, ya que se requieren transferir mas puntos. Una gráfica que llene toda la pantalla se reducirá para caber en la página, y podrá tomar varios minutos, dependiendo de la sofisticación de la impresora.

La función de imprimir de HSSM-WIN no apoya graficadores o impresoras de margarita, ya que no pueden imprimir bitmaps.

Cerrar Grafica (4.e) cierra la gráfica actualmente seleccionada. Las gráficas también se pueden cerrar marcando doblemente con el ratón sobre sus menús de sistema.

Fuentes (4.f) permite la selección de tipos alternos de letras para los letreros de las gráficas de HSSM. Se pueden seleccionar diferentes tipos de fuentes para el título de la gráfica, etiquetas de ejes, y leyendas. La opción de **default** regresa todo el texto de las gráficas al tipo de caracteres por default.

Ventana (5)

Cascada (5.a) Acomoda las ventanas gráficas en forma de cascada.

Mosaico (5.b) Acomoda las ventanas gráficas en forma de mosaico.

Acomodar Iconos (5.c) Reacomoda elegantemente los iconos de gráficas. El espaciamiento de estos iconos queda determinado por el ajuste en el tablero de control del Escritorio.

Cerrar Todo (5.d) Cierra todas las ventanas gráficas y las quita de la memoria.

Ayuda (6)

Acerca de HSSM y Acerca de HSSM-WIN (6.a y 6.b) Los cuadros de diálogo "Acerca" proporcionan información pertinente acerca de los orígenes de los programas.

Menú del Sistema (7) El menú del sistema, que es común para todos los programas de Windows, se accesa marcando con el ratón sobre el icono de barra espaciadora en la esquina superior izquierda de la ventana o marcando

ALT + BARRA ESPACIADORA desde el teclado. Además de poder seleccionar varios modos de presentación de la ventana, también puede terminarse el programa.

Capítulo 5

Problemas Ejemplo

En este capítulo, se presentan dos problemas ejemplo junto con los juegos de datos de entrada y gráficas de HSSM. El juego completo de archivos de entrada y salida se distribuye en el disquete HSSM-2. La intención de estos ejemplos es proporcionar una guía en la aplicación del modelo a problemas similares. Cada uno comienza con una breve descripción del problema incluyendo algunos valores de los parámetros del modelo que se supone sean bien conocidos. Los ejemplos continúan luego con una discusión de la racionalización específica empleada para la selección de cada parámetro de el modelo. Los parámetros se enumeran en el orden que aparecen en la interfaz de Windows.

5.1 Problema 1: Tiempo de Llegada de la Gasolina al Nivel Freático

Se esta preparando un plan de respuesta y monitoreo en una emergencia para una instalación de un tanque de almacenamiento en la superficie del terreno. Se requiere una estimación de cuánto tiempo se requeriría para que la gasolina alcance el nivel freático y qué frecuencia de monitoreo se requeriría para detectar una fuga antes de que la gasolina llegue al nivel freático. El suelo fue clasificado como un suelo areno-arcilloso. En este ejemplo, el nivel freático se encuentra a una profundidad de 5.0 metros. Todos los parámetros para la corrida del modelo están guardados en el archivo **X1STF.DAT**. Se puede usar HSSM-WIN para revisar rápidamente los parámetros de entrada conforme se estudia el ejemplo. El archivo puede cargarse y revisarse de acuerdo con las instrucciones en el Inciso 4.5.2 "Crear y editar Conjuntos de Datos de Entrada."

Este problema requiere del uso del módulo KOPT sin contaminante disuelto. Se debería llevar a cabo una simulación "por unidad de área" porque se requiere únicamente el tiempo de transporte a través de la zona vadosa. De todos los datos de entrada requeridos para el modelo, se requieren solo los siguientes parámetros para la simulación de "únicamente KOPT". El programa HSSM-WIN pone los ceros necesarios en el archivo de datos para los parámetros no utilizados. La presentación de los datos de entrada sigue el orden de los cuatro cuadros de diálogo para datos de entrada de HSSM-WIN.

El primero de los cuadros, "Parámetros Generales del Modelo," contiene el título de la corrida, los interruptores para la impresión, los interruptores de módulos y los nombres de archivo. Para este ejemplo, el título de la corrida es

DERRAME DE GASOLINA DESDE LA INSTALACION DE UN
TANQUE DE ALMACENAMIENTO EN LA SUPERFICIE
TIEMPO DE LLEGADA DE LA GASOLINA AL NIVEL FREATICO

Se marca el interruptor de "crear archivos de salida" con objeto de escribir los archivos de salida. Para el primer intento al correr un conjunto de datos nuevos, se recomienda imprimir en eco los datos de entrada únicamente y verificar los valores de los parámetros leyendo el archivo de salida*.HSS. Se activa únicamente el interruptor del módulo de Correr KOPT, ya que únicamente se necesita KOPT para estimar el tiempo de llegada de la gasolina al nivel freático. Los nombres de los archivos de salida se generan automáticamente por la interfaz y se muestran en el área de nombres de ARCHIVO del cuadro de diálogo. El nombre de archivo usado para esta simulación es **X1STF.DAT**. El cuadro de diálogo concluido aparece como se indica en la Figura 5.1.

El segundo cuadro de diálogo, "Parámetros Hidráulicos" contiene las propiedades hidráulicas y las del suelo.

Parámetros Generales del Modelo

Títulos de la Corrida

DERRAME DE GASOLINA DESDE LA INSTALACION DE UN TANQUE DE ALMACENAMIENTO EN LA SUPERFICIE
TIEMPO DE LLEGADA DE LA GASOLINA AL NIVEL FREATICO

ACEPTAR
CANCELAR

Interruptores de Impresión

Crear archivos de salida
 Eco de impresión de datos únicamente
 Correr modelos

Interruptores de Módulos

Correr KOPT
 Correr OILENS
 Escribir archivo de entrada HSSM-T

Nombres de Archivos

NOTA: Estos nombres de archivos se usarán si el archivo de datos se guarda bajo un nombre nuevo con la opción "Guardar Como"

C:\MODELO\HSSM\X1STF.DAT	Archivo de entrada HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X1STF.HSS	Archivo de Salidat HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X1STF.PL1	Archivo de gráfica 1 de HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X1STF.PL2	Archivo de gráfica 2 de HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X1STF.PL3	Archivo de gráfica 3 de HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X1STF.PMI	Archivo de entrada de HSSM-T
C:\MODELO\HSSM\X1STF.TSG	Archivo de salida de HSSM-T
C:\MODELO\HSSM\X1STF.PMP	Archivo de gráfica de HSSM-T

Figura 5.1: Problema 1 cuadro de diálogo de parámetros generales ya llenado.

Las Propiedades Hidráulicas Los parámetros mostrados en la Tabla 5.1 se usan para las Propiedades Hidráulicas. Se usan propiedades de fluidos estándar para la fase de agua. Durante la infiltración, parte del aire en el espacio poroso no es desplazado ni por el agua ni por el NAPL. Se supone que durante la infiltración la conductividad hidráulica máxima para el agua es la mitad de la conductividad hidráulica saturada. A partir de esta suposición, el modelo HSSM determina automáticamente la cantidad de aire atrapado en el espacio poroso.

Parámetro	Justificación	Valor
Viscosidad de la fase agua, μ_w	Valor estandar	1.0 cp
Densidad de la fase agua, ρ_w	Valor estandar	1.0 g/cm ³
Tensión superficial de la fase agua, σ_{aw}	Supuesta	65.0 dina/cm
Permeabilidad máxima relativa durante infiltración, $k_{rw(max)}$	Supuesta	0.5
Tipo de entrada por recarga	Especificar saturación	
Saturación con agua, $S_{w(max)}$	Saturación de agua especificada	0.35

Tabla 5.1: Problema 1 propiedades hidráulicas.

Modelo de la Curva de Presión Capilar y Propiedades del Medio Porooso Las propiedades del medio poroso se estiman a partir de la tabulación de parámetros de suelos según Brakensiek et al. para el modelo de Brooks y Corey. Los valores mostrados en la Tabla 5.2 fueron tomados de la tabulación reproducida en el Apéndice C.1.

La saturación residual de agua que se requiere para el modelo HSSM se calcula dividiendo el contenido residual

Parámetro	Valor
Indice de distribución de tamaño de poro de Brooks y Corey, λ	0.368
Carga de entrada de aire, h_{ce}	46.3 cm
Contenido residual de agua, θ_{wr}	0.075
Porosidad, η	0.406

Tabla 5.2: Problema 1 propiedades del medio poroso.

de agua entre la porosidad para obtener 0.18 ($0.075/0.406$).

La conductividad hidráulica en cm/s del sistema se estima entonces según (Brakensiek et al., 1981), como sigue

$$K_{sw} = 270 \frac{\eta^2}{h_{ce}^2} \frac{\lambda^2}{(\lambda + 1)(\lambda + 2)} = 8.68 \times 10^{-4} \text{ cm/s} \quad (5.1)$$

en donde la carga de entrada de aire está en centímetros. Este valor se convierte luego a las unidades de metros por día multiplicando por 864 para dar una K_{sw} de 0.75 m/d. A partir de la información básica de propiedades de suelos, se determinan los siguientes parámetros (Tabla 5.3). El cuadro de diálogo llenado se muestra en la Figura 5.2. Nótese que en todos los cuadros de diálogo para el Problema 1 esta desactivada la comprobación de rango. Esto se muestra por el cuadro de marcate abierto (\square) debajo del nombre de archivo. Debe desactivarse la comprobación de rango para simulaciones exclusivas de KOPT, porque muchos de los parámetros de entrada pasan por default a ceros que normalmente no son permitidos.

Parámetros Hidráulicos

PROPIEDADES HIDRAULICAS		Archivo de Datos: C:\MODELO\HSSM\X1STF.DAT <input type="checkbox"/> Activar comprobación de rango	<input type="button" value="ACEPTAR"/> <input type="button" value="Cancelar"/>
Viscosidad dinámica del agua (cp)	1.000		
Densidad del agua (g/cm ³)	1.000		
Tensión superf. agua (dina/cm)	65.00		
Valor máx. de krw durante inf.	.5000		
Recarga <input type="radio"/> Velocidad media de recarga (m/d) valor: <input checked="" type="radio"/> Saturación .3500		PROPIEDADES DEL MEDIO POROSO	
Modelo de la curva de presión Capilar <input checked="" type="radio"/> Brooks y Corey <input type="radio"/> van Genuchten		Conductividad hidr. vert. sat. (m/d) .7500 Razón de cond. hidr. horiz/vert .5.000 Porosidad .4060 Densidad global (g/cm ³) .0000 Espesor saturado del acuífero (m) .0000 Profundidad al nivel freático (m) .10.00 Parámetro de espesor capilar (m) .0000 Gradiente agua subt. (m/m) .0000 Dispersividad longitudinal (m) .0000 Dispersividad transversal (m) .0000 Dispersividad vertical (m) .0000	
Lambda de Brooks y Corey	.3680		
Carga de entrada de aire (m)	.4600		
Saturación residual de agua	.1800		
Alpha de van Genuchten (1/m)	0		
n de van Genuchten	0		

Figura 5.2: Problema 1 cuadro de diálogo de propiedades hidráulicas ya llenado.

Parámetro	Justificación	Valor
Razón entre conductividad horizontal y vertical	Valor arbitrario ya que este parámetro no se usa en KOPT	5.0
Porosidad, η	Tabulación según <i>Brakensiek et al.</i> (1981)	0.406
Profundidad al nivel freático	Valor arbitrario ya que solo se usa KOPT	10.0m

Tabla 5.3: Problema 1 parámetros de conductividad hidráulica y de la curva de presión capilar.

Parámetros de la Fase de Hidrocarburos La Tabla 5.4 muestra los valores de las propiedades de los fluidos NAPL que se registran en la Figura 5.3. Se considera que estos representan a la gasolina.

Parámetro	Justificación	Valor
Densidad de la fase NAPL, ρ_o	Valor típico para gasolina	0.74 g/cm ³
Viscosidad de la fase NAPL, μ_o	Valor típico para gasolina	0.45 cp
Saturación residual de NAPL (zona vadosa), S_{orv}	Estimado	0.10
Tensión superficial del NAPL, σ_{ao}	Estimado	35.0 dina/cm

Tabla 5.4: Problema 1 propiedades de la fase de hidrocarburo (NAPL).

Derrame de Hidrocarburo Se escoge el escenario para el derrame del hidrocarburo (NAPL) seleccionando el botón de radio para el encharcamiento a carga constante (Figura 5.3). El tiempo de inicio, el tiempo de terminación y la profundidad de encharcamiento se introducen para definir el derrame. Se supone que el derrame se inicia a los 0.0 días y termina al día 1.0. Se supone que durante este intervalo la profundidad de encharcamiento permanece constante a 0.05 m (5 cm).

Parámetros de Simulación Los parámetros restantes se muestran en el Cuadro de Diálogo para los Parámetros de Simulación (Figura 5.4). Estos definen el área de la fuente, el intervalo de tiempo, los tiempos de perfilado y el criterio de terminación como se indica en la Tabla 5.5.

Se usan cinco tiempos de perfilado para la simulación. Los tiempos deberían ser pequeños, ya que se espera que la gasolina llegará al nivel freático de una manera relativamente rápida. Use tiempos de 0.25, 0.5, 1.0, 2.0 y 5.0 días (6, 12, 24, 48 y 60 horas). El modelo HSSM-WIN requiere que se indique por lo menos un receptor de agua subterránea. Aquí el receptor se localiza arbitrariamente en (0.0,0.0).

Resultados del Modelo para el Problema 1 El modelo es ejecutado introduciendo el comando

HSSM-KO X1STF.DAT

Parámetros de la Fase de Hidrocarburos	
PROPIEDADES DE LA FASE DE HIDROCARBUROS	
Densidad del NAPL (g/cm ³)7400
Viscosidad din. NAPL (cp)4500
Solubilidad del Hidrocarburo (mg/l)0000
Sat. res. NAPL en Acuífero.0000
Sat. res. NAPL en Zona vadosa1000
Coef. part. suelo/aqua (l/kg)0000
Tens. superf. NAPL (dina/cm)	35.00
PROPIEDADES DE COMPUESTOS DISUELTOS	
<input type="checkbox"/> Existe Compuesto Disuelto	
Conc. inic. comp. en NAPL (mg/l)0000
Coef. partición NAPL/agua0000
Coef. partición suelo/aqua (l/kg)0000
Solubilidad compuesto (mg/l)0000
<input type="checkbox"/> Vida med. Compuesto en acuíf.0000
Archivo:	C:\MODELO\HSSM\X1STF.DAT
<input checked="" type="checkbox"/> Activar comprobación de rango	
DERRAME DE HIDROCARBUROS	
<input type="radio"/> Flujo especificado	
<input type="radio"/> Volúmen/Área especificado	
<input checked="" type="radio"/> Encharcamiento de carga const.	
<input type="radio"/> Encharc. var. desp. carga const.	
Flujo de NAPL (m/d)	0
Tiempo de inicio (d)0000
Tiempo de terminación (d)	1.000
Profundidad encharcamiento (m)5000E-01
Volúmen/Área del NAPL (m)	0
Prof. inf. zona NAPL (m)	0

Figura 5.3: Problema 1 cuadro de diálogo de propiedades de la fase de hidrocarburo terminado.

Los perfiles de saturación de la simulación se muestran en la Figura 5.5. Estos perfiles fueron dibujados con el programa HSSM-PLT. La profundidad del frente abrupto aumenta con el tiempo y los primeros tres perfiles muestran saturaciones uniformes de NAPL. Los últimos dos perfiles muestran saturaciones variables de NAPL, porque ocurren a las 48 y 60 horas que quedan mas allá del final del derrame (24 horas).

Teniendo confianza completa en la exactitud de los datos de entrada, podría suponerse que la gasolina nunca alcanza el nivel freático. La mayoría de los parámetros del modelo usados en este ejemplo fueron estimados a partir de tablas publicadas. En vez de aceptar los resultados de una simulación como determinantes, deberían correrse varias simulaciones a fin de obtener un sentimiento de los efectos de la variabilidad de los parámetros. Si la conductividad hidráulica fue en realidad 10 veces mayor que el valor promedio de 0.75 m/d, la gasolina fluiría más profunda en el subsuelo. Debido a la condición de encharcamiento constante supuesta para este caso, la gasolina fluiría también más rápidamente. La condición de encharcamiento constante no especifica el volumen de gasolina que entra al suelo; solamente indica que se abastece suficiente gasolina para mantener una profundidad de 0.05 m de profundidad de encharcamiento por un día. La Figura 5.6 muestra la posición del frente NAPL cuando la conductividad hidráulica es 7.5 m/d. A los 25 días, la gasolina alcanzaría los 24 metros de profundidad, si no fuera por el nivel freático a los 5.0 metros de profundidad. Según el archivo **X2STF.HSS**, se alcanzó la profundidad de 5 metros dentro de 9.8 horas.

Este ejemplo enfoca el papel de la conductividad hidráulica para determinar la profundidad de la gasolina. También se puede demostrar el efecto de variación de otros parámetros de la misma manera. Algunos de los otros parámetros inciertos son la condición supuesta del derrame, el contenido de humedad, y los parámetros de presión capilar.

Parámetro	Justificación	Valor
Radio de la fuente de NAPL, R_s	Se desea una simulación "por unidad de área", el valor de 0.5642 resulta en una fuente de 1.0 m ² de superficie	0.5642 m
Tiempo de terminación de la simulación	Simular el derrame durante 25 días, ya que la gasolina es un fluido de baja viscosidad y puede alcanzar el nivel freático de una manera relativamente rápida en un medio permeable.	25 días
Intervalo máximo de tiempo de solución	Usar un valor relativamente pequeño, ya que se simulan únicamente 25 días	0.1 día
Tiempo mínimo entre intervalos de tiempo impresos	Usar un valor mas pequeño que el intervalo mínimo de tiempo de solución.	0.05 día

Tabla 5.5: Problema 1 parámetros de control de la simulación.

Parámetros de Simulación

PARAMETROS DE CONTROL DE SIMULACION

Archivo: C:\MODELO\HSSM\X1STF.DAT **ACEPTAR**

Activar comprobación de rango **CANCELAR**

Radio fuente de la lente NAPL (m) .5642

Factor de multiplicación del radio. .0000

Sat. máx. NAPL en lente NAPL. .0000

Tiempo term. simulación (d) 25.00

Interv. máx. tiempo solución (d) 0.1000

Tiempo mínimo entre intervalos de tiempo impresos (d) 5.000E-01

Criterio de terminación de Simulación OILENS

Tiempo especificado por usuario

Esparcido de la lente NAPL se para

Flujo máx. masa contaminante al acuífero

Contaminante lixiviado de la lente

Fracción de masa remanente. 0.0000

PARAMETROS DEL MODELO HSSM-T

Porc. máx. radio contam. (%) 0.0000

Concentración min. de salida (mg/l) 0.0000

Tiempo de inicio (d) 0.0000

Tiempo de terminación (d) 0.0000

Incremento de tiempo (d) 0.0000

LOCALIZACION POZOS RECEPTORES

Introduzca coordenadas para cada uno de hasta de 6 pozos

	X (m)	Y (m)
1		
2		
3		
4		
5		
6		

Número de pozos 0

PERFILES DE LA LENTE

Introduzca tiempo (d) para cada uno de hasta 10 perfiles

1	.2500
2	.5000
3	1.000
4	2.000
5	5.000
6	20.00
7	
8	
9	
10	

Número de perfiles 5

Figura 5.4: Problema 1 cuadro de diálogo de parámetros de control de simulación terminado.

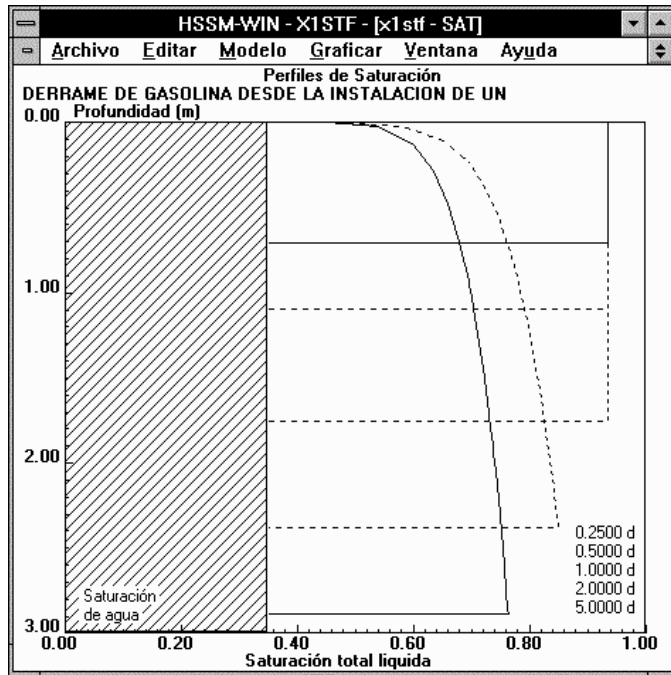


Figura 5.5: Perfiles de saturación del ejemplo del tanque de almacenamiento.

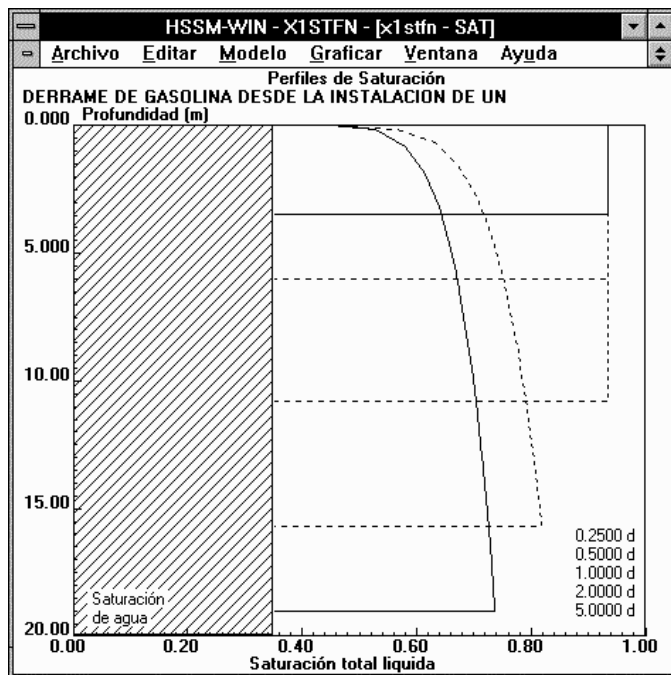


Figura 5.6: Ejemplo del tanque de almacenamiento con conductividad incrementada.

5.2 Problema 2: Transporte de Compuestos de Gasolina en el Agua Subterránea Hacia Sitios Receptores

Durante un período de un día, se fugan 1500 galones de gasolina desde un tanque rodeado de una berma circular de radio de 2.0 metros. Se cree que el benceno forma el 1.15% de la masa de la gasolina. Se requieren las concentraciones de benceno en el agua subterránea en sitios distantes a los 25, 50, 75, 100, 125 y 150 metros para evaluar el impacto del derrame. Se cree que suelo es predominantemente arena en la vecindad del derrame. El acuífero se encuentra a 10 metros debajo de la superficie del terreno, y su espesor saturado es de 15 metros.

No se dispone de información completa para el sitio, de manera que se tienen que estimar muchos de los parámetros del modelo HSSM. En ausencia de información mejor, se estimarán los valores de los parámetros a partir de tablas de la literatura. El conjunto de datos para este ejemplo se organizará de acuerdo con los 4 cuadros de diálogo para la introducción de los datos en HSSM-WIN. Los parámetros para este ejemplo se encuentran en el archivo **X2BT.DAT**, que se encuentra en el disquete de distribución de HSSM-WIN. El archivo puede cargarse y verse de acuerdo con las instrucciones del inciso 4.5.2 "Creación y Edición de Conjuntos de Datos Entrada."

El primero de los cuadros, "Parámetros Generales del Modelo," contiene el título de la corrida, los interruptores de impresión, los interruptores de módulo y los nombres de los archivos. Para este ejemplo, el título de la corrida es

Transporte de benceno de un derrame de 1500 gal de gasolina
 1.15% de Benceno por masa de gasolina
 suelo arenoso del conjunto de datos de Carsel y Parrish

Se marca el interruptor de "crear archivos de salida" con objeto de escribir los archivos de salida. Para el primer intento de correr un conjunto nuevo de datos, se recomienda que se impriman en eco únicamente los datos de entrada y verificar los valores de los parámetros leyendo el archivo de salida *.HSS. Cada uno de los interruptores del Módulo está marcado, porque se requieren los tres módulos de HSSM para estimar las concentraciones en el receptor. En este punto no importan los nombres ya que se agregan automáticamente cuando se guarda el archivo. El nombre de archivo usado para esta simulación es **X2BT.DAT**. El cuadro de diálogo completo aparece como se muestra en la Figura 5.7.

Parámetros Generales del Modelo

Títulos de la Corrida

TRANSPORTE DE BENCENO DE UN DERRAME DE 1500 GALS.
 DE GASOLINA---1.15% DE BENCENO EN GASOLINA
 SUELO ARENOSO, PROPIEDADES SEGUN CARSEL Y PARRISH

Interruptores de Impresión

Crear archivos de salida
 Eco de impresión de datos únicamente
 Correr modelos

Interruptores de Módulos

Correr KOPT
 Correr OILENS
 Escribir archivo de entrada HSSM-T

Nombres de Archivos

NOTA: Estos nombres de archivos se usarán si el archivo de datos se guarda bajo un nombre nuevo con la opción "Guardar Como"

C:\MODELO\HSSM\X2BT.DAT	Archivo de entrada HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X2BT.HSS	Archivo de Salida HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X2BT.PL1	Archivo de gráfica 1 de HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X2BT.PL2	Archivo de gráfica 2 de HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X2BT.PL3	Archivo de gráfica 3 de HSSM-KO
C:\MODELO\HSSM\X2BT.PMI	Archivo de entrada de HSSM-T
C:\MODELO\HSSM\X2BT.TSG	Archivo de salida de HSSM-T
C:\MODELO\HSSM\X2BT.PMP	Archivo de gráfica de HSSM-T

ACEPTAR CANCELAR

Figura 5.7: Problema 2 cuadro de diálogo de parámetros generales ya llenado.

El segundo cuadro de diálogo, "Parámetros Hidráulicos" contiene las propiedades hidráulicas y del suelo.

Propiedades Hidráulicas Se emplean propiedades estándar del agua para la simulación: densidad de 1.0 g/cm^3 , viscosidad de 1.0 cp , y tensión superficial de 65 dina/cm . Durante la infiltración, parte del aire en el espacio poroso no es desplazado ya sea por el agua o el NAPL. Se supone que durante la infiltración la conductividad hidráulica máxima del agua es la mitad de la conductividad hidráulica saturada. Partiendo desde esta suposición, el modelo HSSM determina automáticamente la cantidad de aire entrampado en el espacio poroso.

Recarga Se estima la velocidad media anual de recarga en el sitio de derrame en 50 cm/año . Cuando se convierte a las unidades requeridas para el modelo HSSM de metros por día, el valor de recarga es 0.0014 m/d .

Modelo de la Curva de Presión Capilar y Propiedades del Medio Poroso Se usará la tabla de parámetros del suelo desarrollada por *Carsel y Parrish* (1988) para las propiedades del suelo debido al número relativamente grande de muestras utilizado para el desarrollo de las estadísticas para la clasificación de la arena. Los parámetros en la Tabla 5.6 fueron tomados de la tabla (que se reproduce en el Apéndice C.1).

Parámetro	Valor promedio según Carsel y Parrish (1988)
Conductividad hidráulica, K_{sw}	7.1 m/d
Contenido residual de agua, θ_{wr}	0.045
Contenido saturado de agua, θ_m	0.43
Parámetro capilar de van Genuchten " α "	4.5 m^{-1}
Parámetro capilar de van Genuchten " n "	2.68

Tabla 5.6: Problema 2 propiedades hidráulicas.

Estos parámetros forman la base para varios de los otros parámetros de entrada requeridos en el cuadro de diálogo "Parámetros Hidráulicos". Los parámetros enumerados en la Tabla 5.7 se derivan de los datos de suelos.

El espesor saturado del acuífero es de 15.0 metros , y la profundidad al nivel freático es de 10.0 metros . Para esta simulación, no se incluye ninguna zona de embarrado; de manera que se permite que el NAPL se esparza libremente a lo largo de el nivel freático. De esta manera el parámetro de espesor capilar se fija a un valor mínimo de 0.01 m .

El gradiente del agua subterránea se estima 1 m por cien ó 0.01 . La dispersividad longitudinal se toma como 10 metros . Este valor resulta de la regla simplificada que dice que la dispersividad longitudinal puede ser la décima parte de la distancia al punto receptor (100 m). La dispersividad transversal horizontal se supone de 1 metro y la dispersividad transversal vertical se estima en 0.1 m .

En este punto se puede llenar completamente el cuadro de diálogo "Parámetros Hidráulicos" de HSSM-WIN en (Figura 5.8).

Parámetro	Justificación	Valor
Saturación residual de agua, S_{wr}	En el modelo HSSM se requiere introducir la saturación residual, en vez del contenido residual de humedad. $S_{wr} = \theta_{wr} / \eta$	0.10 (0.045/0.43)
Razón entre conductividad horizontal y vertical	Se supone que el suelo arenoso es solamente ligeramente anisotrópico.	2.5
Porosidad, η	La porosidad se toma como igual al contenido saturado de agua.	0.43
Densidad global, ρ_b	En términos de porosidad y densidad de sólidos, densidad global es $\rho_b = \rho_s(1 - \eta)$	1.51 g/cm ³ 2.65 g/cm ³ (1 - 0.43)

Tabla 5.7: Problema 2 parámetros derivados de las propiedades hidráulicas.

Figura 5.8: Problema 2 cuadro de diálogo de propiedades hidráulicas ya llenado.

Propiedades de la Fase de Hidrocarburo El primer grupo de parámetros se usa para describir las propiedades del NAPL propiamente, que se supone es una fase aceitosa inerte. La densidad y la viscosidad de la gasolina son típicamente cerca de 0.74 g/cm³ y 0.45 cp, respectivamente. La solubilidad del NAPL se toma en forma arbitraria como 10 mg/l. Una cantidad pequeña de la fase NAPL se disolverá durante la simulación, pero esta cantidad tiene poco efecto sobre el compuesto disuelto de interés. Se especifican saturaciones residuales de NAPL para el acuífero (0.15) y la zona vadosa (0.05). Estos valores son estimados, pero reflejan el hecho que el residuo en el acuífero es probablemente mayor que en la zona vadosa (*Wilson et al.*, 1990). El coeficiente de partición suelo/agua para la fase NAPL se toma en 0.83. La tensión superficial de la superficie del NAPL o "aceite" se

supone que sea aproximadamente la mitad de tensión superficial agua/aire, σ_{ao} o 35 dina/cm.

Propiedades del Compuesto Disuelto En vista de que el objeto de la simulación es el de estimar las concentraciones en el sentido del gradiente de un compuesto químico de interés, se marca el cuadro de que existe el compuesto disuelto. La concentración inicial del compuesto (de benceno) se calcula a partir de su masa porcentual en la gasolina. Se marca el cuadro de compuesto disuelto para indicarle a HSSM que se deberá simular un compuesto disuelto del NAPL.

En vista de que el benceno esta presente en la gasolina a una fracción de la masa del 1.14% y la densidad de la gasolina es 0.72 g/cm^3 , la concentración inicial del benceno en la gasolina es

$$8208 \text{ mg/l} = \frac{1.14\%}{100} (0.72 \text{ g/cm}^3) (1000 \text{ cm}^3/\text{l}) (1000 \text{ mg/g}) \quad (5.2)$$

El coeficiente de partición Petróleo/Agua (NAPL/Agua), k_o , se supondrá igual a 311 como se determinó con la utilería RAOULT (Apéndices C.2 y G). El coeficiente de partición del benceno entre el suelo y el agua, k_d , es 0.083 l/kg . Este valor se determina multiplicando la fracción supuesta de carbono orgánico (0.001) por el valor de k_{oc} (83). El valor de k_{oc} se toma de la Tabla C.7 en el Apéndice C.2. La solubilidad del benceno en agua es alrededor de 1750 mg/l . Este valor es un valor límite absoluto para la simulación. La solubilidad real del benceno en la gasolina se determina con el coeficiente de partición. Se supondrá que no habrá ninguna degradación del benceno para el modelo HSSM-T, de manera que no se marca el cuadro de la vida media.

Derrame de Hidrocarburo En este ejemplo el derrame se da como un volumen liberado durante un cierto intervalo de tiempo. La definición apropiada del derrame para esta situación es el del derrame de flujo especificado. Los parámetros de entrada requeridos son el tiempo de inicio en días y el tiempo de terminación en días, y el flujo de NAPL en metros por día. El tiempo de inicio es 0.0 días y el tiempo de terminación es 1.0 días. El flujo de NAPL, q_o , se calcula dividiendo el volumen del derrame entre el área de la fuente y la duración.

$$q_o = 0.4522 \text{ m/d} = \frac{1500 \text{ gal} \left(\frac{\text{ft}^3}{7.5 \text{ gal}} \right) \left(\frac{0.3048 \text{ m}}{\text{ft}} \right)^3}{(\pi (2.0 \text{ m})^2) 1.0 \text{ días}} \quad (5.3)$$

El cuadro de diálogo terminado se muestra en la Figura 5.9.

Parámetros de Control de la Simulación Un número de parámetros interactúan para controlar varios aspectos de la simulación. Estos se enumeran en la Tabla 5.8.

Criterio de Terminación de la Simulación de OILENS La cuarta opción, "contaminante lixiviado de la lente," se elige como condición de terminación ya que es la opción única que permite la corrida del modelo HSSM-T. La fracción de masa remanente se elige en 0.01. La porción de OILENS del modelo HSSM-KO terminará cuando quede menos del 1% de la masa que entró en la lente mientras dure la simulación. El otro 99% se habrá lixiviado hacia el agua subterránea. El compuesto químico existirá todavía debajo de la fuente en la zona vadosa. Esta cantidad de sustancia química esta contenida en el la fase NAPL como saturación residual, y nunca entra a la lente.

Parámetros de la Fase de Hidrocarburos	
PROPIEDADES DE LA FASE DE HIDROCARBUROS	
Densidad del NAPL (g/cm ³)7200
Viscosidad din. NAPL (cp)4500
Solubilidad del Hidrocarburo (mg/l)	10.00
Sat. res. NAPL en Acuífero.1500
Sat. res. NAPL en Zona vadosa5000E-01
Coef. part. suelo/aqua (l/kg)8300E-01
Tens. superf. NAPL (dina/cm)	35.00
PROPIEDADES DE COMPUESTOS DISUELTOS	
<input checked="" type="checkbox"/> Existe Compuesto Disuelto	
Conc. inic. comp. en NAPL (mg/l).	8208.
Coef. partición NAPL/agua	311.0
Coef. partición suelo/aqua (l/kg)8300E-01
Solubilidad compuesto (mg/l)	1750.
<input type="checkbox"/> Vida med. Compuesto en acuíf.	.0000
Archivo:	C:\MODELO\HSSM\X2BT.DAT
<input checked="" type="checkbox"/> Activar comprobación de rango	
DERRAME DE HIDROCARBUROS	
<input checked="" type="radio"/> Flujo especificado	
<input type="radio"/> Volúmen/Area especificado	
<input type="radio"/> Encharcamiento de carga const.	
<input type="radio"/> Encharc. var. desp. carga const.	
Flujo de NAPL (m/d)4522
Tiempo de inicio (d)0000
Tiempo de terminación (d)	1.000
Profundidad encharcamiento (m)	0
Volúmen/Area del NAPL (m)	0
Prof. inf. zona NAPL (m)	0

Figura 5.9: Problema 2 cuadro de diálogo de propiedades de la fase de hidrocarburo terminado.

Parámetros del modelo HSSM-T Muchos de los parámetros introducidos previamente son usados por el modelo HSSM-T. Los parámetros restantes se enlistan en la Tabla 5.9.

Perfiles de la Lente NAPL El modelo HSSM puede producir perfiles a varios tiempos durante la simulación. Los perfiles representan la cantidad de NAPL en el espacio poroso de la zona vadosa y la configuración de la lente de NAPL. En vista de que el movimiento de la gasolina es relativamente rápido, los perfiles deberían amontonarse hacia el tiempo del derrame. Por ejemplo, para pescar el NAPL conforme se mueve a través de la zona vadosa arenosa, se requieren tiempos de perfilado de menos de 1 día aproximadamente. Sin embargo, en este ejemplo la configuración de la lente es de mayor interés y se seleccionan siete tiempos de perfilado algo posteriores: 25, 50, 75, 100, 125, 150 y 200 días.

Localización de los Pozos Receptores Las localizaciones de seis receptores para esta simulación están a 25, 50, 75, 100, 125 y 150 metros de el centro de la fuente, tomados en forma longitudinal en la dirección de flujo. El cuadro de diálogo terminado se muestra en la Figura 5.10.

Cada gráfica generada por el modelo HSSM para este juego de datos se mostró anteriormente en las Figuras 4.20 a la Figura 4.25 (páginas de 56 a 58). Este ejemplo muestra un comportamiento típico para derrames de gasolina. Existe un flujo y transporte relativamente rápido en la zona vadosa seguido por la formación y decaimiento de una lente de NAPL sobre el nivel freático. El lixiviado subsecuente del compuesto químico del NAPL (benceno) ocasiona la contaminación del acuífero. Las escalas de tiempo para la formación y decaimiento de la lente, lixiviado, y transporte al receptor a 150 m son del orden de 1 año, 4 años, y 11 años, respectivamente.

Parámetro	Justificación	Valor
Radio de la fuente de NAPL, R_s	De la definición del problema	2.0 metros
Factor de multiplicación del radio	Valor sugerido	1.001
Saturación máxima de NAPL en la lente, $S_{o(max)}$	Estimado de la utilería NTHICK descrita en el Apéndice H	0.3260
Tiempo de terminación de la simulación	Un tiempo mucho mayor que el esperado para la formación de la lente NAPL	2500 días
Intervalo máximo de tiempo para la solución	Límite aproximadamente menos de 1 mes	20 días
Tiempo mínimo entre intervalos de tiempo impresos y comprobaciones del balance de masa	El modelo puede producir salidas a intervalos de tiempo muy pequeños, tal información es de poca utilidad.	0.1 días

Tabla 5.8: Problema 2 parámetros de control de simulación.

Parámetro	Justificación	Valor
Porcentaje del radio máximo de contaminante	Deberá usarse el radio que ocurre cuando el flujo de masa hacia el acuífero es máximo. El valor 101 es una señal que dispara esta selección.	101
Concentración mínima de salida	La concentración mínima que reportará HSSM-T. Se requiere un valor diferente de cero para que HSSM-T funcione de una manera apropiada.	0.001 mg/l
Tiempo de inicio	Valor arbitrario que se sobrepasará con una simulación exitosa de HSSM-T	100 días
Tiempo de terminación	Valor arbitrario que se sobrepasará con una simulación exitosa de HSSM-T	5000 días
Incremento de tiempo	Un incremento de tiempo de 50 días produce generalmente curvas de historia de concentración suaves	50 días

Tabla 5.9: Problema 2 parámetros del modelo HSSM-T.

Parámetros de Simulación

PARAMETROS DE CONTROL DE SIMULACION		Archivo:	ACEPTAR
Radio fuente de la lente NAPL (m)	2.000	C:\MODELO\HSSM\X2BT.DAT	CANCELAR
Factor de multiplicación del radio	1.001	<input checked="" type="checkbox"/> Activar comprobación de rango	
Sat. máx. NAPL en lente NAPL	.3236	PERFILES DE LA LENTE	
Tiempo term. simulación (d)	2500	Introduzca tiempo (d) para cada uno de hasta 10 perfiles	
Interv. máx. tiempo solución (d)	20.00	1	100.0
Tiempo mínimo entre intervalos de tiempo impresos (d)	.1000	2	200.0
Criterio de terminación de Simulación OILENS <input type="radio"/> Tiempo especificado por usuario <input type="radio"/> Esparcido de la lente NAPL se para <input type="radio"/> Flujo máx. masa contaminante al acuífero <input checked="" type="radio"/> Contaminante lixiviado de la lente		3	3.000
Fracción de masa remanente	.1000E-01	4	5.000
PARAMETROS DEL MODELO HSSM-T		5	10.00
Porc. máx. radio contam. (%)	101.0	6	20.00
Concentración min. de salida (mg/l)	.1000E-02	7	
Tiempo de inicio (d)	100.0	8	
Tiempo de terminación (d)	5000.	9	
Incremento de tiempo (d)	50.00	10	
LOCALIZACION POZOS RECEPTORES		Número de perfiles	
			6
		LOCALIZACION POZOS RECEPTORES	
		X (m)	Y (m)
		1	25.00 .0000
		2	50.00 .0000
		3	100.0 .0000
		4	150.0 .0000
		5	
		6	
		Número de pozos	
			4

Figura 5.10: Problema 2 cuadro de diálogo de parámetros de control de simulación terminado.

Capítulo 6

Contenido de los Archivos de Salida

Aunque se proporcionan dos interfaces gráficas para el usuario con el modelo HSSM, mucha de la información útil y necesaria producida por el modelo no está contenida en las gráficas producidas por estos paquetes de software. Los archivos principales de salida de los programas HSSM-KO y HSSM-T contienen un resumen de los datos de entrada y de los resultados del modelo. Las siguientes tablas describen cada parte de estos archivos, junto con los extractos de los archivos de salida. Se distribuyen varios juegos completos de los archivos de salida en el disquete de distribución HSSM-2.

6.1 Archivo de Salida del Modelo HSSM-KO

La Tabla 6.1 presenta el contenido del archivo de salida de HSSM-KO que tiene la extensión **.HSS**. El archivo de salida consiste de una serie de tablas que contienen los resultados de la simulación.

Título de Tabla	Contenido
Datos de Entrada	1. Impresión en Eco de los datos de entrada. 2. Parámetros calculados directamente a partir de los datos de entrada. 3. Curvas de presión capilar Agua/aire y NAPL/aire utilizada en el modelo.
Localización del frente de petróleo	Posición de la frente de NAPL durante la simulación.
Localización del frente del Compuesto	Posición del compuesto químico de interés durante la simulación.
Descripción de la salida del modelo OILENS-Lente de petróleo	Descripción de la lente NAPL durante la simulación.
Salida del modelo OILENS-Contaminantes Acuosos	Descripción del lixiviado de los contaminantes acuosos durante la simulación.
Perfil de Saturación y Concentración	Variación con la profundidad de las saturaciones de la zona vadosa y concentraciones en el tiempo especificado por el usuario.
Perfil Radial a través de la Lente	Variación con el radio de la cima y de la base de la lente OILENS a un tiempo especificado por el usuario.
Posprocesado de KOPT/OILENS	Información resumida de la simulación.
HSSM-Información de la corrida	Información acerca de las técnicas numéricas utilizadas en la simulación.

Tabla 6.1: Contenido del archivo principal de salida de HSSM.

Si el modelo se ejecuta sin errores catastróficos, entonces el archivo de salida de HSSM-KO termina con el mensaje:

 EJECUCION EXITOSA

Cada componente del archivo de salida se describe con mayor detalle abajo. Para cada tabla se describen en el archivo de salida, los títulos de las columnas y sus significados. A cada descripción le sigue un extracto del archivo .HSS.

Objeto: Proporcionar una impresión en eco del juego de datos de entrada y una impresión de los cálculos preliminares.	
Sección	Contenido
1	Impresión en eco de los datos de entrada de manera que el usuario pueda asegurarse que se introdujeron los valores pretendidos de los parámetros.
2	Parámetros del modelo calculados a partir de los datos de entrada.
3	Curvas de presión capilar Aire/agua y Aire/NAPL utilizadas en la simulación.

Tabla 6.2: Datos de entrada.

```
*****
HSSM      MODELO DE SIMULACION DE DERRAMES DE HIDROCARBUROS
*****
KOPT      TRANSPORTE CINEMATICO DE CONTAMINANTE ACEITOSO
OILENS    MOVIMIENTO RADIAL DE LA LENTE DE PETROLEO
TSGPLUME  ESTELA TRANSITORIA DE FUENTE GAUSSIANA
*****
```

Transporte de benceno de un derrame de 1500 gals
 de gasolina 1.15% de benceno en la gasolina
 suelo arenoso, propiedades según Carsel y Parrish

DATOS DE ENTRADA
 =====

ARCHIVOS DE DATOS:

```
HSSM-KO ENTRADA:  x2bt.dat
HSSM-KO SALIDA:   x2bt.HSS
HSSM-KO GRAFICA 1: x2bt.PL1
HSSM-KO GRAFICA 2: x2bt.PL2
HSSM-KO GRAFICA 3: x2bt.PL3
HSSM-T ENTRADA:   x2bt.PMI
HSSM-T SALIDA:    x2bt.TSG
HSSM-T GRAFICA:   x2bt.PMP
BANDERA DE INTERFAZ      =  D
CRITERIOS DE ESCRITURA  =  1
BANDERA PARA CORRIDA DE KOPT =  1
BANDERA PARA COMPUESTO DISUELTO =  1
BANDERA PARA CORRIDA DE OILENS =  1
BANDERA PARA CORRIDA DE TSGPLUME =  1
```

```
CONSTANTES & PROPIEDADES DE LA MATRIZ.....
CONDUCTIVIDAD HIDR. SAT. VERTICAL = 7.100 (M/D)
RAZON ENTRE CONDUCTIVIDAD HORIZONTAL
Y VERTICAL = 2.500 (*)
INDICE DE PERMEABILIDAD RELATIVA = 2 (*)
```

POROSIDAD = .4300 (*)
SATURACION RESIDUAL DE AGUA = .1000 (*)
N DE VAN GENUCHTEN = 4.500 (*)

CARACTERISTICAS DEL EVENTO AGUA.....
VISCOSIDAD DINAMICA = 1.000 (CP)
DENSIDAD = 1.000 (G/CC)
TIPO DE LLUVIA : 1-FLUJO 2-SAT. = 1 (*)
FLUJO DE AGUA O SATURACION = .1400E-02 (M/D 0 *)
KRW MAX. DURANTE INFILTRACION = .5000 (*)
PROFUNDIDAD AL NIVEL FREATICO = 10.00 (M)

CARACTERISTICAS DEL EVENTO CONTAMINANTE.....
VISCOSIDAD DINAMICA = .4500 (CP)
DENSIDAD = .7200 (G/CC)
SATURACION RESIDUAL DE NAPL = .5000E-01 (*)
TIPO DE CARGA DE PETROLEO = 1 (*)

PARAMETROS DE SUCCION CAPILAR.....
ALFA DE VAN GENUCHTEN = 2.680 (1/M)
TENSION SUPERFICIAL DEL AGUA = 65.00 (DINA/CM)
TENSION SUPERFICIAL DEL PETROLEO = 35.00 (DINA/CM)
VELOCIDAD DE CARGA DEL FLUJO = .4522 (M/D)
TIEMPO DE INICIO = .0000 (D)
TIEMPO DE TERMINACION = 1.000 (D)

PARAMETROS DEL COMPUESTO DISUELTO.....
CONC. INICIAL EN EL NAPL = 8208. (MG/L)
COEF. DE PARTICION NAPL/AGUA = 311.0 (*)
COEF. DE PARTICION SUELO/AGUA = .8300E-01 (L/KG)
SUELO/AGUA (HIDROCARBURO) = .8300E-01 (L/KG)
DENSIDAD GLOBAL = 1.510 (G/CC)

PARAMETROS DEL SUBMODELO OILENS.....
RADIO DE LA FUENTE CONTAMINANTE = 2.000 (M)
FACTOR DE MULTIPLICACION DEL RADIO = 1.001 (*)
ESPESOR DE LA FRANJA CAPILAR = .1000E-01 (M)
DISPERSIVIDAD VERT. DEL ACUIFERO = .1000 (M)
GRADIENTE DEL AGUA SUBTERRANEA = .1000E-01 (*)
RESIDUO DE NAPL EN EL ACUIFERO = .1500 (*)
SATURACION MAX. DE NAPL EN LA LENTE = .3260 (*)
SOLUBILIDAD DEL CONTAMINANTE EN AGUA = 1750. (MG/L)
SOLUBILIDAD DEL PETROLEO EN AGUA = 10.00 (MG/L)

PARAMETROS DE SIMULATION.....
TIEMPO DE TERMINACION DE LA SIMULACION= 2500. (D)
INTERVALO MAX. DEL TIEMPO RKF = 20.00 (D)
TIEMPO MIN. ENTRE IMPRESION = .1000 (D)
CRITERIOS DE TERMINACION = 4 (*)
FACTOR PARA CRITERIO DE TERMINACION 4 = .1000E-01 (*)

PERFILES.....
NUMERO DE PERFILES = 7 (*)
A LOS TIEMPOS: (D)
25.0000 50.0000 75.0000
100.0000 125.0000 150.0000
200.0000

PARAMETROS DEL MODELO TSGPLUME.....
DISPERSIVIDAD LONGITUDINAL 10.00 (M)
DISPERSIVIDAD TRANSVERSAL 1.000 (M)
PORCENTAJE DEL RADIO MAX. 101.0 (M)
CONC. MINIMA DE SALIDA .1000E-02 (MG/L)
VIDA MEDIA DEL COMPUESTO .0000 (D)
NUMERO DE SITIOS RECEPTORES 6 (*)
TIEMPO DE INICIO (D) 100.0 (D)
TIEMPO DE TERMINACION (D) 5000. (D)

INCREMENTO DE TIEMPO (D) 50.00 (D)
 ESPESOR ACUIFERO (M) 15.00 (M)

LOCALIZACION DE LOS RECEPTORES

X	Y
25.00	.0000
50.00	.0000
75.00	.0000
100.0	.0000
125.0	.0000
150.0	.0000

LEYENDA

=====

(*) ADIMENSIONAL O NO APLICABLE
 (M) METROS
 (D) DIAS
 (CP) CENTIPOISE 1.0 CP = 0.01 GR/CM/SEC
 (M/D) METROS POR DIA
 (DINA/CM) DINA POR CENTIMETRO
 (MG/L) MILIGRAMOS POR LITRO
 (L/KG) LITROS POR KILOGRAMO DE SUELO
 (G/CC) GRAMOS POR CENTIMETRO CUBICO

FINAL DE LOS DATOS DE ENTRADA

Los parámetros calculados directamente a partir de los datos de entrada siguen después de la impresión en eco del conjunto de datos de entrada:

PARAMETROS CALCULADOS.....

CONDUCTIVIDAD SAT. VERT. DE NAPL	=	11.36	(M/D)
AREA DE LA FUENTE	=	12.57	(M^2)
LAMBDA APROX. SEGUN BROOKS Y COREY	=	2.064	(*)
CARGA DE ENTRADA DE AIRE	=	.2759	(M)
SATURACION DE AIRE ENTRAMPADO	=	.1442	(*)
SATURACION DE AGUA	=	.2049	(*)
FLUJO DE AGUA	=	.1400E-02	(M/D)
CONDUCTIVIDAD MAX. DEL PETROLEO	=	3.157	(M/D)
FLUJO DEL VOLUMEN CONTAMINANTE	=	.4522	(M/D)
CARGA TOTAL DE PETROLEO, VOL/AREA	=	.4522	(M)
MASA TOTAL DE PETROLEO	=	4091.	(KG)
MASA TOTAL DEL COMPUESTO	=	46.64	(KG)

Las curvas estimadas de presión capilar para aire/agua y aire/NAPL siguen después de los datos de entrada en el archivo **nombre.HSS**:

CURVA DE PRESION CAPILAR AGUA-AIRE, NAPL-AIRE

SATURACION .AGUA O NAPL	CARGA CAPILAR (CM AGUA)	CARGA CAPILAR (CM NAPL)
.1200	1.7438	1.3041
.1400	1.2464	.9322
.1600	1.0242	.7659
.1800	.8909	.6663
.2000	.7997	.5980
.2200	.7321	.5475
.2400	.6794	.5081
.2600	.6368	.4763

.2800	.6015	.4499
.3000	.5716	.4275
.3200	.5458	.4082
.3400	.5233	.3913
.3600	.5034	.3765
.3800	.4856	.3632
.4000	.4697	.3512
.4200	.4552	.3404
.4400	.4420	.3306
.4600	.4300	.3216
.4800	.4189	.3132
.5000	.4086	.3056
.5200	.3990	.2984
.5400	.3901	.2918
.5600	.3818	.2856
.5800	.3740	.2797
.6000	.3667	.2743
.6200	.3598	.2691
.6400	.3533	.2642
.6600	.3471	.2596
.6800	.3413	.2552
.7000	.3357	.2511
.7200	.3304	.2471
.7400	.3254	.2433
.7600	.3206	.2397
.7800	.3160	.2363
.8000	.3116	.2330
.8200	.3073	.2298
.8400	.3033	.2268
.8600	.2994	.2239
.8800	.2957	.2211
.9000	.2920	.2184
.9200	.2886	.2158
.9400	.2852	.2133
.9600	.2820	.2109
.9800	.2789	.2086
1.0000	.2759	.2063

Objeto: Un resumen de la distribución del NAPL en la zona vadosa.		
Columna	Encabezado de Columna	Contenido
1	Intervalo	EL número de intervalos de tiempo concluidos. Estos números generalmente no son consecutivos, ya que se deberá seleccionar un intervalo mínimo de impresión.
2	Tiempo (D)	El tiempo en días desde el inicio de la simulación.
3	Profundidad (M)	La profundidad del frente abrupto en la arista frontal del NAPL que se esta infiltrando.
4	Saturación	La saturación de NAPL en el frente; las saturaciones del NAPL detrás del frente son frecuentemente mas bajas que este valor, como puede verse en los perfiles de saturación.
5	Flujo (M/D)	Flujo de NAPL en el frente.
6	Escorrimento (KG)	Se produce escurrimiento cuando se especifica una condición de frontera de flujo del NAPL y el flujo es mayor que el flujo dinámico máximo permitido por el modelo de Green-Ampt con cero carga de encharcamiento.
7	Masa (KG)	Masa de NAPL agregada al perfil por metro cuadrado.
8	Encharcamiento (M)	Altura de encharcamiento superficial de NAPL.

Tabla 6.3: Localización del frente NAPL.

NOTA: Esta tabla de salida se produce únicamente hasta que se forme la lente de NAPL. Entonces se produce la salida del modelo OILENS.

 LOCALIZACION DEL FRENTE NAPL

Transporte de benceno de un derrame de 1500 gals
 de gasolina 1.15% de benceno en la gasolina
 suelo arenoso, propiedades según Carsel y Parrish

HAPL

INTERVALO	TIEMPO (D)	PROF. (M)	SATURACION (*)	FLUJO (M/D)	ESCURRIMIENTO (KG)	MASA (KG)	ENCHARCAMIENTO (M)
1	.0000	.0000	.3957	.4522	.0000		.0000
4	.2000	.5315	.3957	.4522	.0000	818.3	.0000
5	.3000	.7972	.3957	.4522	.0000	1227.	.0000
7	.5000	1.3287	.3957	.4522	.0000	2046.	.0000
8	.6000	1.5944	.3957	.4522	.0000	2455.	.0000
9	.7000	1.8602	.3957	.4522	.0000	2864.	.0000
10	.8000	2.1259	.3957	.4522	.0000	3273.	.0000
11	.9000	2.3917	.3957	.4522	.0000	3682.	.0000
13	1.0107	2.6858	.3957	.4522	.0000	4091.	.0000
23	1.1182	2.9715	.3957	.4522	.0000	4091.	.0000
29	1.2248	3.2548	.3957	.4522	.0000	4091.	.0000
33	1.3330	3.5423	.3957	.4522	.0000	4092.	.0000
38	1.4399	3.8024	.3710	.3510	.0000	4092.	.0000
41	1.5691	4.0598	.3472	.2703	.0000	4091.	.0000
43	1.6771	4.2426	.3320	.2266	.0000	4091.	.0000
45	1.8050	4.4325	.3175	.1900	.0000	4091.	.0000
47	1.9668	4.6423	.3029	.1577	.0000	4091.	.0000
49	2.1530	4.8527	.2895	.1317	.0000	4091.	.0000
50	2.2657	4.9677	.2826	.1197	.0000	4091.	.0000
51	2.3909	5.0866	.2758	.1087	.0000	4091.	.0000
52	2.5290	5.2086	.2692	.0986	.0000	4091.	.0000
53	2.6809	5.3332	.2627	.0894	.0000	4091.	.0000
54	2.8478	5.4605	.2564	.0811	.0000	4091.	.0000
55	3.0310	5.5905	.2503	.0736	.0000	4091.	.0000

(Se omiten los resultados intermedios)

68	7.6604	7.4685	.1848	.0212	.0000	4089.	.0000
69	8.2492	7.6205	.1809	.0194	.0000	4089.	.0000
70	8.8379	7.7628	.1774	.0179	.0000	4089.	.0000
71	9.5411	7.9217	.1736	.0163	.0000	4089.	.0000
72	10.3414	8.0901	.1697	.0148	.0000	4089.	.0000
73	11.1417	8.2470	.1663	.0136	.0000	4089.	.0000
74	12.0723	8.4171	.1626	.0123	.0000	4089.	.0000
75	13.1191	8.5947	.1590	.0112	.0000	4089.	.0000
76	14.1658	8.7601	.1557	.0102	.0000	4089.	.0000
77	15.3753	8.9379	.1524	.0093	.0000	4089.	.0000
78	16.7325	9.1231	.1490	.0084	.0000	4088.	.0000
79	18.0897	9.2953	.1460	.0077	.0000	4088.	.0000
80	19.4469	9.4562	.1433	.0071	.0000	4088.	.0000
81	21.0820	9.6370	.1403	.0064	.0000	4087.	.0000
82	22.9444	9.8283	.1372	.0058	.0000	4087.	.0000
83	24.6391	9.9905	.1348	.0054	.0000	4086.	.0000

Objeto: Un resumen de la distribución del compuesto disuelto en la zona vadosa.		
Columna	Encabezado de Columna	Contenido
1	Intervalo	Número de intervalos de tiempo concluidos.
2	Tiempo	Tiempo en días desde el inicio de la simulación.
3	Profundidad-Superior	Profundidad en metros de la orilla frontal del compuesto.
4	Profundidad-Inferior	Profundidad en metros del extremo final del compuesto.
5	Conc.-agua	Concentración del compuesto en la fase acuosa en la orilla frontal.
6	Masa	Masa total del compuesto en la zona vadosa.

Tabla 6.4: Localización del frente del compuesto

NOTA: Esta tabla de salida se produce solo hasta que se forme el lente NAPL. En ese momento el modelo OILENS se encarga de la salida.

 LOCALIZACION DEL FRENTE DEL COMPUESTO

Transporte de benceno de un derrame de 1500 gals.
 de gasolina 1.15% de benceno en la gasolina
 suelo arenoso, propiedades según Carsel y Parrish

COMPUESTO					
INTERVALO	TIEMPO	PROFUNDIDADES		CONC.-AGUA	MASA
		INFERIOR	SUPERIOR		
4	.2000	.5294	.0000	26.3920	9.329
5	.3000	.7941	.0000	26.3920	13.99
7	.5000	1.3235	.0000	26.3920	23.32
8	.6000	1.5882	.0000	26.3920	27.99
9	.7000	1.8529	.0000	26.3920	32.65
10	.8000	2.1176	.0000	26.3920	37.32
11	.9000	2.3823	.0000	26.3920	41.98
13	1.0107	2.6753	.0000	26.3920	46.64
23	1.1182	2.9598	.0000	26.3920	46.65
29	1.2248	3.2419	.0000	26.3920	46.65
33	1.3330	3.5283	.0001	26.3920	46.65
38	1.4399	3.7864	.0001	26.3920	46.65
41	1.5691	4.0416	.0001	26.3920	46.65
43	1.6771	4.2226	.0001	26.3920	46.65
45	1.8050	4.4107	.0002	26.3920	46.64
47	1.9668	4.6184	.0002	26.3920	46.64
49	2.1530	4.8265	.0002	26.3920	46.64
50	2.2657	4.9403	.0003	26.3920	46.64
51	2.3909	5.0578	.0003	26.3920	46.64
52	2.5290	5.1784	.0003	26.3920	46.64
53	2.6809	5.3015	.0003	26.3920	46.64
54	2.8478	5.4273	.0004	26.3920	46.64
55	3.0310	5.5556	.0004	26.3920	46.64

56	3.2321	5.6864	.0005	26.3920	46.64
57	3.4528	5.8197	.0005	26.3920	46.64

(Se omiten los resultados intermedios)

65	6.0533	6.9350	.0010	26.3920	46.63
66	6.5365	7.0879	.0011	26.3920	46.63
67	7.0717	7.2452	.0012	26.3920	46.62
68	7.6604	7.4057	.0013	26.3920	46.62
69	8.2492	7.5551	.0015	26.3920	46.62
70	8.8379	7.6949	.0016	26.3920	46.62
71	9.5411	7.8510	.0017	26.3920	46.62
72	10.3414	8.0163	.0019	26.3920	46.62
73	11.1417	8.1702	.0021	26.3920	46.62
74	12.0723	8.3370	.0022	26.3920	46.62
75	13.1191	8.5113	.0025	26.3920	46.62
76	14.1658	8.6733	.0027	26.3920	46.62
77	15.3753	8.8475	.0029	26.3920	46.62
78	16.7325	9.0288	.0032	26.3920	46.62
79	18.0897	9.1973	.0035	26.3920	46.62
80	19.4469	9.3547	.0037	26.3920	46.61
81	21.0820	9.5316	.0041	26.3920	46.61

Objeto: Un resumen de la configuración de la lente NAPL.		
Columna	Encabezado de Columna	Contenido
1	Intervalo	Número de intervalos de tiempo concluidos.
2	Tiempo	Tiempo en días desde el inicio de la simulación.
3	Altura de la lente	Altura en metros de la lente NAPL arriba de la zona de esparcido.
4	Radio de la Lente	Radio en metros de la lente NAPL.
5	Volumen de la Lente	Volumen del NAPL en la lente en metros cúbicos.
6	Volumen Residual	Volumen de NAPL en metros cúbicos atrapado al residual arriba y abajo de la lente.
7	Pérdidas de Volumen	Volumen acumulado de NAPL perdido por disolución en metros cúbicos.
8	Entrada acumulada	Volumen acumulado de entrada de NAPL a la lente en metros cúbicos.
9	Porcentaje de Error por Volumen	Porcentaje de error en el volumen calculado de NAPL en comparación con el volumen acumulado de entrada de NAPL a la lente. Este saldo de volumen no incluye el NAPL en la zona vadosa.

Tabla 6.5: Salida del modelo OILENS-descripción de la lente NAPL.

 * SALIDA DEL MODELO OILENS--DESCRIPCION DE LA LENTE DE PETROLEO *

Transporte de benceno de un derrame de 1500 gals.
 de gasolina 1.15% de benceno en la gasolina
 suelo arenoso, propiedades según Carsel y Parrish

INTERV.	TIEMPO (DIAS)	ALTURA LENTE (M)	RADIO LENTE (M)	VOLUMEN LENTE (M ³)	VOLUMEN RESIDUAL (M ³)	PERDIDAS VOLUMEN (M ³)	ENTRADA ACUM. (M ³)	PORCENT ERROR VOLUMEN
---------	---------------	------------------	-----------------	---------------------------------	------------------------------------	------------------------------------	---------------------------------	-----------------------

*** LLENADO CON PETROLEO DE LA FRANJA CAPILAR								
*** TIEMPO = 24.6391								
*** SATURACION DE PETROLEO EN LA LENTE = .3260								
*** ESPESOR DE LA FRANJA CAPILAR DE PETROLEO = .0100								
85	24.90	.0000	2.00	.02	.00	.00	.02	.20
93	25.01	.0011	2.02	.02	.00	.00	.02	.14
95	25.13	.0022	2.05	.03	.00	.00	.03	.11
96	25.27	.0035	2.08	.04	.00	.00	.04	.08
97	25.42	.0047	2.10	.05	.00	.00	.05	.06
98	25.68	.0069	2.15	.07	.00	.00	.07	.03
102	25.79	.0077	2.17	.08	.00	.00	.08	.03
115	25.92	.0086	2.20	.08	.00	.00	.08	.03
118	26.05	.0096	2.22	.09	.00	.00	.09	.02
120	26.21	.0107	2.25	.10	.00	.00	.10	.02

(Se omiten resultados intermedios)

241	807.00	.0045	16.35	1.99	.58	.09	2.66	.04
242	827.00	.0044	16.44	1.99	.59	.09	2.67	.05
243	847.00	.0042	16.52	1.98	.60	.09	2.67	.06
244	867.00	.0041	16.59	1.97	.60	.10	2.67	.07
245	887.00	.0040	16.67	1.97	.61	.10	2.68	.08
246	907.00	.0039	16.74	1.96	.62	.10	2.68	.10
247	927.00	.0038	16.81	1.96	.62	.11	2.68	.11
248	947.00	.0036	16.87	1.95	.63	.11	2.69	.13
249	967.00	.0035	16.94	1.95	.63	.11	2.69	.14
250	987.00	.0035	17.00	1.94	.64	.12	2.69	.16
251	1007.00	.0034	17.05	1.94	.64	.12	2.69	.18
252	1027.00	.0033	17.11	1.93	.65	.12	2.70	.19
253	1047.00	.0032	17.16	1.93	.65	.13	2.70	.21
254	1067.00	.0031	17.21	1.92	.65	.13	2.70	.23
255	1087.00	.0030	17.26	1.92	.66	.13	2.70	.25
256	1107.00	.0030	17.31	1.91	.66	.14	2.71	.27

Objeto: Un resumen de la salida de OILENS para el compuesto químico del hidrocarburo.		
Columna	Encabezado de Columna	Contenido
1	Tiempo	Tiempo en días desde el inicio de la simulación.
2	Radio de la Especie	Radio efectivo para el compuesto en metros.
3	Disolución de NAPL	Velocidad de disolución del NAPL en kilogramos por día.
4	Disolución de la especie	Velocidad de disolución del compuesto en kilogramos por día.
5	Disolución de la especie	Masa acumulada del compuesto disuelta en kilogramos.
6	Masa Degradada	Masa acumulada del compuesto degradado en kilogramos.
7	Masa Remanente	Masa remanente del compuesto en la lente en kilogramos.
8	Concentración en agua	Concentración del compuesto en la fase acuosa en contacto con el agua subterránea en miligramos por litro.
9	Porcentaje de Error del Balance de Masa	Porcentaje de error calculado en la masa del compuesto, basado en la entrada de masa a la lente.

Tabla 6.6: Salida del modelo OILENS–contaminantes acuosos.

 * SALIDA DEL MODELO OILENS--CONTAMINANTES ACUOSOS *

Transporte de benceno de un derrame de 1500 gals
 de gasolina 1.15% de benceno en la gasolina
 suelo arenoso, propiedades según Carsel y Parrish

TIEMPO (DIAS)	RADIO ESPECIE (M)	PETROLEO DISUELT. (KG/D)	ESPECIE DISUELT. (KG/D)	ESPECIE DISUELT. (KG)	MASA DEGRADADA (KG)	MASA REMANENT. (KG)	CONC. AGUA (MG/L)	PORC. ERROR MASA
25.83	2.00	.525E-02	.551E-04	.00	.00	.00	.12	.00
25.96	2.03	.531E-02	.131E-02	.00	.00	.07	2.80	.00
26.12	2.06	.540E-02	.269E-02	.00	.00	.15	5.60	.00
26.29	2.09	.550E-02	.387E-02	.00	.00	.24	7.87	.00
26.40	2.10	.556E-02	.450E-02	.00	.00	.29	9.05	.00
26.52	2.13	.563E-02	.517E-02	.00	.00	.35	10.24	.00
26.65	2.15	.571E-02	.579E-02	.00	.00	.41	11.27	.00
26.79	2.17	.579E-02	.645E-02	.00	.00	.48	12.33	.00
26.96	2.20	.589E-02	.713E-02	.00	.00	.56	13.36	.00
27.15	2.24	.600E-02	.782E-02	.01	.00	.65	14.34	.00
27.36	2.27	.613E-02	.851E-02	.01	.00	.75	15.24	.00
27.58	2.31	.626E-02	.920E-02	.01	.00	.85	16.07	.00
27.81	2.34	.641E-02	.983E-02	.01	.00	.96	16.77	.00
28.06	2.39	.655E-02	.105E-01	.01	.00	1.07	17.44	.00

(Se omiten los resultados intermedios)

607.0	15.09	.102	.647E-02	20.53	.00	.50	.64	.00
627.0	15.22	.104	.585E-02	20.65	.00	.45	.57	.00
647.0	15.35	.105	.530E-02	20.76	.00	.40	.51	.00
667.0	15.47	.106	.483E-02	20.87	.00	.36	.46	.00
687.0	15.58	.108	.442E-02	20.96	.00	.33	.41	.00
707.0	15.69	.109	.406E-02	21.04	.00	.30	.38	.00
727.0	15.80	.110	.375E-02	21.12	.00	.27	.34	.00
747.0	15.90	.111	.347E-02	21.19	.00	.25	.31	.00
767.0	16.00	.112	.323E-02	21.26	.00	.23	.29	.00
787.0	16.09	.113	.302E-02	21.32	.00	.21	.27	.00
807.0	16.18	.114	.283E-02	21.38	.00	.20	.25	.00
827.0	16.26	.115	.267E-02	21.44	.00	.19	.23	.00
847.0	16.34	.116	.252E-02	21.49	.00	.17	.22	.00
867.0	16.42	.117	.238E-02	21.54	.00	.16	.21	.00
887.0	16.49	.118	.226E-02	21.58	.00	.15	.19	.00
907.0	16.56	.119	.216E-02	21.63	.00	.15	.18	.00
927.0	16.63	.120	.206E-02	21.67	.00	.14	.17	.00
947.0	16.69	.120	.197E-02	21.71	.00	.13	.17	.00
967.0	16.76	.121	.189E-02	21.75	.00	.13	.16	.00
987.0	16.82	.122	.181E-02	21.79	.00	.12	.15	.00
1007.	16.88	.122	.175E-02	21.82	.00	.11	.14	.00
1027.	16.93	.123	.168E-02	21.86	.00	.11	.14	.00
1047.	16.98	.124	.163E-02	21.89	.00	.11	.13	.00
1067.	17.04	.124	.157E-02	21.92	.00	.10	.13	.00
1087.	17.09	.125	.152E-02	21.95	.00	.10	.12	.00
1107.	17.13	.125	.148E-02	21.98	.00	.09	.12	.00

Objeto: Un resumen de las saturaciones y concentraciones en la zona vadosa.		
Columna	Encabezado Columna	Contenido
1	Profundidad	La profundidad en metros.
2	Saturación	La saturación de la fase NAPL.
3	Concentración (agua)	La concentración del compuesto disuelto en la fase agua en miligramos por litro.
4	Concentración del NAPL disuelto	La concentración del NAPL disuelto en la fase agua en miligramos por litro.

Tabla 6.7: Perfil de saturación y concentración.

NOTA: Después de que se forme una lente de NAPL se trunca este perfil en la parte superior de la lente NAPL. Luego se produce un perfil radial de la lente NAPL.

PERFIL DE SATURACION Y CONCENTRACION A 25.0000

Transporte de benceno de un derrame de 1500 gals.
de gasolina 1.15% de benceno en la gasolina
suelo arenoso, propiedades según Carsel y Parrish

PROFUNDIDAD	SAT.	CONC.(AGUA)	CONC. NAPL DIS.
.0000	.0500	.0000	10.0000
.0000	.0500	.0000	10.0000
.0001	.0500	.0000	10.0000
.0006	.0500	.0000	10.0000
.0014	.0500	.0000	10.0000
.0024	.0501	.0000	10.0000
.0034	.0501	.0000	10.0000
.0042	.0501	.0000	10.0000
.0047	.0501	.0000	10.0000
.0049	.0501	.0000	10.0000
.0049	.0501	26.3920	10.0000
.0898	.0524	26.3920	10.0000
.4360	.0618	26.3920	10.0000
.9960	.0725	26.3920	10.0000
1.6731	.0814	26.3920	10.0000
2.3501	.0885	26.3920	10.0000
2.9101	.0936	26.3920	10.0000
3.2563	.0965	26.3920	10.0000
3.3412	.0972	26.3920	10.0000
3.3412	.0972	26.3920	10.0000
3.4263	.0978	26.3920	10.0000
3.7730	.1005	26.3920	10.0000
4.3338	.1044	26.3920	10.0000
5.0119	.1089	26.3920	10.0000
5.6899	.1130	26.3920	10.0000
6.2507	.1162	26.3920	10.0000
6.5975	.1181	26.3920	10.0000
6.6825	.1186	26.3920	10.0000
6.6825	.1186	26.3920	10.0000
6.7646	.1190	26.3920	10.0000
7.0995	.1208	26.3920	10.0000
7.6411	.1235	26.3920	10.0000
8.2959	.1267	26.3920	10.0000

8.9507	.1296	26.3920	10.0000
9.4923	.1320	26.3920	10.0000
9.8272	.1335	26.3920	10.0000
9.9093	.1338	26.3920	10.0000
9.9093	.1338	.0000	10.0000
9.9114	.1338	.0000	10.0000
9.9196	.1338	.0000	10.0000
9.9330	.1339	.0000	10.0000
9.9492	.1340	.0000	10.0000
9.9654	.1340	.0000	10.0000
9.9787	.1341	.0000	10.0000
9.9870	.1341	.0000	10.0000
9.9890	.1341	.0000	10.0000

MASA DEL PERFIL KOPT POR UNIDAD DE AREA:

NAPL	(KG/M/M)	323.8
NAPL DISUELTO	(KG/M/M)	.2132E-01
COMPUESTO	(KG/M/M)	3.708

MASA TOTAL DEL PERFIL KOPT:

COMPUESTO	(KG)	46.60
NAPL	(KG)	4069.

Objeto: Una descripción radial de la lente NAPL		
Columna	Encabezado de Columna	Contenido
1	Radio	Distancia radial en metros.
2	Lente actual de NAPL- Profundidad de la cima de la lente	Profundidad en metros desde la superficie del terreno hasta la cima de la lente NAPL actual.
3	Lente actual de NAPL- Profundidad a la base de la lente	Profundidad en metros desde la superficie del terreno hasta la base de la lente NAPL actual.
4	Extensión máxima de la lente NAPL-Profundidad a la cima de la lente	Profundidad en metros desde la superficie del terreno a la cima de la lente mas gruesa que haya ocurrido en un tiempo anterior al actual. El NAPL queda atrapado en la zona vadosa residual entre las profundidades para las columnas 2 y 4.
5	Extensión máxima de la lente NAPL-Profundidad a la cima de la lente	Profundidad en metros desde la superficie del terreno hasta la base de la lente mas gruesa que haya ocurrido antes de ese tiempo. El NAPL esta atrapado en el residual del acuífero entre las profundidades para las columnas 3 y 5.

Tabla 6.8: Perfil radial a través de la lente NAPL.

 * PERFIL RADIAL A TRAVES DE LA LENTE DE PETROLEO *

 TIEMPO = 25.0000
 RADIO DE LA LENTE = 2.0213
 PROFUNDIDAD AL NIVEL FREATICO = 10.0000

RADIO	LENTE ACTUAL DE PETROLEO		EXT.MAX.DE LA LENTE DE PETROLEO	
	PROF. A LA CIMA DE LENTE	PROF. A LA BASE DE LENTE	PROF. A LA CIMA DE LENTE	PROF. A LA BASE DE LENTE
.0000	9.9890	10.0025	9.9890	10.0025
2.0000	9.9890	10.0025	9.9890	10.0025
2.0011	9.9891	10.0024	9.9891	10.0024
2.0021	9.9891	10.0023	9.9891	10.0023
2.0032	9.9891	10.0023	9.9891	10.0023
2.0043	9.9891	10.0022	9.9891	10.0022
2.0053	9.9892	10.0021	9.9892	10.0021
2.0064	9.9892	10.0021	9.9892	10.0021
2.0075	9.9892	10.0020	9.9892	10.0020
2.0085	9.9893	10.0019	9.9893	10.0019
2.0096	9.9893	10.0018	9.9893	10.0018
2.0107	9.9893	10.0017	9.9893	10.0017
2.0117	9.9894	10.0017	9.9894	10.0017
2.0128	9.9894	10.0016	9.9894	10.0016
2.0139	9.9894	10.0015	9.9894	10.0015
2.0149	9.9895	10.0014	9.9895	10.0014
2.0160	9.9895	10.0012	9.9895	10.0012
2.0171	9.9896	10.0011	9.9896	10.0011
2.0181	9.9896	10.0010	9.9896	10.0010
2.0192	9.9897	10.0008	9.9897	10.0008
2.0203	9.9898	10.0006	9.9898	10.0006
2.0213	9.9900	10.0000	9.9900	10.0000

ENTRADA ACUMULADA A LA LENTE 17.35

BALANCES DE MASA GLOBALES DE KOPT Y OILENS
 MASA TOTAL DE NAPL AGREGADA EN LA FRONTERA (KG) 4091.
 MASA DE NAPL RECUPERADA POR EL BALANCE DE MASA (KG) 4086.
 PORCENTAJE DE ERROR - .1285

6.2 Archivo de Salida de HSSM-T

El archivo de salida de HSSM-T contiene los conceptos mostrados en la Tabla 6.9.

Título de la Tabla	Contenido
Datos de Entrada	Impresión en eco de los valores de los parámetros de entrada.
Flujo reducido de Entrada de Masa	Historia de flujo de masa utilizada por HSSM-T. El flujo de masa de entrada se reduce a 31 valores.
Historia de la Concentración en el Acuífero	Historias de concentración para cada localidad receptora.

Tabla 6.9: Resumen del archivo de salida de HSSM-T.

Transporte de benceno de una derrame de 1500 gals de gasolina.
 1.15% de benceno en la gasolina
 suelo arenoso, propiedades según Carsel y Parrish

TSGPLUME

DATOS DE ENTRADA:
 =====

```
HSSM-KO ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA  x2bt.dat
HSSM-KO ARCHIVO DE SALIDA             x2bt.HSS
HSSM-T ARCHIVO DE ENTRADA             x2bt.PMI
HSSM-T ARCHIVO DE SALIDA             x2bt.TSG
HSSM-T ARCHIVO DE GRAFICA             x2bt.PMP
HSSM PARAMETRO DE TERMINACION, KKSTOP 4
BANDERA DE INTERFAZ                   D
```

```
DISPERSIVIDAD LONG.    = 10.00    (M)
DISPERSIVIDAD TRANS.  = 1.000   (M)
DISPERSIVIDAD VERT.   = .1000   (M)
VELOCIDAD DE FILTRACION = .4128   (M/D)
POROSIDAD              = .4300   (*)
ESPESOR ACUIFERO      = 15.00   (M)
```

```
FACTOR DE RETARDO     = 1.291   (*)
PORC. RADIO MAX.      = 101.0   (*)
CONC. MIN. EN ACUIFERO = .1000E-02 (MG/L)
COEF. DE DECAIMIENTO = .0000   (1/D)
```

```
TIEMPO DE INICIO      = 100.0   (D)
TIEMPO DE TERMINACION = 5000.   (D)
INCREMENTO DE TIEMPO  = 50.00   (D)
NUM. DE POZOS DE OBS. =          6  (*)
```

```
LOC.-X  LOC.-Y
-----  -----
25.00   .0000
50.00   .0000
75.00   .0000
100.0   .0000
125.0   .0000
150.0   .0000
```

VELOCIDAD DE RECARGA = .00 (M/D)

EL modelo HSSM-KO es capaz de producir archivos de salida muy grandes, los que si se usan en forma directa en el modelo HSSM-T causarían que HSSM-T se ejecute muy lentamente. El modelo HSSM-T extrae una historia reducida del flujo de masa de entrada de la salida del modelo HSSM-KO contenido en el archivo *.PMI. La entrada reducida del flujo de masa contiene siempre 31 puntos.

FLUJO REDUCIDO DE MASA DE ENTRADA
HISTORIA USADA PARA EL COMPUTO
=====

	TIEMPO (D)	FLUJO DE MASA (KG/D)
1	25.83	.5510E-04
2	45.56	.3551E-01
3	65.30	.5216E-01
4	85.03	.6225E-01
5	104.8	.6770E-01
6	124.5	.6990E-01
7	163.8	.6743E-01
8	203.2	.6015E-01
9	242.5	.5114E-01
10	281.9	.4203E-01
11	321.2	.3379E-01
12	360.5	.2685E-01
13	399.9	.2122E-01
14	439.2	.1675E-01
15	478.6	.1333E-01
16	517.9	.1057E-01
17	557.2	.8479E-02
18	596.6	.6845E-02
19	635.9	.5605E-02
20	675.3	.4661E-02
21	714.6	.3942E-02
22	753.9	.3387E-02
23	793.3	.2960E-02
24	832.6	.2628E-02
25	872.0	.2350E-02
26	911.3	.2138E-02
27	950.6	.1955E-02
28	990.0	.1801E-02
29	1029.	.1674E-02
30	1069.	.1566E-02
31	1108.	.0000

INTERVALO DE TIEMPO DEMASIADO PEQUEÑO
PARA EL FLUJO DE MASA
INTERVALO DE TIEMPO MODIFICADO = 108.2 (D)

RADIO MAXIMO = 17.13 (M)
TIEMPO MAX. DEL RADIO = 1107. (D)
RADIO A FLUJO MAX. = 8.510 (D)
TIEMPO MAX. DE FLUJO = 124.5 (D)
RADIO EFECTIVO = 8.510 (M)
AREA EFECTIVA = 227.5 (M^ 2)
ESPESOR DE PENETRACION = 1.979 (M)

Los resultados del modelo HSSM-T se escriben como "historias de concentración del acuífero" para cada uno de los puntos receptores. Estos consisten de tiempos y concentraciones calculados para la ubicación del receptor.

HISTORIAS DE CONCENTRACION EN EL ACUIFERO

```

=====
TIEMPO      LOCALIZACION RECEPTOR
            ( X      25.00 )
            ( Y      .00 )
-----
30.09      .1002E-02
51.74      1.696
73.38      5.004
84.20      6.450
96.65      7.876
108.5      8.974
119.7      9.813
130.4      10.43
140.5      10.86
150.1      11.13
159.7      11.30
169.8      11.41
172.4      11.43
174.9      11.44
175.7      11.44
177.5      11.44
179.0      11.44
180.5      11.43
182.7      11.43
186.1      11.40
191.5      11.35
200.9      11.22
217.7      10.90

```

(Se omiten los resultados intermedios)

```

999.8      .3454
1025.      .3278
1048.      .3128
1070.      .3000
1093.      .2590
1116.      .1526
1138.      .7703E-01
1159.      .4481E-01
1179.      .2868E-01
1198.      .1956E-01
1216.      .1398E-01
1233.      .1035E-01
1250.      .7888E-02
1265.      .6158E-02
1280.      .4906E-02
1294.      .3978E-02
1307.      .3276E-02
1320.      .2735E-02
1332.      .2312E-02
1343.      .1976E-02
1354.      .1706E-02
1364.      .1486E-02
1374.      .1306E-02
1383.      .1157E-02
1400.      .9268E-03

```

Bibliografía

- Abriola, L., K. Rathfelder, M. Maiza, y S. Yadav, VALOR code version 1.0: A PC code for simulating immiscible contaminant transport in subsurface systems, RP2879-08, Electric Power Research Institute, Palo Alto, California, 1992.
- Baehr, A., y M. Corapcioglu, A compositional multiphase model for groundwater contamination by petroleum products: 2. Numerical solution, *Water Resources Research*, 23, 201–214, 1987.
- Bauman, B., Soils contaminated by motor fuels: Research activities and perspectives of the American Petroleum Institute, *Petroleum Contaminated Soils, Volume 1*, editado por P. Kostecki, y E. Calabrese, pgs. 3–19, Lewis Publishers, 1989.
- Bear, J., *Dynamics of Fluids in Porous Media*, Dover, Mineola, NY, 1972.
- Bouwer, H., Rapid field measurements of air entry value and hydraulic conductivity of soil as significant parameter in flow system analysis, *Water Resources Research*, 2, 729–738, 1966.
- Brakensiek, D., R. Engleman, y W. Rawls, Variation withing texture classes of soil water parameters, *Transactions of the American Society of Agricultural Engineers*, pgs. 335–339, 1981.
- Brooks, R., y A. Corey, Hydraulic Properties of Porous Media, Colorado State University Hydrology Paper No. 3, Colorado State University, Ft. Collins, Colorado, 1964.
- Brutsaert, W., Some methods of calculating unsaturated permeability, *Transactions of the American Society of Agricultural Engineers*, 10(3), 400–404, 1967.
- Carsel, R., y R. Parrish, Developing joint probability distributions of soil water retention characteristics, *Water Resources Research*, 24(5), 755–769, 1988.
- Carlsaw, H. W., y J. C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*, Oxford University Press, London, 2da Ed., 1959.
- Cary, J., J. McBride, y C. Simmons, Trichloroethylene residuals in the capillary fringe as affected by air-entry pressures, *Journal of Environmental Quality*, 18, 72–77, 1989.
- Charbeneau, R., y R. Asgian, Simulation of the transient soil water content profile for a homogeneous bare soil, *Water Resources Research*, 27(6), 1271–1279, 1991.
- Charbeneau, R., J. Weaver, y B. Lien, The Hydrocarbon Spill Screening Model (HSSM) Volume 2: Theoretical Background and Source Codes, EPA/600/R-94/039b, United States Environmental Protection Agency, 1995.
- Chemical Information Systems, Inc., *Information System for Hazardous Organics in Water (ISHOW) Database*, Towson, Maryland, 1984.
- Cline, P., J. Delfino, y P. Rao, Partitioning of aromatic constituents into water from gasoline and other complex solvent mixtures, *Environmental Science and Technology*, 23, 914–920, 1991.
- Demond, A., y P. Roberts, Effect of interfacial forces on two-phase capillary pressure- saturation relationships, *Water Resources Research*, 23(3), 423–437, 1991.
- Farr, A., R. Houghtalen, y D. McWhorter, Volume estimation of light nonaqueous phase liquids in porous media, *Ground Water*, 28, 48–56, 1990.

- Faust, C., Transport of immiscible fluids within and below the unsaturated zone: A numerical model, *Water Resources Research*, 21(4), 587–596, 1985.
- Forsythe, G., M. Malcolm, y C. Moler, *Computer Methods for Mathematical Computation*, Prentice–Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1977.
- Gelhar, L., K. Rehfeldt, y C. Welty, A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers, *Water Resources Research*, 28(7), 1955–1974, 1992.
- Green, W., y G. Ampt, Studies on soil physics, *Journal of Agricultural Science*, 4, 1–24, 1911.
- Huyakorn, P., y J. Kool, *Multiphase Analysis of Ground Water, Nonaqueous Phase Liquid, and Soluble Components in Three Dimensions*, Hydrologic Inc., Herndon, Virginia, 1992.
- Huyakorn, P., M. Unga, L. Mulkey, y E. Sudicky, A Three-dimensional analytical model for predicting leachate migration, *Ground Water*, 25(5), 588–598, 1982.
- Kemblowski, M., y C. Chiang, Hydrocarbon thickness fluctuations in monitoring wells, *Ground Water*, 28, 244–252, 1990.
- Kuppussamy, T., J. Sheng, J. Parker, y R. Lenhard, Finite-element analysis of multiphase immiscible flow through soils, *Water Resources Research*, 23, 625–631, 1987.
- Lenhard, R., y J. Parker, Estimation of free hydrocarbon volume from fluid levels in monitoring wells, *Ground Water*, 28, 57–67, 1990.
- Lenhard, R., J. Parker, y S. Mishra, On the correspondence between Brooks–Corey and van Genuchten models, *ASCE Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, 15(4), 744–751, 1989.
- Leverett, M., Capillary behavior in porous solids, *Transactions of the American Institute of Mining Engineers*, 142, 152–169, 1941.
- Mercer, J., y R. Cohen, A review of immiscible fluids in the subsurface: properties, models, characterization and remediation, *Journal of Contaminant Hydrology*, 6, 107–163, 1990.
- Mercer, J., D. Skipp, y D. Griffin, Basics of Pump–and–Treat Groundwater Remediation Technology, EPA/600/8-90/003, United States Environmental Protection Agency, 1990.
- Parker, J., R. Lenhard, y T. Kuppussamy, A parametric model for constitutive properties governing multiphase flow in porous media, *Water Resources Research*, 23, 618–624, 1987.
- Perry, R., y C. Chilton, *Chemical Engineering Handbook*, McGraw–Hall, New York, 1973.
- Rawls, W., y D. Brakensiek, Prediction of soil water properties for hydrologic modeling, *Proceedings of Symposium on Watershed Management*, pgs. 293–299, 1985.
- Rawls, W., D. Brakensiek, y B. Soni, Agricultural management effects on soil water processes part 1: Soil water retention and Green and Ampt infiltration parameters, *Transactions of the American Society of Agricultural Engineers*, 26, 1747–1752, 1983.
- Reible, D., T. Illangasekare, D. Doshi, y M. Malhiet, Infiltration of immiscible contamination in the unsaturated zone, *Ground Water*, 28, 688–692, 1990.
- Richards, L., Capillary conduction of liquids through porous mediums, *Physics*, 1, 318–333, 1933.
- Schiegg, H., Considerations on water, oil and air in porous media, *Water Science and Technology*, 17, 467–476, 1985.
- Schwille, F., Petroleum contamination of the subsoil: A hydrological problem, *The Joint Problems of the Oil and Water Industries*, pgs. 23–54, 1967.

- Sims, R., J. Sims, y S. Hansen, *Soil Transport and Fate Database 2.0 and Model Management System*, 1991.
- Su, C., y R. Brooks, Water retention measurement for soils, *ASCE Journal of the Irrigation and Drainage Division*, pgs. 105–112, 1980.
- Tauxe, J., ShowFlow: A Practical Interface for Groundwater Modeling, Tesis de maestría, The University of Texas at Austin, 1990.
- U.S. Environmental Protection Agency, Subsurface Contamination Reference Guide, EPA/540/2-90/011, United States Environmental Protection Agency, 1990.
- van Dam, J., The migration of hydrocarbons in a water-bearing stratum, *The Joint Problems of the Oil and Water Industries*, pgs. 55–88, 1967.
- van Genuchten, M., A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, *Soil Science Society of America Journal*, 44, 892–898, 1980.
- van Genuchten, M., F. Leij, y S. Yates, The (RET) Code for Quantifying the Hydraulic Functions of Unsaturated Soils, EPA/600/2-91/065, United States Environmental Protection Agency, 1991.
- Weaver, J., Approximate Multiphase Flow Modeling by Characteristic Methods, EPA/600/2-91/015, United States Environmental Protection Agency, 1991.
- Weaver, J., R. Charbeneau, y B. Lien, A screening model for nonaqueous phase liquid transport in the vadose zone using green-ampt and kinematic wave theory, *Water Resources Research*, 30(1), 93–105, 1994.
- Wilson, J., y S. Conrad, Is physical displacement of residual hydrocarbons a realistic possibility in aquifer restoration?, *Proceedings of the NWWA/API Conference on Petroleum Hydrocarbons and Organic Chemicals in Groundwater*, Houston, Texas, 1984.
- Wilson, J., S. Conrad, W. Mason, W. Peplinski, y E. Hagan, Laboratory Investigation of Residual Liquid Organics from Spills, Leaks, and the Disposal of Hazardous Wastes in Groundwater, EPA/600/6-90/004, United States Environmental Protection Agency, 1990.
- Wu, P., y H. Hottel, Data on fuel and combustion properties, *Fossil Fuel Combustion: A Source Book*, editado por W. Bartok, y A. Sarofim, Wiley, New York, 1991.

Apéndice A

Interfaz de MS-DOS, HSSM-DOS

La interfaz DOS para el modelo HSSM se divide en tres partes principales que se describen más adelante. Todos son programas independientes que pueden ejecutarse de una manera separada desde el punto de petición de DOS. Para conveniencia del usuario, se puede usar un programa sencillo de menús llamado HSSM-DOS para correr los programas en secuencia. En las siguientes incisos se describe en detalle cada componente de la interfaz de DOS.

A.1 Programa de Menús de HSSM-DOS

El programa HSSM-DOS tiene seis opciones para correr las partes de HSSM (Figura A.1). La corrida del modelo sigue generalmente el orden de las opciones del menú: creación y edición archivos de datos de entrada con PRE-HSSM, corrida de las simulaciones con HSSM-KO y HSSM-T, y graficado de los resultados con HSSM-PLT.

```
*****
*           MENU PARA HSSM           *
*****
1. Preparar Archivos de Entrada  RUN PRE-HSSM
2. Ver el Directorio
3. Correr KOPT y OILENS          RUN HSSM-KO
4. Correr TSGPLUME              RUN HSSM-T
5. Graficar Resultados          RUN HSSM-PLT
6. Salir
*****
INTRODUZCA UNA SELECCION (1-6):
```

Figura A.1: Menú HSSM-DOS.

Las siguientes incisos presentan cada parte de la interfaz de DOS. Cada una de estas descripciones contiene referencias a las incisos que contienen información detallada sobre como usar los componentes de la interfaz.

A.2 Entrada de Datos en PRE-HSSM

El programa PRE-HSSM es un preprocesador interactivo sencillo para el modelo HSSM. El programa PRE-HSSM permite al usuario crear archivos de datos por medio de un conjunto interactivo de menús. El usuario no tiene necesidad de conocer la estructura del archivo de datos. Se pueden crear varios conjuntos de datos de entrada en una sesión con PRE-HSSM y guardar en archivos de disco para uso futuro por el modelo HSSM. También se pueden leer y modificar archivos de datos creados en sesiones anteriores de PRE-HSSM. Se presentan los nombres de los parámetros y una descripción breve para su uso dentro de cada menú del preprocesador. Las pantallas de entrada de datos se discuten en forma detallada en el Apéndice A.8. Aunque esta información se proporciona

en línea, no hace que el modelo sea autoexplicativo. El usuario debe referirse a la guía del usuario para instrucciones específicas sobre la corrida del modelo. Todos los datos introducidos en PRE-HSSM deben escribirse en un archivo antes de que sean usados por el modelo HSSM. Cualquier dato que no se guardó antes de salir de PRE-HSSM o al iniciar con un conjunto nuevo de datos, se perderá. Se hace una comprobación mínima de los valores de los parámetros en PRE-HSSM, de manera que el usuario debe asegurarse que los valores sean razonables.

A.3 Cómputos por Medio de HSSM-KO y HSSM-T

Los dos programas ejecutables, HSSM-KO y HSSM-T efectúan simulaciones del modelo HSSM. El programa HSSM-KO contiene los modelos KOPT y OILENS y se corre primero. Al utilizar un archivo de datos de entrada previamente creado, el programa HSSM-KO crea un archivo formal de salida, varios archivos de gráficas y, si se fijan las banderas y condiciones apropiadas, el archivo de entrada para el modelo HSSM-T. Durante la ejecución, los datos son escritos en varios archivos temporales. Estos archivos son colocados en cadena después de la ejecución exitosa para formar los archivos de salida y de gráficas. Luego se borran los archivos temporales del disco duro. Si se interrumpe la ejecución del modelo HSSM-KO, los archivos temporales permanecen en el disco duro. Luego puede utilizarse el programa REBUILD para crear tantos archivos de salida como sea posible. El módulo TSGPLUME de HSSM se corre ejecutando HSSM-T. Este programa produce también un archivo formal de salida y un archivo de gráficas. En el Apéndice A.9 se dan las instrucciones para el uso de los comandos DOS para HSSM-KO y HSSM-T.

A.4 Graficado de Resultados en HSSM-PLT

Aunque existe mucha información útil en los archivos formales de salida de los modelos HSSM-KO y HSSM-T, también es deseable y útil la exhibición gráfica de los resultados del modelo. El programa HSSM-PLT permite la presentación e impresión de la salida del modelo HSSM. Los archivos de gráficas que son creados automáticamente por HSSM-KO y HSSM-T son usados por HSSM-PLT para graficar la salida. El usuario dispone de siete tipos diferentes de gráficas. Estas gráficas se presentan en la pantalla y pueden imprimirse en varios tipos de impresoras y de graficadores. En el Apéndice A.10 se da información específica para el uso de HSSM-PLT.

A.5 Resumen Rápido de los Comandos de la Interfaz de DOS

La Tabla A.1 enumera los comandos MS-DOS que pueden usarse para correr el modelo HSSM sin correr el programa de menús de HSSM-DOS. Los detalles completos de los procedimientos se describen en los incisos siguientes.

Nótese que el modelo HSSM requiere un conjunto fijo de tipos de archivos para sus archivos de entrada y salida. Los programas HSSM-T y HSSM-PLT sólo funcionan de una manera adecuada cuando se usan los tipos requeridos de archivos. El programa PRE-HSSM puede usarse para generar automáticamente los tipos requeridos de archivos. En la Tabla 4.8 del Inciso 4.7 se describen los tipos de archivos requeridos.

A.6 Requisitos del Sistema

Para usar la interfaz de DOS, el usuario debería estar familiarizado en forma general con computadoras personales, el sistema DOS, y el modelo HSSM. También se supone que los usuarios están familiarizados con el hardware del sistema (p. ej., que dispositivo de salida esta conectado con cual puerto). Abajo se enumeran los requisitos de hardware y software para usar la interfaz MS-DOS.

Comando	Acción
Uso automatizado de la interfaz:	
HSSM-DOS	Acciona el programa de menús en DOS que ejecuta automáticamente los comandos enumerados abajo.
Para entrada manual de los comandos en el punto de petición DOS:	
PRE-HSSM	Ejecuta el preprocesador interactivo de datos de entrada.
HSSM-KO name.DAT	Ejecuta los módulos KOPT y OILENS de HSSM, usando el conjunto de datos name.DAT .
HSSM-T name.PMI	Ejecuta el módulo TSGPLUME de HSSM, usando el conjunto de datos de entrada name.PMI generado por una ejecución anterior de HSSM-KO.
HSSM-PLT	Ejecuta el post-procesador interactivo gráfico.

Tabla A.1: Resumen rápido de los comandos de HSSM en MS-DOS.

- DOS 5.0 o mayor
- 400 Kb de RAM libre
- Disco duro (recomendable)

El uso del paquete gráfico de HSSM-PLT requiere lo siguiente:

- Dispositivo gráfico que sea EGA, VGA, o mejor.
- Driver ANSI.SYS instalado en el archivo CONFIG.SYS.

Se soportan las siguientes impresoras:

- 1) EPSON 9-pin, carro angosto
- 2) EPSON 24-pin, de la serie LQ, carro angosto
- 3) EPSON 24-pin, de la serie LQ, carro ancho
- 4) NEC Pinwriter, 24-pin, carro angosto
- 5) NEC Pinwriter, 24-pin, carro ancho
- 6) Okidata, 9-pin, carro angosto
- 7) HP LaserJet/DeskJet - de baja resolución.
- 8) HP LaserJet/DeskJet - de mediana resolución.
- 9) HP LaserJet/DeskJet - de alta resolución.
- 10) HP PaintJet - 2 colores, de baja resolución.
- 11) HP PaintJet - 4 colores, de mediana resolución.
- 12) HP PaintJet - 8 colores, de alta resolución.
- 13) HP PaintJet - 16 colores, de alta resolución.
- 14) impresora Postscript
- 15) Graficador HP - HPGL
- 16) HP LaserJet III - modo HPGL/2
- 17) Graficador Houston Instruments DM/PL

La cantidad de la memoria disponible en el sistema puede verificarse marcando el comando en DOS 5.0 MEM. Se presentará la cantidad de memoria disponible para correr un programa de DOS. Esta cantidad debe exceder a

los 400 Kb para poder correr HSSM-KO. Aunque se indica que el DOS versión 5.0 como nivel mínimo de DOS requerido para correr HSSM, las versiones anteriores pueden ser probablemente adecuadas; no se han probado las versiones anteriores a 5.0.

A.7 Instalación

El software del modelo HSSM se distribuye en dos disquetes de alta densidad. Se debería hacer una copia de respaldo de estos disquetes y el trabajo subsiguiente debería llevarse a cabo a partir de las copias de respaldo. El disquete de distribución para HSSM-DOS (HSSM-1-d) contiene los archivos indicados en la Tabla A.2.

Archivo	Objetivo
HSSMDOS.EXE	Programa de menús de DOS
PREHSSM.EXE	Procesador interactivo de entrada de datos
HSSMKO.EXE	Módulos KOPT y OILENS de HSSM
HSSM-T.EXE	Módulo TSGPLUME de HSSM
HSSMPLT.EXE	Postprocesador interactivo de gráficas
REBUILD.EXE	Programa de recuperación para simulaciones interrumpidas
CONFIG.PLT	Archivo de configuración del hardware para HSSM-PLT.EXE
SIMPLEX1.FNT	Archivo de fuentes para HSSM-PLT.EXE
README.TXT	Archivo "Leeme" que contiene información para su distribución
RAOULT.EXE	Utilería para efectuar el cálculo de la ley de Raoult
RAOULT.DAT	Conjunto de datos por default para la utilería de RAOULT
SOPROP.EXE	Utilería para estimar las propiedades de los suelos con las ecuaciones de regresión según <i>Rawls y Brakensiek</i> (1985).
NTHICK.EXE	Utilería para estimar el espesor de NAPL en el nivel freático

Tabla A.2: Lista de empaque de archivos para la interfaz HSSM-DOS.

A continuación se describe como instalar el modelo. Verifique el archivo **README.TXT** para información sobre procedimientos automatizados de instalación, ya que están en desarrollo a la fecha de este escrito. Para crear el directorio HSSM introduzca el comando DOS:

```
MKDIR C:\HSSM
```

en donde HSSM es el nombre del subdirectorio HSSM-DOS. Con el disquete HSSM-1-d en el drive A, copie todos los archivos desde el disquete al directorio HSSM con el comando DOS:

```
COPY A:\*.* C:\HSSM
```

(El programa puede instalarse desde otro drive, digamos el B, reemplazando "A:" en el comando anterior por "B:"). Los problemas ejemplo y los archivos de salida contenidos en el disquete HSSM-2 deberían instalarse en

un directorio separado. Crea el directorio para problemas ejemplo tecleando:

```
MKDIR C:\HSSM\EXAMPLE
```

Después de colocar el disquete HSSM-2 en el drive A, se copian los archivos a ese directorio tecleando:

```
COPY A:\*.* C:\HSSM\EXAMPLE
```

Se pueden y se deberían crear subdirectorios para cada simulación de HSSM. Por ejemplo, para crear un directorio PROJECT1, teclee el comando:

```
MKDIR C:\HSSM\PROJECT1
```

Al dar el comando DOS

```
CD\HSSM\PROJECT1
```

antes de ejecutar el modelo HSSM, todos los archivos de entrada y salida para la simulación estarán en C:\HSSM\PROJECT1. La instalación de ambas interfaces para DOS y Windows en una máquina se discute en el Apéndice J.

Una vez que se haya cargado el modelo HSSM-DOS en su sistema, deberá verificar el archivo **CONFIG.SYS**. El programa HSSM-KO abre un número de archivos temporales y **CONFIG.SYS** debe estar configurado de manera que se pueda abrir un número suficiente de archivos. El archivo **CONFIG.SYS** en su sistema deberá incluir la línea

```
FILES = 30
```

(Un número mayor de 30 también trabajará.) Para poder usar el modelo HSSM desde cualquier directorio agregue C:\HSSM en la declaratoria de trayectoria en su archivo **AUTOEXEC.BAT**. Después de modificar estos archivos, debe volver a arrancar su sistema para permitir que se efectúen los cambios.

A.8 Uso del Preprocesador PRE-HSSM

El primer paso para correr el modelo HSSM es el de correr el preprocesador PRE-HSSM para crear y/o editar los conjuntos de datos de entrada. El programa PRE-HSSM se proporciona para la conveniencia del usuario; su empleo facilita mucho la generación de conjuntos de datos de entrada. Por conveniencia se proporcionan en el Apéndice M formatos en blanco para cada una de estas pantallas. Estas plantillas son útiles para formar los conjuntos de datos y pueden copiarse para su uso repetido. El Apéndice K muestra la estructura de los archivos de entrada para los modelos HSSM-KO y HSSM-T para los usuarios experimentados del modelo HSSM quienes deseen editar directamente sus conjuntos de datos de entrada.

En la Figura A.2 se muestra la pantalla principal del preprocesador PRE-HSSM. Esta pantalla indica también el menú de selección de archivos. Las opciones disponibles para el usuario son

1. Marque 0 o **<RETORNO>** para crear un conjunto nuevo de datos.
2. Marque 1 seguido por un **<RETORNO>** para editar un conjunto de datos creado con anterioridad. Se presenta el mensaje

```
INTRODUZCA EL NOMBRE DEL ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA
----+----*- Límite 40-caracteres*----+----*
```

```

*****
*
*           PRE-HSSM VERSION 1.50
*
* PREPROCESADOR INTERACTIVO PARA EL MODELO HSSM
*
*           JIM WEAVER
*
* UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY
*   R.S. KERR ENVIRONMENTAL RESEARCH LABORATORY
*           ADA, OKLAHOMA 74820
*           DONALD COLLINGS
*   NSI TECHNOLOGY SERVICES CORPORATION
*           ENVIRONMENTAL SCIENCES
*           ADA, OKLAHOMA 74820
*           NOV 7, 1992
*
*****

```

DESEA LEER UN ARCHIVO DE DATOS EXISTENTE ?

```

MARQUE 0 0 <RETORNO> EN EL CASO DE NO
MARQUE 1           EN EL CASO DE SI
MARQUE 2           PARA VER EL DIRECTORIO
MARQUE 3           PARA UN CONJUNTO MUESTRA DE DATOS
MARQUE 4           PARA SALIR DEL PROCESADOR

```

Figura A.2: Pantalla de introducción de PRE-HSSM.

en la pantalla. Se permiten cuarenta caracteres para el nombre del archivo de datos. Se puede incluir un nombre de trayectoria DOS. Si no existe el archivo, el mensaje

NO EXISTE ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA--VUELVA ENTRAR

aparece en la pantalla. Si el archivo no es un archivo de entrada válido para el modelo HSSM, el mensaje

ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA INVALIDO
Paro - Programa terminado.

aparece y el programa debe ser arrancado de nuevo.

3. Marque 2 seguido por un <RETORNO> para inspeccionar el directorio actual. Esta opción ejecuta el comando DOS DIR [MORE, de manera que se pueda ver el directorio pantalla por pantalla. Después de concluir el comando se regresa al usuario al menú de selección de archivos.
4. Marque 3 seguido por un <RETORNO> para editar un conjunto muestra de datos. Este conjunto de datos se proporciona únicamente para conveniencia del usuario y no se pretende para aplicación a problemas específicos.
5. Salir del preprocesador marcando 4 y oprimiendo <RETORNO>.

A.8.1 Guardar los Datos en un Archivo

Antes de discutir los menús individuales de datos de PRE-HSSM, se explica el procedimiento para guardar datos en archivos y salir de PRE-HSSM. Como se indicó anteriormente, todos los datos introducidos en PRE-HSSM deben escribirse en un archivo antes de salir o de volver a arrancar PRE-HSSM; de otra manera se perderán todas las entradas y/o cambios. Se le pide al usuario guardar los datos antes de salir o volver a arrancar.

```

VAS A GUARDAR LOS VALORES DE ENTRADA EN UN ARCHIVO ?

*****
***TODOS LOS DATOS INTRODUCIDOS EN PRE-KOPT DEBEN***
*****GUARDARSE EN UN ARCHIVO ANTES DE SALIR*****
*****

MARQUE 0 O <RETORNO> EN CASO NEGATIVO
MARQUE 1           EN CASO AFIRMATIVO
```

Figura A.3: Escritura de archivos de datos.

La pantalla mostrada en la Figura A.3 pide al usuario decidir si escribe o no el archivo de datos actual a un archivo en el disco. Esta pantalla se presenta después de que el usuario haya seleccionado ningún cambio en el menú principal (Figura A.6). Para guardar los datos en un archivo de disco, marque 1; de otra manera, oprima <RETORNO>.

```

SELECCIONE UN ARCHIVO PARA ESCRIBIR:
NOMBRE ACTUAL DEL ARCHIVO DE ENTRADA: muestra.dat
NOMBRE ACTUAL DEL ARCHIVO DE SALIDA: <<NINGUNO>>

MARQUE 0 O <RETORNO> PARA SALIR SIN ESCRIBIR A NINGUN ARCHIVO
MARQUE 1           PARA CAMBIAR EL NOMBRE DEL ARCHIVO DE DATOS
MARQUE 2           PARA ESCRIBIR SOBRE EL ARCHIVO ACTUAL DE ENTRADA
```

Figura A.4: Selección de nombres de archivos.

Cuando se marca 1 en la Figura A.3, aparece la Figura A.4, presentando el nombre del archivo actual de entrada y el nombre del archivo de salida, y se dan tres opciones al usuario.

Marcar 0 o <RETORNO> para salir sin escribir ningún archivo de datos.

Marcar 1 para cambiar el nombre del archivo de datos y escribir los datos a este archivo.

Marcar 2 para escribir los datos con el nombre actual del archivo de entrada.

Después de seleccionar si escribe o no un archivo en el disco, se le pregunta al usuario si continua en PRE-HSSM o se sale (Figura A.5).

1. Marque 0 o <RETORNO> para continuar con el mismo conjunto de datos que acaba de ser creado o editado. Esta opción regresa el control al Menú principal de PRE-HSSM (Figura A.6).

DESEA CONTINUAR ?

MARQUE 0 O <RETORNO> PARA CONTINUAR CON EL MISMO CONJUNTO DE DATOS
MARQUE 1 PARA VOLVER A ARRANCAR CON UN NUEVO CONJUNTO DE DATOS
MARQUE 2 PARA SALIR DEL PREPROCESADOR

Figura A.5: Salir de PRE-HSSM.

2. Marque 1 y oprima <RETORNO> para volver a arrancar PRE-HSSM con un nuevo conjunto de datos. Esta opción regresa el control a la pantalla introductoria de PRE-HSSM (Figura A.2).
3. Marque 2 y oprima <RETORNO> para salir de PRE-HSSM. Al seleccionar esta opción se regresa al usuario al punto de petición de DOS. Los datos escritos anteriormente en los archivos quedan almacenados en el disco; los datos que no se guardaron con anterioridad en archivos se pierden.

A.8.2 Comandos del Menú Principal PRE-HSSM

La Figura A.6 enumera los nombres de las pantallas de entrada de datos de PRE-HSSM. La mayoría de los renglones en el menú principal corresponden a un renglón en el archivo de datos usado por el modelo. Las siguientes opciones están disponibles para su uso con este menú y cada uno de sus dieciséis sub-menús:

1. Marque 0 o oprima <RETORNO> para ningún cambio en cualquier concepto de datos.
2. Seleccione un número de renglón para inspeccionar/editar los campos de datos asociados con éste introduciendo un número de línea de 1 hasta 16 y oprimiendo <RETORNO>.
3. Marque -1 y oprima <RETORNO> para inspeccionar/editar todos los sub-menús en sucesión. Esta opción ordenará a PRE-HSSM pasar a través de cada uno de los sub-menús. Una vez que se haya iniciado esta opción, debe continuarse hasta su terminación. No hay manera de escapar fuera de esta secuencia, sin perder todos los datos introducidos durante la sesión.

A.8.3 Creación y Edición de Conjuntos de Datos de HSSM

Las siguientes páginas documentan cada menú de entrada de datos. Se enumeran en el orden en que aparecerían, si el usuario hubiera elegido la opción -1 en el menú principal de PRE-HSSM (revisar todos los conceptos en el menú). Los conceptos de datos se agrupan en primer lugar por su función dentro del modelo. Como resultado, algunos parámetros aparecen sobre pantallas a las que, a primera vista, no pertenecen. Este arreglo se debe a la modularidad del código.

Cada pantalla sigue el siguiente formato: Cada concepto de dato está numerado, y después de su nombre de variable en el modelo HSSM, se encuentra una breve descripción de su uso y su valor actual. Para cambiar un valor, introduzca el número de concepto y oprima <RETORNO>, luego introduzca el nuevo valor y oprima nuevamente <RETORNO>. Cada vez que se concluya una sola modificación o una serie de modificaciones, el preprocesador presentará los datos nuevos para su inspección y aprobación. Se puede modificar cada concepto de datos cualquier número de veces mientras que se presente la pantalla, pero solamente los valores exhibidos antes salir de la pantalla se guardan en la memoria principal (RAM). Después de modificar todos los conceptos deseados de datos, el juego completo de datos puede escribirse en un archivo en el disco. Hasta este momento todos los datos se encuentran únicamente almacenados en la memoria RAM, y se perderán si se sale o aborta el programa PRE-HSSM.

Las siguientes unidades se usan en el modelo HSSM y se enumeran con su uso y abreviatura (Tabla A.3). Debe tenerse cuidado para asegurarse que las entradas se conviertan a este conjunto de unidades.

PANTALLAS DE ENTRADA DE DATOS DE HSSM

- 1.....INTERRUPTORES DE CONTROL DE SIMULACION
- 2.....NOMBRES DE ARCHIVOS DE SALIDA Y DE GRAFICAS
- 3.....TITULO DE LA CORRIDA
- 4.....PROPIEDADES DE LA MATRIZ
- 5.....PROPIEDADES HIDRAULICAS
- 6.....PROPIEDADES DE LA FASE DE HIDROCARBURO (NAPL)
- 7.....APROXIMACION DE LA SUCCION CAPILAR
- 8.....FLUJO DE NAPL, VOLUMEN O CARGA CONSTANTE
- 9.....CONCENTRACION DEL COMPUESTO DISUELTO
- 10....COEFICIENTES DE PARTICION LINEAL DE EQUILIBRIO
- 11....SUB-MODELO.1 OILENS
- 12....SUB-MODELO.2 OILENS
- 13....PARAMETROS DE SIMULACION
- 14....NUMERO DE PERFILES
- 15....TIEMPOS DE PERFILADO
- 16....PARAMETROS DE ENTRADA DE TSGPLUME

QUIERE CAMBIAR O REVISAR LOS VALORES DE DATOS DE ENTRADA ?
 MARQUE 0 O <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
 MARQUE <NUMERO DE RENGLON> PARA UN SOLO RENGLON
 MARQUE -1 PARA TODOS LOS RENGLONES EN SUCESION

Figura A.6: PRE-HSSM menú principal.

Cantidad	Unidad	Abreviación Usada en PREHSSM
Tiempo	día	D
Profundidad	metro	M
Viscosidad dinámica	centipoise	CP
Densidad	gramos/centímetro cúbico	G/CC
Tensión superficial	dina/centímetro	DINA/CM
Concentración	miligramos/litro	MG/L
Coefficiente de part. suelo-agua	litros/kilogramo	L/KG
Dispersividad	metros	M
Variosa	dimensional	*

Tabla A.3: Unidades requeridas para HSSM.

PANTALLA 1. INTERRUPTORES DE CONTROL DE SIMULACION

```
1 IWR    INTERRUPTOR DE IMPRESION
          0 NO SE PRODUCEN ARCHIVOS DE SALIDA
          1 SE PRODUCEN TODOS LOS ARCHIVOS DE SALIDA
2 IKOPT  SOLAMENTE IMPRESION EN ECO (SI IWR = 1)
          0 SOLO LEE E IMPRIME EN ECO LOS DATOS
          1 CORRER EL MODELO KOPT
3 ICONC  INTERRUPTOR DE COMPUESTO DISUELTO
          0 NO EXISTE COMPUESTO
          1 SIMULA COMPUESTO DISUELTO
4 ILENS  INTERRUPTOR DE OILENS
          0 NO CORRE EL MODELO OILENS
          1 CORRE EL MODELO OILENS
5 ITSQP  INTERRUPTOR DE TSGPLUME
          0 NO CREA ARCHIVO DE ENTRADA PARA MODELO TSGPLUME
          1 CREA ARCHIVO DE ENTRADA PARA MODELO TSGPLUME
```

```
MARQUE 0 0 <RETORNO>          PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1                      PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA
```

Figura A.7: Interruptores de control de simulación.

Pantalla 1 (Figura A.7)

1. Introduzca el interruptor entero de impresión (0 o 1). Marcar 0 causa que no se produzca salida, de manera que normalmente se introducirá 1 para esta variable.
2. Introduzca el interruptor entero de KOPT impresión en eco (0 o 1). Tecleando 0 se imprimirá en eco el conjunto de datos de entrada sin efectuar una simulación (si IWR esta puesto en 1). Marcando 1 hará que el programa lea los datos y corra el módulo KOPT de HSSM. KOPT simula la infiltración del NAPL a través de la zona vadosa. Es necesario correr KOPT a fin de correr OILENS o TSGPLUME.
3. Introduzca el interruptor de compuesto disuelto (0 o 1). Tecleando 0 se simula el flujo de la fase NAPL sin compuesto disuelto. Marcando 1 se permite la simulación de un compuesto disuelto dentro de la fase NAPL. TSGPLUME requiere un compuesto disuelto.
4. Introduzca el interruptor entero para OILENS (0 o 1). Tecleando 0 se evitará que corra el modelo OILENS. Marcando 1 se permitirá que corra el modelo OILENS, si el NAPL llega al agua en cantidad suficiente.
5. Marque el interruptor de creación de datos para TSGPLUME (0 o 1). Tecleando 0 evitará que el modelo HSSM-KO crea el conjunto de datos de entrada de TSGPLUME (HSSM-T). Marcando 1 permitirá al modelo HSSM-KO crear el conjunto de datos de entrada para TSGPLUME, si existe un compuesto disuelto que llegue al nivel freático.

Para que pueda funcionar adecuadamente el modelo HSSM-T y el postprocesador de HSSM-PLT, se *requiere* un conjunto especificado de tipos de archivos (la extensión de tres caracteres a continuación del nombre de archivo; p. ej., **nombre.typ**) para ser usado por HSSM-KO. La interfaz PRE-HSSM asigna automáticamente los nombres de archivo requeridos cada vez que se almacena un conjunto de datos en el disco.

PANTALLA 3. TITULO DE LA CORRIDA

- 1.. TRANSPORTE DE BENCENO DE UN DERRAME DE 1500 GAL DE GASOLINA
- 2.. 1.15% DE BENCENO EN LA GASOLINA
- 3.. SUELO ARENOSO, PROPIEDADES SEGUN CARSEL Y PARISH

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

Figura A.8: Título de la corrida.

Pantalla 3 (Figura A.8)

La Pantalla de Título de Corrida (Figura A.8) permite al usuario introducir tres líneas de hasta 50 caracteres cada una de información relacionada con el conjunto de datos. Se presenta una escala graduada de 50 caracteres para mayor conveniencia al introducir el título. La información de esta pantalla se reproduce como encabezados a través de todos los archivos de salida generados por KOPT/OILENS.

- Cualquier línea puede modificarse introduciendo su número en el punto de petición, o
- Las tres líneas pueden modificarse en sucesión marcando -1 en el punto de petición.
- El título actual se acepta oprimiendo <**RETORNO**> o marcando 0.

PANTALLA 4. PROPIEDADES DE LA MATRIZ

```

1 WKS  CONDUCTIVIDAD HIDRAULICA SATURADA
      VERTICAL (M/D)                    7.1000
2 RKS  RELACION ENTRE CONDUCTIVIDAD HORIZONTAL
      Y VERTICAL (*)                    2.5000
3 KRF  INDICE DE SELECCION DE PERMEABILIDAD
      RELATIVA                          2
      1 = BURDINE--BROOKS/COREY
      2 = BURDINE--EQUIVALENTE A VAN GENUCHTEN
4 XLAMB INDICE DE TAMANO DE PORO (*)    2.6800
      SI KRF = 1, LAMBDA
      SI KRF = 2, N
5 ETA  POROSIDAD (*)                   0.4300
6 SWR  SATURACION RESIDUAL DE AGUA (*)  0.1000

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

```

Figura A.9: Propiedades del medio poroso.

Pantalla 4 (Figura A.9)

1. Introduzca el valor de la conductividad hidráulica vertical saturada de la fase acuosa, K_{sw} , en metros por día. La conductividad hidráulica saturada es uno de los parámetros más importantes del modelo. La estimación de este parámetro se describe en el Apéndice C.1 "Propiedades de Suelos." Este apéndice contiene datos de dos tablas de propiedades de suelos.
2. Introduzca la relación de la conductividad hidráulica saturada horizontal de la fase acuosa con la conductividad hidráulica vertical saturada de la fase acuosa. La anisotropía no se trata en forma directa en el modelo HSSM, el modelo usa más bien el producto de la relación RKS y la conductividad saturada vertical, K_s , para determinar la conductividad hidráulica del acuífero. Esta última conductividad se usa también para determinar la conductividad efectiva de NAPL para el esparcido de la lente. Las relaciones entre las conductividades se resumen en la Tabla A.4.

Modelo y Región	Conductividad Hidráulica Usada	Variables de HSSM
Zona vadosa (KOPT)	Vertical	K_{sw}
Lente NAPL (OILENS)	Horizontal	$K_{sw} * RKS$
Acuífero (TSGPLUME)	Horizontal	$K_{sw} * RKS$

Tabla A.4: Resumen de relaciones de conductividad.

3. Seleccione el modelo de presión capilar marcando 1 para Brooks y Corey o 2 para el equivalente de van Genuchten. Seleccione el modelo de presión capilar para ser usado en los cálculos de HSSM. En el Apéndice C.1 "Propiedades del Suelo" se da información adicional sobre la selección de los parámetros del modelo. Se pueden emplear parámetros de modelo según ya sea Brooks y Corey o van Genuchten. El apéndice contiene valores típicos de los parámetros para cada uno de estos modelos. Aunque HSSM esta

diseñado para usar el modelo de Brooks y Corey, pueden cargarse parámetros del modelo de van Genuchten como entrada. Los parámetros del modelo de van Genuchten se convierten en forma aproximada a parámetros equivalentes del modelo de Brooks y Corey por medio de un procedimiento desarrollado por *Lenhard et al.* (1989).

Para el Modelo de Brooks y Corey:

La ecuación del modelo de *Brooks y Corey* (1964) que describe la relación entre la saturación S_w y la altura capilar h_c esta dada por

$$\left(\frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right) = \left(\frac{h_{ce}}{h_c} \right)^\lambda \quad (\text{A.1})$$

en donde la saturación residual del agua, S_{wr} , la carga de entrada de aire, h_{ce} , y el índice de distribución del tamaño de poro, λ , son parámetros de ajuste.

λ de Brooks & Corey

El parámetro λ se llama índice de distribución del tamaño de poro, y se determina ya sea adaptando el modelo de Brooks & Corey a la curva de presión capilar agua/aire $P_c(S_w)$ por medio de un procedimiento planteado por *Brooks y Corey* (1964) o por medio del ajuste de una curva no-lineal (p. ej. *van Genuchten et al.*, 1991).

Para el Modelo de van Genuchten:

NOTA: El seleccionar el modelo de van Genuchten causa que el modelo HSSM calcule parámetros aproximadamente equivalentes del modelo de Brooks y Corey como se describe en el Apéndice E.

El Modelo de van Genuchten esta definido por

$$\frac{\theta_w - \theta_{wr}}{\theta_m - \theta_{wr}} = \frac{1}{[1 + (\alpha h_c)^n]^m} \quad (\text{A.2})$$

donde θ_w = contenido volumétrico de agua

h_c = altura capilar con unidades de m

θ_{wr} = contenido volumétrico de contenido de agua residual

θ_m = contenido volumétrico máximo de agua

α = un parámetro con unidades de m^{-1}

n = un parámetro

m = un parámetro (tomado como una función simple de n)

Para el modelo HSSM el término reducido de contenido de agua (lado izquierdo del modelo de van Genuchten) se toma como igual a

$$\frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \quad (\text{A.3})$$

en donde se supone que la saturación máxima de agua, θ_m , es igual a la porosidad. Los parámetros del modelo de van Genuchten pueden ajustarse a los datos medidos empleando un programa de ajuste como RETC (*van Genuchten et al.*, 1991).

4. Introduzca ya sea la λ de Brooks y Corey o la n de van Genuchten, dependiendo del modelo de curva de presión capilar seleccionado.
5. Introduzca la porosidad, η
6. Introduzca la saturación residual de agua, que se determina a partir de la curva medida de presión capilar.

PANTALLA 5. PROPIEDADES HIDRAULICAS

1	WMU	VISCOSIDAD DINAMICA DEL AGUA (CP)	1.0000
2	WRHO	DENSIDAD DEL AGUA (G/CC)	1.0000
3	IRT	TIPO DE ENTRADA DE RECARGA	1
		1 = FLUJO ESPECIFICADO	
		2 = SATURACION ESPECIFICADA	
4	QW/SWMAX	FLUJO CONSTANTE DE AGUA O FLUJO SATURADO: (M/D)	0.0140
		SATURACION: (*)	
5	XMKRW	PERMEABILIDAD MAX. RELATIVA DURANTE INFILTRACION (*)	0.5000
6	WTABLE	PROFUNDIDAD AL NIVEL FREATICO (M)	10.0000

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
 MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
 MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

Figura A.10: Propiedades hidráulicas.

Pantalla 5 (Figura A.10)

1. Introduzca la viscosidad dinámica del agua, μ_w , en centipoise (cp). A 20 °C la viscosidad del agua es 1.0 cp.
2. Introduzca la densidad del agua, ρ_w en g/cm³. A 20 °C la densidad del agua pura es 1 g/cm³.
3. Introduzca el tipo la condición de recarga deseado. La recarga puede especificarse ya sea especificando una velocidad de recarga o bien una saturación de agua residual en la zona vadosa.

Marque 1 para seleccionar un flujo de recarga para la entrada de recarga:
 Marque 2 para seleccionar una saturación de agua en la zona vadosa.

4. Introduzca el flujo de agua, q_{wi} , en m/d o la saturación, $S_{w(max)}$, dependiendo del tipo de entrada de precipitación seleccionado en el concepto 3.

Cuando se selecciona la recarga anual como entrada de recarga:

El valor que se introduce es el valor de la recarga media anual. Por ejemplo, con una velocidad de recarga anual de 10 cm/año el valor que se introduce es:

$$2.74 \times 10^{-4} \frac{m}{d} = 10 \frac{cm}{año} \left(\frac{m}{100 cm} \right) \left(\frac{año}{365 día} \right) \quad (A.4)$$

El modelo HSSM-KO calcula la saturación de agua (fracción del espacio poroso lleno de agua) a partir de la velocidad de recarga. Las velocidades grandes de recarga pueden ocasionar que el espacio poroso disponible se llene completamente con agua, no permitiendo la infiltración del NAPL. Si se encuentran tales

condiciones, se escribe un mensaje de error en la pantalla.

Cuando se selecciona la saturación de agua para la entrada de recarga:

En el caso de que el 35% del espacio de poro se encuentra lleno de agua, entonces se introduce 0.35. Al usar el otro conjunto de unidades: si el contenido volumétrico de humedad es 0.14 y la porosidad 0.40, entonces se introduce la saturación equivalente de 0.35 aquí.

Típicamente se usaría aquí el contenido de humedad cerca o arriba de la *capacidad de campo*, después de convertirla a saturación. La relación entre el contenido volumétrico de humedad, θ_w , la porosidad, η , y la saturación, S_w , está dada por $\theta_w = \eta S_w$. A partir del dato de entrada de saturación, el modelo HSSM-KO calcula el flujo de agua asociado.

5. Introduzca la permeabilidad máxima con relación al agua durante la infiltración, $k_{rw(max)}$. En vista de que normalmente el aire queda atrapado durante la infiltración, la conductividad hidráulica efectiva del suelo será menor que la conductividad saturada. La relación entre la conductividad efectiva respecto al agua, K_{ew} , y la conductividad saturada respecto al agua, K_{sw} está dada por

$$K_{ew} = K_{sw} k_{rw} \quad (A.5)$$

donde k_{rw} se llama la permeabilidad relativa al agua. La permeabilidad relativa es igual a cero cuando la saturación está cercana o por debajo de la residual, y es igual a uno cuando el medio poroso está totalmente saturado de agua.

Para tomar en cuenta el entrapamiento de la fase de aire, se restringe la conductividad máxima efectiva por el valor fijado para $k_{rw(max)}$. Los valores típicos varían de 0.4 a 0.6 (*Bouwer, 1966*); con frecuencia se usa 0.5 (p. ej. *Brakensiek et al., 1981*). La saturación máxima de agua se determina entonces a partir de la función k_{rw} que se usa en el modelo HSSM. Se supone que el resto del espacio poroso está lleno de aire entrapado. Entonces se descarta el cálculo de la saturación de agua a partir de $k_{rw(max)}$, ya que únicamente se usa la saturación de aire entrapado por el modelo.

6. Introduzca la profundidad al nivel freático desde el punto de derrame en metros. El punto de derrame se encuentra generalmente en la superficie de terreno.

PANTALLA 6 PROPIEDADES DE LA FASE NAPL

```

1 PMU  VISCOSIDAD DINAMICA DEL NAPL (CP)    0.4500
2 PRHO DENSIDAD DEL NAPL (G/CC)             0.7200
3 SPR  SATURACION RESIDUAL DE PETROLEO (*)  0.0500
4 IAT  TIPO DE APLICACION                    1

1 = FLUJO ESPECIFICADO
2 = VOLUMEN/AREA ESPECIFICADO
3 = ENCHARCAMIENTO DE CARGA CONSTANTE
4 = ENCHARCAMIENTO VARIABLE DESPUES DE UN PERIODO DE CARGA CONSTANTE

MARQUE 0 0 <RETORNO>      PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1                  PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA
    
```

Figura A.11: Propiedades de la fase de hidrocarburo (NAPL).

Pantalla 6 (Figura A.11)

1. Introduzca la viscosidad de la fase NAPL, μ_o , en centipoise. En la Tabla A.5 abajo se dan las viscosidades típicas de NAPL.
2. Introduzca la densidad de la fase NAPL, ρ_o , en g/cm^3 . Para simulaciones de OILENS, la densidad del NAPL debe ser menor que la del agua. Las densidades mayores que la del agua pueden usarse si no se lleva a cabo ninguna simulación de OILENS. En la Tabla A.5 adelante se dan algunas densidades típicas del NAPL.

Las densidades del hidrocarburo se expresan a veces en la escala de grados API (*Perry y Chilton, 1973*) adoptada por el American Petroleum Institute. Los grados API se definen por la expresión

$$^{\circ}API = \frac{141.5}{\text{masa esp.}} - 131.5 \quad (\text{A.6})$$

donde la masa esp. es la específica del NAPL medida a 70°F dividida entre la masa específica del agua medida a 60°F. La escala de grados API varía desde 0.0 hasta 100.0 y cubre una gama de masas específicas desde 1.076 hasta 0.6112.

Las densidades y viscosidades de las fases NAPL y agua se usan en el modelo HSSM-KO para estimar la conductividad hidráulica saturada para la fase NAPL, K_{so} , mediante

$$K_{so} = K_{sw} \frac{\mu_w}{\mu_o} \frac{\rho_o}{\rho_w} \quad (\text{A.7})$$

donde K_{sw} es la conductividad hidráulica saturada, μ_w y μ_o son las viscosidades del agua y del petróleo (LNAPL), y ρ_w y ρ_o son las densidades respectivas.

3. Introduzca la saturación residual de la fase NAPL para la zona vadosa, S_{orr} . Por definición, la fase NAPL no fluye a saturaciones menores o iguales que el valor de la residual. En este modelo, la saturación residual de NAPL se supone como una constante conocida. En forma idealizada, esta se obtendría midiendo la curva de presión capilar NAPL/aire en presencia de la cantidad de agua que llena una porción del espacio poroso. Se reconoce que el tratar la saturación residual de NAPL como una constante es una suposición, ya

Líquido	Densidad g/cm ³	Viscosidad cp
Gasolina	0.75	0.45
Agua	1.00	1.00
Combustoleo No. 2	0.87	5.9
Fluido de Transmisión	0.89	80

Tabla A.5: Densidades y viscosidades a 20°C.

que en la realidad la saturación residual de NAPL puede variar con el gradiente hidráulico y con el tiempo conforme se intertemperiza el NAPL (*Wilson y Conrad, 1984*). Típicamente la saturación residual de NAPL en la zona vadosa es menor que la del acuífero (con las mismas propiedades del medio). Las saturaciones residuales típicas de hidrocarburos varían desde 0.10 hasta 0.20 en la zona vadosa, y desde 0.15 a 0.50 en la zona saturada (*Mercer y Cohen, 1990*). Estos valores corresponden en forma más estrecha a la "retención específica", como es el término que se usa en la hidrología subterránea, que a residuales verdaderos a valores elevados de presión capilar. Se puede introducir una saturación residual de la fase petróleo diferente para la zona saturada en el menú "Parámetros del sub-modelo de la lente de NAPL. 1" (Figura A.16, concepto 6, página 123).

4. Introduzca la condición de frontera de la fase NAPL para la simulación. Se proporcionan cuatro opciones para especificar la manera en que el NAPL entra en el subsuelo. No se requieren todos los parámetros de derrame para cada opción de derrame; en las pantallas de datos aparecen aquellos parámetros que sean necesarios.

Opciones de Derrame

1. Flujo especificado

Especifica un flujo constante de NAPL, correspondiente a una velocidad conocida de aplicación de NAPL a la superficie del terreno en un intervalo de tiempo especificado. Se supone que el NAPL en exceso escurre en la superficie.

2. Volumen especificado/área

Especifica un volumen por unidad de área de NAPL aplicado en una profundidad especificada. Esto resulta en un volumen fijo aplicado en forma instantánea, correspondiente a un sistema de tratamiento de tierra o un relleno sanitario.

3. Encharcamiento con carga constante

Especifica un encharcamiento con carga constante para una duración especificada. La profundidad de encharcamiento baja abruptamente a cero al final de derrame. Esta condición se usa para simular la ruptura de un tanque de hidrocarburos que está contenido dentro de una berma, por ejemplo.

4. Encharcamiento variable después de un período de encharcamiento a carga constante

Especifica un encharcamiento a carga constante para una duración especificada, seguida por una disminución gradual a cero carga conforme se infiltra el NAPL.

Los valores de los parámetros necesarios se introducen luego en la Figura A.13.

PANTALLA 7. PARAMETROS DE APROXIMACION DE SUCCION CAPILAR

```

1 HWE   CARGA DE ENTRADA DE AIRE (M)           4.5000
2 WSIG  TENSION SUPERFICIAL DEL AGUA (DINA/CM) 65.0000
3 OSIG  TENSION SUPERFICIAL DEL NAPL (DINA/CM) 35.0000
    
```

```

MARQUE 0 0 <RETORNO>   PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1                PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA
    
```

Figura A.12: Parámetros de aproximación de succión capilar.

Pantalla 7 (Figura A.12)

1. Si se selecciona el modelo de Brooks y Corey, introduzca el valor absoluto de la carga de aire de entrada, h_{ce} , en metros. Este valor se determina como un parámetro a partir de la curva de presión capilar agua/aire (ver propiedades de la matriz, Figura A.9, página 111). Si se selecciona el modelo de van Genuchten, introduzca α en metros⁻¹.
2. Introduzca la tensión superficial agua/aire, σ_{aw} , en dina/cm. A 20°C la tensión superficial de agua pura es 72.8 dina/cm. Un valor más bajo, digamos 65 dina/cm, puede ser apropiado para suelos y/o sitios contaminados.
3. Introduzca la tensión superficial NAPL/aire, σ_{oa} , en dina/cm. La Tabla A.6 muestra valores típicos de tensión superficial para varios productos del petróleo.

Tensiones Superficiales de varios Combustibles (Wu y Hottel, 1991)	
Líquido	Tensión Superficial (dina/cm)
Gasolina	26
Kerosena	25-30
Gas oil	25-30
Fracciones de lubricantes	34
Aceites combustibles	29-32

Tabla A.6: Tensiones superficiales de varios combustibles.

PANTALLA 8A. CONDICION DE FRONTERA DE FLUJO DE NAPL

1 QP	FLUJO DE NAPL (M/D)	0.4522
2 TPB	TIEMPO DE INICIO DEL EVENTO DE NAPL (D)	0.0000
3 TPE	TIEMPO DE TERMINACION DEL EVENTO DE NAPL (D)	1.0000

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

PANTALLA 8B. CONDICION DE FRONTERA DE VOLUMEN DE NAPL/AREA

1 PVOL	VOLUMEN/AREA DE NAPL (M)	0.4000
2 DPL	PROFUNDIDAD INFERIOR DE LA ZONA DE NAPL (M)	0.5000

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

PANTALLA 8C. CONDICION DE FRONTERA DE CARGA CONSTANTE DE NAPL

1 TPB	TIEMPO DE INICIO DEL EVENTO DE NAPL (D)	0.0000
2 TPE	TIEMPO DE TERMINACION DEL EVENTO DE NAPL (D)	1.0000
3 HS	CARGA CONSTANTE PARA IAT = 3 (M)	0.2000

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

PANTALLA 8D. CONDICION DE FRONTERA DE ENCHARCAMIENTO DE CARGA VARIABLE

1 TPB	TIEMPO DE INICIO DEL EVENTO DE NAPL (D)	0.0000
2 TPE	FINAL DEL PERIODO DE CARGA CONSTANTE (D)	1.0000
3 HS	CARGA CONSTANTE PARA TPB HASTA TPE (M)	0.2000

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

Figura A.13: Condición de frontera de hidrocarburos (NAPL).

Pantalla 8A (Figure A.13)

1. Introduzca el flujo constante de NAPL, q_0 , en metros por día. Se supone que los flujos de la fase NAPL en exceso de la máxima conductividad efectiva de la fase de NAPL escurren superficialmente.
2. Introduzca el tiempo inicial del derrame de NAPL en días, comunmente éste es cero.
3. Introduzca el tiempo de conclusión del derrame de NAPL en días.

Pantalla 8B (Figure A.13)

1. Introduzca el volumen de la fase NAPL por unidad de superficie que se coloca ya sea en una instalación de tratamiento de tierras o un relleno sanitario (metros cúbicos/metro cuadrado).
2. Introduzca la profundidad de la base de la zona contaminada, d_{pl} (metros).

Pantalla 8C (Figura A.13)

1. Introduzca el tiempo de inicio del derrame de NAPL en días, generalmente este es cero.
2. Introduzca el tiempo de terminación del derrame de NAPL en días.
3. Introduzca la profundidad de encharcamiento a carga constante, H_s , en metros.

Pantalla 8D (Figura A.13)

1. Introduzca el tiempo de inicio del derrame de NAPL en días, comúnmente este es cero.
2. Introduzca el tiempo de terminación del período de carga constante en días.
3. Introduzca la profundidad de encharcamiento a carga constante, H_s , en metros.

PANTALLA 9. CONCENTRACION DEL COMPUESTO DISUELTO

1 COINI CONCENTRACION INICIAL EN EL NAPL (MG/L) 8208.0000

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
 MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
 MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

Figura A.14: Concentración del compuesto disuelto.

Pantalla 9 (Figura A.14)

1. Introduzca la concentración inicial del compuesto químico en la fase NAPL, $c_{o(ini)}$, en mg/l. EL modelo HSSM idealiza el sistema de fase múltiple/multicompuesto como una fase "NAPL" que contiene alguna fracción pequeña de un compuesto disuelto. El compuesto disuelto puede partirse entre fluidos y el sólido. Aquí se introduce la concentración del compuesto químico en el NAPL. Por ejemplo el benceno forma el 1.14% por masa de la mezcla idealizada de gasolina usado por (Baehr y Corapcioglu, 1987). La concentración inicial del benceno (el compuesto disuelto) en la gasolina (el NAPL o "el petróleo") esta dada por

$$C_b = f_b \rho_g \quad (A.8)$$

donde C_b es la concentración del benceno en la gasolina, f_b , es la fracción de masa del benceno en la gasolina y ρ_g la densidad de la gasolina. Por lo tanto

$$C_b (g/cm^3) = \frac{1.14\%}{100} (0.73 g/cm^3) = 0.0083 g/cm^3 \quad (A.9)$$

Al convertir la concentración en la gasolina a las unidades requeridas resulta

$$C_b (mg/l) = C_b (g/cm^3) \left(\frac{1000cm^3}{l} \right) \left(\frac{1000mg}{g} \right) = 8300 mg/l \quad (A.10)$$

PANTALLA 10. COEFICIENTES DE PARTICION DE EQUILIBRIO LINEAL

1	XXKO	NAPL/AGUA (*)	311.0000
2	XXKS	SOLIDO/AGUA (L/KG)	0.8300
3	XXKSH	SOLIDO/AGUA (HIDROCARBURO) (L/KG)	0.8300
4	RHOS	DENSIDAD GLOBAL (GR/CC)	1.5100

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
 MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
 MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

Figura A.15: Coeficientes de partición de equilibrio lineal.

Pantalla 10 (Figura A.15)

1. Introduzca el coeficiente de partición de equilibrio lineal entre el NAPL y las concentraciones de la fase agua del compuesto químico. Por definición

$$c_o = k_o c_w \quad (\text{A.11})$$

donde k_o es el coeficiente de partición adimensional entre la fase NAPL (c_o) y las concentraciones en la fase agua (c_w) del compuesto químico. La k_o difiere para cada compuesto químico del NAPL. Por ejemplo, los coeficientes de partición medidos, k_o para benceno, tolueno, etilbenceno y o-xileno fueron 350, 1250, 4500 y 3630 en un estudio publicado por *Cline et al.* (1991). La partición de cada compuesto entre la fase NAPL y la fase acuosa también depende de la composición del NAPL. La estimación de k_o se discute en el Apéndice C.2 "Coeficiente de Partición NAPL/Agua". Un programa de utilería para efectuar los cálculos necesarios, denominado RAOULT, se describe en el Apéndice G.

2. Introduzca el coeficiente de partición de equilibrio lineal, k_d , en litros por kilogramo entre el suelo y las concentraciones de la fase agua (c_s y c_w) del compuesto. Por definición

$$c_s = k_d c_w \quad (\text{A.12})$$

donde k_d es el coeficiente de partición en litros por kilogramo entre el sólido (c_s) y las concentraciones de la fase agua (c_w). k_d se estima generalmente a partir de la fracción de carbón orgánico de los medios, f_{oc} , y el coeficiente de partición de carbón orgánico, k_{oc} como

$$k_d = f_{oc} k_{oc} \quad (\text{A.13})$$

La Tabla C.7 en el Apéndice C (página 157) enumera valores para k_{oc} para varios compuestos de hidrocarburos.

3. Introduzca el coeficiente de partición de equilibrio lineal entre el suelo y las concentraciones de la fase de agua (c_s y c_w) de la fase de hidrocarburos. Igual que la solubilidad de la fase NAPL, discutida más adelante, este parámetro no es crítico. Este coeficiente se usa para estimar la partición de las fracciones disueltas del NAPL (p. ej., todos los compuestos químicos del NAPL con excepción del compuesto químico de interés).
4. Introduzca la densidad global, del suelo en g/cm^3 . La porosidad, η , y la densidad global, ρ_b están relacionadas por

$$\rho_b = \rho_s (1 - \eta) \quad (\text{A.14})$$

donde ρ_s es la densidad de los sólidos. La densidad de cuarzo es aproximadamente 2.65 g/cm^3 . Los valores para la porosidad y la densidad global deben relacionarse por la ecuación A.14.

PANTALLA 11. PARAMETROS DEL SUB-MODELO OILENS .1

1	RADI	RADIO DE LA FUENTE (M)	2.0000
2	FMR	FACTOR DE MULTIPLICACION DEL RADIO (*)	1.0010
3	FRING	PARAMETRO DE ALTURA CAPILAR (M)	0.0100
4	VDISP	DISPERSIVIDAD VERTICAL DEL ACUIFERO (M)	0.1000
5	GRAD	GRADIENTE DEL AGUA SUBTERRANEA (*)	0.0100
6	SPRB	SAT. RESIDUAL DE NAPL EN EL ACUIFERO (*)	0.1500

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
 MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
 MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

Figura A.16: Parámetros del modelo OILENS, primera pantalla.

Pantalla 11 (Figura A.16)

1. Introduzca el radio de la fuente contaminante, R_s , en metros. Cuando no se desea ninguna simulación de OILENS (No se selecciona el interruptor Correr OILENS de la pantalla de Control de Simulación), se puede efectuar una simulación *por unidad de área* introduciendo 0.5642 como radio de la fuente. El área resultante de la fuente es 1.0 m².
2. Introduzca el valor del factor de multiplicación del radio. Se sugiere un valor de 1.001 para el factor de multiplicación del radio (FMR). El FMR se usa para multiplicar el radio de la fuente para iniciar el modelo OILENS. Esto es necesario ya que las ecuaciones de OILENS son singulares en el radio de la fuente. Al iniciar la simulación a una distancia pequeña del verdadero radio, se evita esta singularidad. Sin embargo, este procedimiento introduce un error de balance de masa en la solución, de manera que deberá emplearse el valor mínimo de FMR que permita que avance la simulación. En ningún momento el FMR deberá exceder 1.1. Cuando se encuentra la singularidad, el modelo OILENS presentará el siguiente mensaje de error

SE ENCONTRO SINGULARIDAD DE OILENS, AUMENTE EL FMR

El FMR deberá incrementarse entonces y volver a intentar la simulación.

Si persiste este problema, asegúrese que se haya incluido la fluctuación del nivel freático en la simulación, empleando un valor apropiado del parámetro de espesor capilar (página 123).

3. Introduzca el valor del parámetro de altura capilar (metros). El parámetro de altura capilar da al modelo un espesor que debe formarse en la franja capilar antes de que ocurra el esparcido del NAPL. Típicamente, se deberá introducir un valor de 0.01 m para este parámetro. Esto resulta en un espesor pequeño de NAPL que se forma antes de que se inicie el esparcido.

El parámetro de altura capilar puede usarse también para incorporar el efecto de fluctuación del nivel freático en el radio de la lente. La fluctuación del nivel freático puede ocasionar entrapamiento del NAPL a través de la zona de mancha, y el NAPL atrapado no está disponible para el esparcido radial. Para incluir este efecto, el parámetro de altura capilar debería ser calculado por

$$\left(\begin{array}{l} \text{parámetro} \\ \text{espesor} \\ \text{capilar} \end{array} \right) = \frac{\text{espesor zona de mancha} \times \text{saturación residual de NAPL}}{\text{saturación máxima de NAPL en la lente}} \quad (\text{A.15})$$

El espesor de la zona de mancha debería tomarse como la fluctuación máxima del nivel freático y la saturación residual de NAPL debería ser el promedio de los valores de las zonas saturada y vadosa. La saturación residual de NAPL y la saturación máxima de NAPL en la lente se describen en las Pantallas 6, 11 y 12.

4. Introduzca la dispersividad vertical del acuífero, α_V , en metros. Vea la discusión sobre la dispersividad longitudinal en la Figura A.22 más adelante.
5. Introduzca el gradiente del agua subterránea. Los gradientes naturales máximos típicos son de 0.005 a 0.02. En vista de que no se permiten pozos de bombeo en TSGPLUME, se deberán usar aquí los gradientes naturales.
6. Introduzca la saturación residual de la fase NAPL en el acuífero, S_{ors} . Vea las notas arriba para la saturación residual de NAPL.

PANTALLA 12. PARAMETROS DEL SUB-MODELO OILENS.2

```
1 XMSOL   SATURACION MAX. DE NAPL EN LA LENTE (*)      0.3260
2 SOLC    SOLUBILIDAD EN AGUA DEL COMPUESTO (MG/L)    1750.0000
3 SOLH    SOLUBILIDAD EN AGUA DEL HIDROCARBURO (MG/L) 10.0000
```

```
MARQUE 0 0 <RETORNO>          PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1                      PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA
```

Figura A.17: Parámetros del modelo OILENS, segunda pantalla.

Pantalla 12 (Figura A.17)

1. Introduzca la saturación del LNAPL, $S_{o(max)}$, en la lente NAPL. En el modelo HSSM, se idealiza la lente como una lente uniformemente saturada, aunque en realidad la saturación del NAPL varía dentro de la lente. El espesor de la lente en el modelo HSSM representa la razón del volumen de la lente entre su área. Dentro de la lente el NAPL tiene una cierta saturación. En el Apéndice C.3 se discute la estimación de la saturación de la lente de NAPL, y en el Apéndice H se describe una utilería denominada NTHICK para efectuar el cálculo necesario.
2. Introduzca la solubilidad en agua del compuesto químico, s_k , en mg/l. La solubilidad que se introduce aquí es la solubilidad del "compuesto puro" que se tabula de varias fuentes (p. ej., *Mercer et al. (1990)*; *Sims et al. (1991)*; *U.S. Environmental Protection Agency (1990)*). En la Tabla C.7 se dan varios valores. La solubilidad se usa en el modelo HSSM para limitar la concentración en la fase agua. Los valores de K_o seleccionados de manera adecuada (que implican concentraciones máximas en la fase agua mucho menores que las solubilidades en la fase pura) hacen este parámetro redundante para NAPLs compuestos de mezclas de sustancias químicas.
3. Introduzca la solubilidad en agua del NAPL en mg/l. Este coeficiente representa la solubilidad de todos los compuestos de NAPL, con excepción del compuesto químico que se simula. La solubilidad del compuesto químico se introduce en forma separada. Además, este valor se usa solamente en el modelo de una manera considerable si se emplea uno de los criterios de conclusión. Por lo tanto, el valor de la solubilidad del NAPL no es un parámetro crítico.

El valor de la solubilidad del NAPL debe ser mayor que cero si se fija el **Criterio de terminación de la simulación OILENS** (ver más adelante) en 2. "El esparcido la lente NAPL se detiene." *Bauman (1989)* estimó que la solubilidad típica de gasolina es del orden de 50 a 200 mg/l.

PANTALLA 13. PARAMETROS DE SIMULACION

```
1 TM      TIEMPO DE TERMINACION DE SIMULACION (D)      2500.0000
2 DM      INTERVALO DE TIEMPO MAXIMO DE SOLUCION (D)    20.0000
3 DTPR    TIEMPO MIN. ENTRE INTERVALOS DE TIEMPO IMPRESOS
          Y COMPROBACIONES DE BALANCE DE MASA (D)      0.1000
4 KSTOP   CRITERIO DE TERMINACION                      4
```

```
1 = TIEMPO ESPECIFICADO POR EL USUARIO
2 = EL ESPARCIDO DE LA LENTE SE DETIENE
3 = FLUJO MAXIMO DE MASA CONTAMINANTE AL ACUIFERO
4 = FLUJO DE MASA CONTAMINANTE EN OILENS < OPERC * MAX
```

```
5 OPERC   MASA CONTAMINANTE MINIMA EN LENTE (*)        0.0100
```

```
MARQUE 0 0 <RETORNO>   PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <CONCEPTO NUMERO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1                PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA
```

Figura A.18: Parámetros de control de simulación.

Pantalla 13 (Figura A.18)

1. Introduzca el tiempo de terminación de la simulación en días. Este tiempo debe especificarse siempre, aunque se disponga de otras opciones de paro y puedan sobrepasar el tiempo máximo de simulación.
2. Introduzca el intervalo de tiempo máximo de solución en días. Este deberá fijarse tan grande como sea posible, aunque las rutinas internas de corrección de errores frecuentemente limitarán el tamaño real del intervalo fijado. Generalmente son aceptables valores hasta de 25 días. Los tamaños de intervalos demasiado grandes pueden introducir errores de balance de masa en los resultados del modelo.
3. Introduzca el tiempo mínimo entre intervalos de tiempo impresos en días. Aunque el modelo utiliza una solución de ecuación diferencial ordinaria de intervalo de tiempo variable, a veces durante la simulación el modelo HSSM toma intervalos muy pequeños. Los resultados de estos intervalos son de poca utilidad y aumentan en forma dramática el tamaño de los archivos de salida. Este parámetro evita la salida de cada intervalo de solución y debería fijarse entre 0.1 o 0.25 días. Este parámetro no afecta la simulación misma, sino que únicamente la información de salida.

Para la mayoría de las sustancias químicas que se lixivian de la lente, después de que haya pasado el flujo de masa pico al acuífero, existe un período relativamente largo de tiempo en donde el flujo de masa hacia el acuífero declina lentamente. Durante este período de tiempo, el tiempo mínimo fijado por el usuario para los intervalos de tiempo impresos puede sobrepasarse a fin de reducir el tamaño de los archivos de salida y de gráficas. Se agrega un criterio adicional que el flujo de masa debe cambiar por lo menos el 1.0 por ciento para que se impriman los resultados. Esta característica no puede ser sobrepasada por el usuario.

4. El criterio de terminación de la simulación de OILENS determina como se concluye la simulación de HSSM-KO. En vista de que no es posible predecir cuando ocurrirán ciertos eventos en la simulación, varias de las opciones ocasionan que se termine la simulación únicamente después de que haya ocurrido el

evento de interés. En estos casos, el tiempo de terminación especificado por el usuario es sobrepasado y la simulación continúa.

NOTA: La cuarta opción, "Contaminante lixiviado de la lente" debe elegirse para usar el modelo HSSM-T.

- (a) Tiempo de terminación especificado por el usuario Para en el tiempo de terminación de la simulación especificado arriba.
 - (b) Se detiene el esparcido de la lente NAPL Se detiene la simulación cuando se para el esparcido de la lente NAPL. Si no se forma la lente NAPL antes del tiempo de terminación especificado, entonces la simulación se detiene en el tiempo especificado. Si se forma una lente, el tiempo de terminación es sobrepasado y la simulación continúa hasta que se detenga el esparcido de la lente NAPL. Cuando la solubilidad de la fase NAPL está cerca de cero, es posible que, en el modelo, el movimiento de la lente nunca pueda parar, ya que la teoría cinemática predice que se requiere una cantidad infinita de tiempo para que todo el NAPL pase una profundidad determinada. El NAPL gotea hacia la lente a lo largo de la simulación, y el movimiento de la lente de NAPL se detiene cuando el flujo hacia la lente baja por debajo del flujo de disolución del NAPL hacia el acuífero. Si la solubilidad del NAPL es cero y no se simula ningún compuesto químico, no se disuelve ningún NAPL y el movimiento puede continuar en forma indefinida. Para evitar este problema, se requiere *una solubilidad de NAPL diferente de cero* (véase los Parámetros de la Fase de Hidrocarburos) para esta situación.
 - (c) Flujo de masa máximo de contaminante hacia el acuífero Se para la simulación cuando ocurra el flujo máximo del compuesto químico hacia el acuífero. Si no se forma una lente NAPL antes del tiempo de terminación especificado, la simulación se detiene en el tiempo de terminación especificado. Si se forma una lente, el tiempo de terminación se sobrepasa y la simulación continúa hasta que ocurra el flujo de masa máximo.
 - (d) Contaminante lixiviado de la lente cae por debajo de una fracción de la masa total en la lente Se para la simulación cuando la masa de contaminante en la lente de NAPL cae por debajo de una fracción especificada de la masa máxima de contaminante contenida dentro de la lente durante toda la simulación. Esta fracción es especificada por el usuario. Si no se forma ninguna lente de NAPL antes del tiempo de terminación especificado por el usuario (arriba), la simulación se detiene en el tiempo de terminación especificado.
5. Introduzca el criterio de paro de factor de masa como criterio de terminación (d) "Contaminante lixiviado de la lente". Debería utilizarse el dos por ciento (0.02) o menos para este factor.

PANTALLA 14. PERFILES

```
1 NTIMES  NUMERO DE PERFILES DESEADO (HASTA 10)          10

MARQUE 0 0 <RETORNO>          PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1                      PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA
```

Figura A.19: Número de perfiles.

Pantalla 14 (Figura A.19)

1. Introduzca el número de perfiles de saturación KOPT contra profundidad (Gráfica de **Perfiles de Saturación**) y perfiles de espesor de OILENS contra el radio (Gráfica de **los Perfiles de Lente NAPL**). Ambos se producen a tiempos especificados (pantalla 15, Figura A.20) junto con las aproximaciones del balance de masa. Se permiten hasta diez perfiles.

PANTALLA 15. TIEMPOS DE PERFILES

```
PR ( 1) =      1.0000
PR ( 2) =      2.0000
PR ( 3) =      4.0000
PR ( 4) =      5.0000
PR ( 5) =      7.5000
PR ( 6) =      9.0000
PR ( 7) =     720.0000
PR ( 8) =    1000.0000
PR ( 9) =    1500.0000
PR (10) =    2000.0000

MARQUE 0 0 <RETORNO>          PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1                      PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA
```

Figura A.20: Tiempos de perfiles.

Panatalla 15 (Figura A.20)

Se permite introducir un máximo de diez tiempos de perfilado (días) dependiendo de el valor de NTIMES introducido en la pantalla 14.

PANTALLA 16. PANTALLAS DE ENTRADA DE DATOS DE TSGPLUME

1.....DATOS DE ENTRADA DE TSGPLUME
2.....TIEMPO DE SIMULACION
3.....LOCALIZACION DE POZOS

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

Figura A.21: Menu de entrada de datos de TSGPLUME.

Pantalla 16 (Figura A.21)

En ella se pueden acceder tres pantallas de entrada de datos de TSGPLUME. Ninguno de estos datos se usan en KOPT/OILENS para la simulación, pero se procesan e imprimen en el archivo de datos de entrada de TSGPLUME. Después de que se haya concluido la simulación KOPT/OILENS se agrega el perfil de flujo de masa al acuífero al archivo de datos.

PANTALLA 16A. DATOS DE TSGPLUME

1	DLONG	DISPERSIVIDAD LONGITUDINAL DEL ACUIFERO (M)	10.0
2	DTRAN	DISPERSIVIDAD TRANSVERSAL DEL ACUIFERO (m)	1.0
3	PMAX	PORCIENTO MAX. DEL RADIO CONTAMINANTE (*)	101.0
4	CMINW	CONCENTRACION MINIMA DE SALIDA (MG/L)	0.001
5	ZLAM	COEF. DE VEL. DE DECAIMIENTO DEL ACUIFERO (1/D)	0.0
6	NWELL	NUMERO DE POZOS RECEPTORES (*)	2

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

Figura A.22: Datos de TSGPLUME.

Pantalla 16A (Figura A.22)

1. Introduzca la dispersividad longitudinal del acuífero, α_L , en metros.
2. Introduzca la dispersividad horizontal transversal del acuífero, α_T , en metros. Las dispersividades se definen por

$$\begin{aligned} D_L &= \alpha_L v \\ D_T &= \alpha_T v \\ D_V &= \alpha_V v \end{aligned} \tag{A.16}$$

donde D_L , D_T , y D_V son los coeficientes de dispersión longitudinal, horizontal transversal y vertical transversal; α_L , α_T , y α_V son igualmente las dispersividades longitudinal, horizontal transversal y vertical transversal; y v es la velocidad de filtración en la dirección media de flujo.

El mezclado dispersivo en acuíferos resulta del transporte de solutos a través de medios porosos heterogéneos. Conforme se esparce la estela contaminante "sufrir" una mayor heterogeneidad y el coeficiente de dispersión aparente aumenta. De esta manera los coeficientes de dispersión, D_L , D_T y D_V no son parámetros fundamentales, pero exhiben dependencia de escala.

Gelhar et al. (1992) revisaron recientemente las dispersividades determinadas en 59 sitios y analizaron la confiabilidad de los coeficientes de dispersión. Concluyeron que no hay coeficientes de dispersión longitudinal muy confiables a escalas mayores de 300 m. Es de notar, que a una escala determinada, se ha encontrado que las dispersividades varían de 2 a 3 ordenes de magnitud, aunque los valores bajos son más confiables. Con base en estos datos, las dispersividades horizontales transversales son típicamente desde 1/3 hasta casi 3 ordenes de magnitud menores que las dispersividades longitudinales. Las dispersividades transversales verticales son típicamente (aunque basado en un conjunto de datos muy limitado) de 1-2 ordenes de magnitud menores que las dispersividades transversales horizontales. Los valores muy bajos de las dispersividades verticales transversales reflejan en forma gruesa una estratificación horizontal de materiales sedimentarios.

3. Introduzca el porcentaje del radio máximo contaminante que deberá emplearse en la simulación de TSGPLUME, que requiere un radio constante para el flujo de masa de entrada.

En vista de que el radio de la lente NAPL cambia en forma continua durante parte de la simulación, puede no ser posible preseleccionar un radio apropiado de la lente para el módulo TSGPLUME. Sin embargo, es deseable ajustar el radio de la lente al flujo de masa pico hacia el acuífero. De esta manera la simulación de TSGPLUME puede usar el radio que ocurre al tiempo del flujo de masa máximo. Con este enfoque, el flujo de masa pico no es diluido demasiado por un radio grande de lente. (Ni es "condensado" debido a un radio demasiado pequeño). El radio de la lente que ocurre al tiempo del flujo de masa máximo se selecciona en forma automática si se introduce 101 para el porcentaje máximo del radio contaminante. Por lo tanto, el valor recomendado para este parámetro es 101. Puede ser deseable para los usuarios determinar el efecto de variar el tamaño de la fuente sobre las concentraciones en el acuífero.

4. Introduzca la concentración mínima (mg/l) que deberá incluir TSGPLUME en la salida. Las concentraciones por debajo de este valor se reportarán como cero. Se requiere un valor diferente de cero para este parámetro para la ejecución correcta del módulo TSGPLUME. Típicamente, una concentración de 0.001 mg/l es conveniente como concentración mínima.
5. Introduzca la vida media del compuesto en el acuífero. Este valor se usa únicamente en el modelo TSGPLUME.
6. Introduzca el número de pozos (máximo seis) para los cuales el modelo TSGPLUME deberá calcular la concentración contra el tiempo para la gráfica de **Concentraciones en Pozos**.

PANTALLA 16B. TIEMPOS DE SIMULACION DE TSGPLUME

1	BEGT	TIEMPO DE INICIO (D)	100.0
2	ENDT	TIEMPO DE TERMINACION (D)	5000.0
3	TINC	INCREMENTO DE TIEMPO (D)	50.0
4	TAQU	ESPEJOR ACUIFERO (M)	15.0

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

Figura A.23: Tiempo de simulación de TSGPLUME.

Pantalla 16B (Figura A.23)

1. Introduzca el tiempo de inicio en días para la simulación de TSGPLUME. Vea nota abajo.
2. Introduzca el tiempo de terminación en días para la simulación de TSGPLUME. Vea nota abajo.
3. Introduzca el incremento de tiempo en días para la salida de TSGPLUME entre los tiempos de inicio y terminación especificados arriba. Típicamente 50 o 100 días son adecuados para el incremento de tiempo. Vea nota abajo.

NOTA: Antes de correr el modelo, no es posible estimar en forma precisa cuando llega el contaminante a o pasa un punto de recepción dado. El modelo HSSM-T sobrepasará los tiempo de inicio y terminación proporcionados por el usuario, lo que permite al modelo producir historias suavizadas de concentración en el punto receptor. En el modelo HSSM-T se hace un esfuerzo especial para calcular cuando llega el contaminante por primera vez al punto receptor y cuando llega la concentración pico. La duración del flujo de masa hacia el acuífero se usa para determinar un incremento de tiempo propuesto para la salida del modelo HSSM-T. Si la centésima parte de la duración de la entrada del flujo de masa es mayor que el incremento de tiempo especificado por el usuario, se le solicita al usuario aumentar el incremento de tiempo:

```
*** TSGPLUME RECOMIENDA CAMBIAR EL INCREMENTO DE TIEMPO
** DE 0.5000 DIAS A 98.60 DIAS
** ACEPTA EL CAMBIO ? (SI O NO)
```

El modelo HSSM-T le hace una propuesta al usuario que no debe rehusar, por lo menos para una simulación inicial. Si la curva de historia de concentración resultante no es suficientemente suave, el usuario puede reducir el incremento de tiempo para HSSM-T para producir un espaciamiento más fino en el tiempo.

Si el usuario no acepta el cambio, se le pide que decida entre el incremento original de tiempo o introducir un nuevo incremento de tiempo.

4. Introduzca el espesor del acuífero en metros.

PANTALLA 16C. LOCALIZACION DE POZOS

#	X	Y
=====	=====	=====
1	25.	00.
2	50.	00.

MARQUE 0 0 <RETORNO> PARA NINGUN CAMBIO
MARQUE <NUMERO DE CONCEPTO> PARA CAMBIAR UN SOLO CONCEPTO
MARQUE -1 PARA CAMBIAR TODOS LOS CONCEPTOS EN SECUENCIA

Figura A.24: Localización de pozos para TSGPLUME.

Pantalla 16C (Figura A.24)

Introduzca hasta seis localizaciones de pozos, como coordenadas X y Y en metros. X esta orientado a lo largo del eje longitudinal de la estela (dirección del flujo del agua subterránea) y la Y se orienta en forma transversal al eje X. El origen del sistema de coordenadas se ubica en el centro de la fuente (ver Figura 2.6, página 14). El número de entradas será truncado dependiendo del valor de **Número de pozos receptores** en la Figura A.22.

A.9 Corrida de los Módulos KOPT, OILENS y TSGPLUME

Este inciso describe la operación de los módulos HSSM-KO y HSSM-T. Estos programas son el corazón del modelo de simulación. El programa con interfaz de DOS (HSSM-DOS) puede correr los módulos saliéndose hacia el entorno de DOS y emitiendo los comandos enumerados más adelante. Los comandos de HSSM-DOS se enumeran en la Figura A.1. El usuario puede ejecutar también los comandos directamente desde el punto de petición de DOS.

Una vez que se haya creado un archivo de entrada de datos, el módulo HSSM-KO se ejecuta por el comando de DOS

```
HSSM-KO NAME.DAT
```

donde **NAME.DAT** es el archivo de datos de entrada. El comando supone que el directorio por default contiene el archivo **HSSM-KO.EXE**, o que el directorio de HSSM fue agregado a la trayectoria (ver Apéndice A.7). La Figura A.25 muestra la primera pantalla que aparece cuando se ejecuta HSSM-KO. Esta pantalla identifica el modelo y los autores. Al oprimir retorno se presenta la pantalla de declaraciones (Figura A.26). Tome nota cuidadosamente de los mensajes de las declaraciones. Se requiere un juicio sano desde el punto de vista científico y de ingeniería al aplicar los modelos y el usuario es responsable de la aplicación del modelo.

```
*****
*
*
*           HSSM
*
*
* MODELO DE REVISION DE DERRAMES DE HIDROCARBUROS *
*
* INCLUYENDO LOS MODELOS KOPT, OILENS Y TSGPLUME *
*
*           JAMES W. WEAVER
*
* UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY *
*   R.S. KERR ENVIRONMENTAL RESEARCH LABORATORY *
*           ADA, OKLAHOMA 74820
*
*
*   SE INCLUYE EL MOVIMIENTO DE LA LENTE DE
*   ACEITE--HIDROCARBURO SOBRE EL NIVEL FREATICO *
*
* RANDALL CHARBENEAU, SUSAN SHULTZ, MIKE JOHNSON *
* ENVIRONMENTAL AND WATER RESOURCES ENGINEERING *
*   THE UNIVERSITY OF TEXAS AT AUSTIN
*
*
*           VERSION 1.00
*
*****
```

Figura A.25: Pantalla introductoria de HSSM-KO.

En la Figura A.27 se presenta una lista de los nombres de archivo usados por el modelo HSSM-KO y HSSM-T. Los nombres deben seguir una convención estricta de nombramiento para que el módulo TSGPLUME (HSSM-T) y el postprocesador HSSM-PLT funcionen adecuadamente. Para conveniencia del usuario se generan automáticamente los nombres correctos de archivos por el módulo PRE-HSSM. Estos no deberían ser modificados por el usuario.

Como se indica en la Figura A.27, el usuario puede ya sea correr HSSM-KO o cambiar el archivo de datos de entrada o inspeccionar el directorio actual o salirse del programa. Al iniciar una simulación, el modelo escribe


```

*****
*                               *
*           ADVERTENCIA:       *
* ESTE PROGRAMA SIMULA EL COMPORTAMIENTO IDEALIZADO*
* DE CONTAMINANTES DE FASE ACEITOSA EN MEDIOS    *
* POROSOS IDEALIZADOS, Y NO SE PRETENDE SU       *
* APLICACION A SITIOS HETEROGENEOS.             *
* LOS RESULTADOS DEL MODELO NO HAN SIDO VERIFICADOS*
* POR ESTUDIOS DE LABORATORIO NI DE CAMPO.       *
* LEA LA GUIA DEL USUARIO PARA MAYOR INFORMACION *
* ANTES DE TRATAR DE USAR ESTE PROGRAMA.        *
* NI LOS AUTORES, NI LA UNIVERSIDAD DE TEXAS,   *
* NI EL GOBIERNO DE LOS ESTADOS UNIDOS ACEPTAN *
* CUALQUIER RESPONSABILIDAD COMO RESULTADO DEL  *
* USO DEL CODIGO                               *
* LA U.S. E.P.A NO ENDOSA OFICIALMENTE EL      *
* USO DE ESTE CODIGO.                          *
*****

```

Figura A.26: Pantalla de declaraciones.

mensajes en la pantalla conforme avancen los cálculos. Estos permiten que el usuario pueda seguir la simulación. La Figura A.28 contiene un conjunto típico de mensajes de pantalla para una simulación.

NOMBRES DE ARCHIVOS DE SALIDA Y DE GRAFICAS:

ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA DE HSSM-KO	BENZENE.DAT
SALIDA DE HSSM-KO	BENZENE.HSS
GRAFICA 1 DE HSSM-KO	BENZENE.PL1
GRAFICA 2 DE HSSM-KO	BENZENE.PL2
GRAFICA 3 DE HSSM-KO	BENZENE.PL3
ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA DE HSSM-T	BENZENE.PMI
SALIDA DE HSSM-T	BENZENE.TSG
GRAFICA DE HSSM-T	BENZENE.PMP

PARA CORRER HSSM-KO	MARQUE	<RETORNO>
PARA CAMBIAR EL ARCHIVO DE ENTRADA	MARQUE	F
PARA VER EL DIRECTORIO	MARQUE	D
PARA SALIR	MARQUE	1

Figura A.27: Nombres de archivos de salida y opciones de corrida.

```
*** ENTRADA DE DATOS
*** INICIALIZACION DE DATOS
*** INICIO DE LA SIMULACION
*** INFILTRACION DEL PETROLEO
*** REDISTRIBUCION DEL PETROLEO
*** COMPUESTO QUIMICO LLEGA AL NIVEL FREATICO
*** SE FORMA LENTE DE PETROLEO
*** PERFILADO A LOS      15.00 DIAS
*** PERFILADO A LOS      30.00 DIAS
*** PERFILADO A LOS      90.00 DIAS
*** PERFILADO A LOS     130.00 DIAS
*** PERFILADO A LOS     175.00 DIAS
*** FIN DE SIMULACION
*** POST-PROCESADO
*** CREANDO ARCHIVO DE SALIDA:
*** BENZENE.HSS
*** PROCESANDO CONTENIDO DEL ARCHIVO DE GRAFICAS
*** REEMPACANDO ARCHIVO 18
*** REEMPACANDO ARCHIVO 19
*** CREANDO ARCHIVO DE GRAFICA DE KOPT/OILENS:
*** BENZENE.PL1
*** CREANDO ARCHIVO DE GRAFICA DE KOPT/OILENS:
*** BENZENE.PL2
*** CREANDO ARCHIVO DE GRAFICA DE KOPT/OILENS:
*** BENZENE.PL3
*** CREANDO ARCHIVO DE DATOS PARA TSGPLUME:
*** BENZENE.PMI
*** FIN DE HSSM
```

Figura A.28: Mensajes típicos de pantalla de HSSM-KO.

La implementación en HSSM-T de TSGPLUME está diseñada para ser usada con HSSM-KO. Si el conjunto de datos para HSSM-KO tiene puestos sus interruptores en forma adecuada, y si el compuesto químico de interés disuelto alcanza el nivel freático (ya sea mediante la formación de una lente NAPL o por lixiviación desde un cuerpo inmovilizado de NAPL en la zona vadosa), entonces se crea un conjunto de datos de entrada para TSGPLUME al correr HSSM-KO. Las banderas y condiciones necesarias para la generación del archivo de datos para TSGPLUME se resumen en la Tabla A.7. Estos parámetros se describen en forma detallada en el Apéndice A.8.2.

Condición del interruptor	Pantalla PRE-HSSM	Efecto
IWR = 1	Pantalla 1 (Tabla A.7)	Produce archivos de Salida y de gráficas
IKOPT = 1	Pantalla 1 (Tabla A.7)	Corre el módulo KOPT
ILENS = 1	Pantalla 1 (Tabla A.7)	Corre el módulo OILENS
ICONC = 1	Pantalla 1 (Tabla A.7)	Compuesto químico incluido en la simulación.
ITSGP = 1	Pantalla 1 (Tabla A.7)	Intenta crear datos de entrada para TSGPLUME (HSSM T.EXE).
KSTOP = 4	Pantalla 13 (Tabla A.18)	Termina simulación de HSSM-KO.EXE cuando se queda una pequeña fracción del compuesto químico en la lente de petróleo.
Tiempo "largo" de terminación de Simulación (TM)	Pantalla 13 (Tabla A.18)	Permite un tiempo suficiente de simulación para que el compuesto químico llegue al nivel freático antes de terminar la simulación (con KSTOP = 4 se sobrepasa el tiempo de terminación de simulación si el compuesto químico llega al nivel freático.)

Tabla A.7: Interruptores de datos de HSSM-KO para la creación de archivos de datos de entrada TSGPLUME (HSSM-T).

Una vez que haya corrido HSSM-KO y haya producido un archivo de datos de entrada para HSSM-T, se podrá ejecutar HSSM-T introduciendo el comando:

```
HSSM-T NAME.PMI
```

donde **NAME.PMI** es el archivo de datos de entrada. Cuando se ejecuta HSSM-T, aparecerán los mensajes de pantalla como se muestran en la Figura A.29. Después de oprimir retorno, aparecerán los nombres de los archivos para la simulación como se indica en la Figura A.30.

```
*****
*
*           TSGPLUME
*
* MODELO DE ESTELA GAUSSIANA DE FUENTE TRANSITORIA*
*
*
*           MIKE JOHNSON
*           RANDALL CHARBENEAU
*           THE UNIVERSITY OF TEXAS AT AUSTIN
*
*           JIM WEAVER
* ROBERT S. KERR ENVIRONMENTAL RESEARCH LABORATORY*
* UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY *
*
*           VERSION 1.00
*
*****
```

Figura A.29: Pantalla introductoria de HSSM-T.

NOMBRES DE ARCHIVOS DE SALIDA Y DE GRAFICAS:

ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA	HSSM-KO	BENZENE.DAT
SALIDA	HSSM-KO	BENZENE.HSS
ENTRADA	HSSM-T	BENZENE.PMI
SALIDA	HSSM-T	BENZENE.TSG
GRAFICA	HSSM-T	BENZENE.PMP

PARA CORRER TSGPLUME	MARQUE <RETORNO>
PARA CAMBIAR EL ARCHIVO DE ENTRADA	MARQUE F
PARA VER EL DIRECTORIO	MARQUE D
PARA SALIR	MARQUE 1

Figura A.30: Nombres de archivos de salida de HSSM-T y opciones de corrida.

Cuando se ejecuta HSSM-T, se escribe una serie de mensajes en la pantalla (Figura A.31). Estos mensajes informan al usuario sobre el avance de la simulación. El ejemplo que se muestra tiene solamente un sitio receptor; cuando se usan más localidades receptoras, se producirán más mensajes de este tipo.

```
*** ENTRADA DE DATOS
*** INICIALIZACION DE DATOS
*** CALCULANDO PRECISION DE PUNTO FLOTANTE
***
*** INICIO DE COMPUTACION PARA RECEPTOR      1
*** CALCULANDO EL TIEMPO DE INICIO DEL HISTORIAL
*** ALGORITMO DE BUSQUEDA TERMINADO EN 6 ITERACIONES
*** CALCULO TERMINADO A LOS  18.18    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  18.44    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  33.41    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  48.38    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  63.35    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  78.32    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  83.32    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  88.32    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  93.32    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  98.32    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS 103.3     DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS 108.3     DIAS
```

(se omiten los otros mensajes similares)

```
*** CALCULO TERMINADO A LOS  553.3    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  653.3    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  703.3    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  753.3    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  803.3    DIAS
*** CALCULO TERMINADO A LOS  853.3    DIAS
***
*** ARCHIVO DE SALIDA:
***   BENZENE1.TSG
*** ARCHIVO DE GRAFICA:
***   BENZENE1.PMP
*** FIN DE TSGPLUME
```

Figura A.31: Mensajes típicos de pantalla de HSSM-T.

A.10 Graficado de Resultados del Modelo HSSM con HSSM-PLT

El programa HSSM-PLT es un post-procesador de gráficas para el programa HSSM. El programa HSSM-PLT proporciona a los usuarios del modelo visualizaciones en pantalla de la salida así como también copias opcionales. Todas las entradas se hacen a través de un menú, lo que le permite al usuario concentrarse en los resultados del modelo. El programa HSSM-PLT está escrito en FORTRAN 77 de Microsoft versión 5.0 y usa el programa INGRAF versión 5.02 de la biblioteca de rutinas de gráficas de FORTRAN.

A.10.1 Requerimientos del Paquete

El programa de gráficas está formado por tres archivos que se muestran en la Tabla A.8. Estos se proporcionan en el disquete HSSM-1-d y deberán instalarse en el directorio HSSM según en la Tabla A.1 del Apéndice A.

Archivo	Función
HSSM-PLT.EXE	Programa de presentaciones gráficas de HSSM
CONFIG.PLT	Información proporcionada por el usuario acerca del sistema de hardware para impresión
SIMPLEX1.FNT	Archivo de fuentes Sutrastsoft para los letreros de las presentaciones.

Tabla A.8: Archivos requeridos para el programa de presentaciones gráficas de HSSM-PLT.

Los tres archivos deben estar presentes para que HSSM-PLT trabaje en forma adecuada.

A.10.2 Descripción General

El programa HSSM-PLT se escribió con la biblioteca de gráficos de INGRAF. El programa presenta un aviso de derechos de propiedad que aparecerá por aproximadamente dos segundos. El aviso de Sutrastsoft se presenta de conformidad con el acuerdo de licencia para la biblioteca de gráficos de INGRAF. Para mayor información sobre INGRAF comuníquese con:

Sutrastsoft (The Librarian, Inc.)
10506 Permian Dr.
Sugarland, TX 77487
(713) 491-2088
FAX (713) 240-6883

El programa HSSM-PLT presenta un menú de selecciones que incluye las opciones para 1) salir del programa, 2) configurar dispositivos de salida, 3) seleccionar archivos de resultados de HSSM-KO y HSSM-T para graficar, y 4) seleccionar gráficas para presentación. Las opciones de 2 a 4 presentan, ya sea mensajes de pantalla o menús adicionales, para orientar al usuario.

La Tabla A.9 presenta la secuencia de comandos de HSSM-PLT para el graficado de los resultados. Los detalles completos de los procedimientos se describen en las secciones siguientes.

Paso	Comando o Concepto del Menu	Acción
0	ver Tabla 41	Genera resultados de HSSM
1*	Concepto 2	Selecciona impresora
2	Concepto 3	Selecciona archivos de salida de HSSM-KO y HSSM-T
3	Concepto 4	Grafica resultados
4	oprima P	Imprime la gráfica que se exhibe
5	Concepto 0	Salida

* La selección de la impresora se guarda para uso futuro del programa, de manera que el paso 1 sólo se ejecuta cuando se selecciona la impresora por primera vez o cuando se cambia o cuando se escribe a archivos de disco.

Tabla A.9: Resumen rápido de los comandos de HSSM-PLT.

Pantalla de Título

Esta pantalla muestra el título, número de versión, e información de los autores del programa. Esta información permanece en la pantalla hasta que el usuario oprime cualquier tecla.

Pantalla de Menú

La Pantalla de Menú contiene la interfaz del usuario para todas las opciones del modelo HSSM-PLT. Para hacer una selección, el usuario oprime la tecla indicada para la selección deseada. Por ejemplo, para salir del programa se oprime la tecla "0" (cero) y se termina el programa. Las selecciones legales son de 0 hasta 3 y cualquier otra tecla oprimida se ignora.

Opción 1 de Menú: Configuración del Dispositivo

La opción de Configuración del Dispositivo permite a los usuarios seleccionar el dispositivo de salida apropiado para su sistema. Los datos de la configuración se almacenan en el archivo **config.plt**, de manera que el usuario solo requiere usar esta opción cuando corra el programa por primera vez, cuando cambie la impresora, o cuando se grafica hacia un archivo de disco. Se presenta el dispositivo actual de salida en la primera línea de la Figura A.32. Se presentan todos los dispositivos de salida soportados con un número índice. Al marcar el número de índice, el usuario selecciona un dispositivo de salida de la lista presentada.

EL DISPOSITIVO DE SALIDA ACTUAL ES Postscript printer

SELECCIONE UN DISPOSITIVO DE SALIDA

- 1 - EPSON 9-pin, narrow carriage
- 2 - EPSON 24-pin, LQ series, narrow
- 3 - EPSON 24-pin, LQ series, wide
- 4 - NEC Pinwriter, 24-pin, narrow
- 5 - NEC Pinwriter, 24-pin, wide
- 6 - Okidata, 9-pin, narrow
- 7 - HP LaserJet/DeskJet - low res
- 8 - HP LaserJet/DeskJet - medium res
- 9 - HP LaserJet/DeskJet - high res
- 10 - HP PaintJet - 2 color, low res
- 11 - HP PaintJet - 4 color, med res
- 12 - HP PaintJet - 8 color, high res
- 13 - HP PaintJet - 16 color, high res
- 14 - Postscript printer
- 15 - HP - HPGL plotter
- 16 - HP LaserJet III - HPGL/2 mode
- 17 - Houston Inst DM/PL plotter

INTRODUZCA EL NUMERO DE DISPOSITIVO :

Figura A.32: Opciones de configuración de dispositivos de salida.

EL PUERTO ACTUAL DE SALIDA ES LPT1:

SELECCIONE UN PUERTO DE SALIDA

- 1 - PRN:
- 2 - LPT1:
- 3 - LPT2:
- 4 - COM1:
- 5 - COM2:
- 6 - AUX:
- 7 - ARCHIVO

INTRODUZCA EL NUMERO DE PUERTO:

Figura A.33: Selección del puerto de salida.

Después de que se haga la selección del dispositivo de salida, se asigna el puerto de salida (Figura A.33). La pantalla sigue el mismo formato que para el dispositivo: Se muestra el puerto actual, seguido de posibles selecciones de puerto. Al introducir el número índice, el usuario selecciona un puerto de salida a partir de la lista presentada.

La opción 7 envía la gráfica a un archivo de disco con formato HPGL en vez de un puerto de salida. Cuando se selecciona esta opción, se le pide al usuario un nombre de archivo además del número de puerto. Nótese que únicamente la última gráfica enviada al archivo queda retenida en el archivo. Si se desea grabar más de una gráfica en un archivo, debe volverse a meter la configuración cada vez para cada gráfica a fin de cambiar el nombre del archivo de salida.

Opción 2 de Menú: Selección de Archivos de Entrada

Antes de graficar los resultados, debe seleccionarse un conjunto de resultados del modelo HSSM. Todos los archivos de gráficas necesarios son leídos por HSSM-PLT y quedan disponibles para el dibujo de gráficas específicas. Si se intenta el graficado antes de seleccionar los archivos de gráficas, aparece un recordatorio para seleccionar un archivo.

El primer mensaje que aparece en la pantalla es

```
INTRODUZCA EL NOMBRE DE LA TRAYECTORIA DEL SUBDIRECTORIO
OPRIMA <RETORNO> PARA USAR EL DIRECTORIO ACTUAL:
```

Entonces el usuario puede oprimir<RETORNO> para usar el directorio actual, o proporcionar un nombre de trayectoria en DOS tal como c:\models\hssm\ working

Se le pide al usuario un nombre de archivo con el mensaje siguiente:

```
INTRODUZCA EL NOMBRE DE ARCHIVO O * PARA UN DIRECTORIO
USE LA RAIZ UNICAMENTE - SIN EXTENSIONES:
```

Al oprimir <RETORNO> o un asterisco se presenta el directorio actual de los archivos de entrada de HSSM-KO (archivos con la extensión **.DAT**). Al introducir el nombre raíz, tal como BENCENO, HSSM-PLT comienza a leer los archivos de gráficas. HSSM-PLT agrega las extensiones al nombre raíz del archivo cuando recupera los archivos de gráficas. Para este ejemplo, se escribieron los mensajes siguientes en la pantalla:

```
LEYENDO ARCHIVO c:\models\hssm\working\BENZENE.PL1 .... TERMINADO
LEYENDO ARCHIVO c:\models\hssm\working\BENZENE.PL2 .... TERMINADO
LEYENDO ARCHIVO c:\models\hssm\working\BENZENE.PL3 .... TERMINADO
ARCHIVO c:\models\hssm\working\BENZENE.PMP NO EXISTE
LEYENDO ARCHIVO c:\models\hssm\working\BENZENE.HSS .... TERMINADO
```

OPRIMA CUALQUIER TECLA PARA CONTINUAR

Los archivos de gráficas **BENZENE.PL1**, **BENZENE.PL2**, **BENZENE.PL3** y el archivo principal de resultados **BENZENE.HSS** fueron leídos exitosamente. El archivo de gráficas **BENZENE.PMP** de HSSM-T no existió, ya que no se había corrido HSSM-T para este conjunto de datos.

Opción 3 de Menú: Selección de Gráficas

Después de que se haya seleccionado el archivo de entrada, pueden generarse las gráficas. La opción 3 de el menú principal genera el menú de gráficas. Si no se ha seleccionado ningún archivo de entrada, entonces aparece un mensaje de error. Las entradas legales para el menú de gráficas son 0 - 7 y todos los demás teclazos se ignorarán. Cada una de las gráficas se describe en forma detallada en la siguiente sección. Generalmente, después de que se haya dibujado una gráfica en la pantalla, al oprimir cualquier tecla se regresará al usuario al menú para gráficas. Sin embargo, si el usuario oprime la tecla <P>, la gráfica será impresa de acuerdo con los datos en el archivo **CONFIG.PLT**.

A.11 Presentación Gráfica de la Salida del Modelo HSSM

Se producen dos tipos básicos de gráficas a través del postprocesador de gráficas de DOS. Estos son perfiles que presentan la variación espacial de un parámetro en un tiempo determinado, y los historiales que presentan la variación en el tiempo de un parámetro en una localización determinada. Las gráficas presentan un resumen visual de la salida de una simulación exitosa del modelo HSSM. Los resultados de cada uno de los módulos de HSSM están contenidos en una o varias gráficas. La Tabla A.10 da información acerca de cada una de las gráficas que se proporcionan.

Las gráficas producidas por HSSM-PLT son muy similares a aquellas producidas por HSSM-WIN. En el Inciso 4.8 se muestran ejemplos de gráficas de HSSM-WIN.

Gráfica Número	Título	Módulo de HSSM	Descripción
1	Perfiles de Saturación	KOPT	Saturación de líquidos en la zona vadosa desde la superficie hasta el nivel freático
2	Historial de la posición del frente NAPL *	KOPT	Localización de la frente NAPL en la zona vadosa
3	Perfiles de la lente NAPL	OILENS	Sección transversal de la lente NAPL sobre el nivel freático
4	Historial del radio de la lente NAPL	OILENS	Historial del radio de la lente NAPL y del radio efectivo del contaminante
5	Historial del flujo de la masa contaminante	OILENS	Historial del flujo de masa desde la lente NAPL al acuífero
6	Balance de masa contaminante de la lente NAPL	OILENS	Historial de la masa en la lente NAPL
7	Historiales de las Concentraciones en los Receptores	TSGPLUME	Historial de las concentraciones de contaminante en los puntos receptores

* Únicamente la interfaz de MS-DOS produce el historial de la posición del frente NAPL.

Tabla A.10: Gráficas del modelo HSSM.

Apéndice B

Problema Ejemplo en DOS

En este Apéndice, se presenta un problema ejemplo que ilustra el uso de la interfaz de DOS. Este problema es el mismo que el primer ejemplo presentado en el Capítulo 5. El juego completo de archivos de entrada y salida para este ejemplo se distribuye en el disquete HSSM-1-d.

B.1 Tiempo de Llegada de la Gasolina al Nivel Freático

Se está preparando un plan de respuesta a una emergencia para un tanque de almacenamiento en la superficie. Se requiere una estimación de cuánto tiempo se requeriría para que la gasolina llegue al nivel freático y cual sería la frecuencia de monitoreo requerida para detectar una fuga antes de que la gasolina alcance el nivel freático. El suelo fue clasificado como un suelo arcillo-arenoso. En este ejemplo, el nivel freático se encuentra a una profundidad de 5.0 metros. Todos los parámetros para la corrida del modelo están guardados en el archivo **X1STF.DAT**, que se encuentra en el disquete de problemas ejemplo HSSM-2. Se puede usar PRE-HSSM para hojear a través de este archivo conforme se estudia el ejemplo.

Este problema requiere el uso del módulo KOPT sin contaminante disuelto. Deberá efectuarse una simulación “por unidad de área” porque se requiere únicamente el tiempo de transporte a través de la zona vadosa. Se utilizará la interfaz MS-DOS para demostrar como se usa el modelo HSSM para este problema. De todos los datos de entrada requeridos por el modelo, sólo se requieren los siguientes parámetros para la simulación “sólo KOPT.” El modelo PRE-HSSM pone los ceros necesarios en el archivo de datos para los parámetros no utilizados.

Pantalla 1. Interruptores para Opciones de Impresión Únicamente se usan las opciones de producción de archivos de salida y KOPT en el ejemplo de simulación mostrado en la Tabla B.1.

Parámetro	Justificación	Valor
IWR	Producir archivos de salida	1
IKOPT	Correr KOPT	1
ICONC	Sin constituyente disuelto	0
ILENS	No correr OILENS	0
ITSGP	No escribir archivo de entrada HSSM-T	0

Tabla B.1: Problema 1 interruptores de opciones de impresión.

Pantalla 2 Nombres de Archivos Los nombres de archivos requeridos se generan en forma automática cuando se guarda el conjunto de datos por el modelo PRE-HSSM. El nombre raíz para este juego de datos es **X1STF**.

Pantalla 3 Título de la Corrida Derrame de Gasolina desde un Tanque de Almacenamiento en la superficie.
 Tiempo de Llegada de la Gasolina al nivel freático
 Simulación KOPT exclusivamente

Pantalla 4 Propiedades del Medio Poroso Las propiedades del medio poroso enumeradas en la Pantalla 4 se estiman de la tabla de parámetros según Brakensiek et al. Los valores mostrados en la Tabla B.2 fueron tomados de la tabla reproducida en el Apéndice C.1.

Parámetro	Valor
Carga de aire de entrada, h_{ce}	46.3 cm
Índice de distribución de tamaño de poro según Brooks y Corey, λ	0.368
Contenido residual de agua, θ_{wr}	0.075
Porosidad, η	0.406

Tabla B.2: Problema 1 propiedades del medio poroso.

Luego se estima la conductividad hidráulica del sistema en cm/s según (Brakensiek et al., 1981)

$$K_{sw} = 270 \frac{\eta^2}{h_{ce}^2} \frac{\lambda^2}{(\lambda + 1)(\lambda + 2)} = 8.68 \times 10^{-4} \text{ cm/s} \quad (\text{B.1})$$

donde la carga de aire de entrada está en cm. Este valor luego se convierte a unidades de metros por día multiplicando por 864 para dar una K_{sw} de 0.75 m/d. De la información básica de propiedades de suelos, se determinan los siguientes parámetros. (Tabla B.3).

Parámetro	Justificación	Valor
Razón entre conductividad horizontal y vertical	Valor arbitrario ya que este parámetro no se usa en KOPT	5.0
Índice de permeabilidad relativa	Se usa el modelo de Brooks y Corey	1
Carga de aire de entrada, h_{ce}	Las unidades requeridas para HSSM son metros. Este parámetro se introduce en la Pantalla 7	0.463 m
Saturación de agua residual, S_{wr}	El modelo HSSM requiere más bien entradas de saturación que de "contenido"	0.18 (0.075 / 0.406)

Tabla B.3: Problema 1 parámetros de conductividad hidráulica y de la curva de presión capilar.

Pantalla 5 Propiedades Hidráulicas Los parámetros mostrados en la Tabla B.4 se usan para la pantalla de Propiedades Hidráulicas.

Parámetro	Justificación	Valor
Densidad de la fase acuosa, ρ_w	Valor estandar	1.0 g/cm ³
Viscosidad de la fase acuosa, μ_w	Valor estandar	1.0 cp
Tipo de entrada de recarga	Especifica saturación	2
Saturación de agua, $S_{w(max)}$	Saturación de agua especificada	0.35
Permeabilidad máxima relativa durante infiltración, $k_{rw(max)}$	Supone 0.5	0.5
Profundidad al nivel freático	Arbitraria para este problema	5 m

Tabla B.4: Problema 1 Propiedades hidráulicas.

La profundidad al nivel freático se indica como arbitraria porque KOPT trata únicamente la zona vadosa arriba del nivel freático (y la franja capilar). Los resultados del modelo deberían verificarse para el tiempo en que el frente NAPL cruce la profundidad de 5 metros.

Pantalla 6 Propiedades de la Fase de Hidrocarburos (NAPL) Vea Tabla B.5.

Parámetro	Justificación	Valor
Viscosidad de la fase aceitosa, μ_o	Valor típico para gasolina	0.45 cp
Densidad de la fase aceitosa, ρ_o	Valor típico para gasolina	0.74 g/cm ³
Saturación residual de aceite (zona vadosa), S_{orv}	Estimado	0.10
Tipo de aplicación de aceite	Seleccione un escenario de encharcamiento a carga constante	3

Tabla B.5: Problema 1 propiedades de la fase de hidrocarburos (NAPL).

Pantalla 7 Parámetros de Aproximación de Succión Capilar Los parámetros de aproximación de succión capilar se usan para agregar el efecto de succión capilar sobre el NAPL que se infiltra. La carga de aire de entrada del modelo de Brooks y Corey (0.46 m) se introduce en esta pantalla. La tensión superficial del agua se toma como 65 dina/cm para tomar en cuenta el hecho que los valores publicados para la tensión superficial son para agua muy pura. La tensión superficial del NAPL se toma en 35.0 dina/cm.

Pantalla 8c Condición de Frontera de Encharcamiento de Carga constante para el Hidrocarburo (NAPL) En vista de que se seleccionó el escenario de derrame con carga constante en la Pantalla 6, la pantalla de condición de frontera de encharcamiento de carga constante aparece en la pantalla 8. El tiempo de inicio, de terminación y de encharcamiento son introducidos en esta pantalla. Se supone que el derrame ocurre en el tiempo 0 días y termina en el tiempo de 1 día. Durante este intervalo se supone que la profundidad de encharcamiento permanece constante en 0.05 m (5 cm).

Pantalla 11 Parámetros del Modelo OILENS, Primera Pantalla El modelo OILENS no es usado en la simulación actual. Sin embargo, debe especificarse el radio de la fuente, y este parámetro se agrupa con los parámetros de OILENS. Se desea únicamente una simulación “por unidad de área” para este ejemplo; de esta manera se fija el radio de la fuente en 0.5642 metros de manera que el área resultante sea 1.00 metro cuadrado. No se requiere introducir ninguno de los demás parámetros en esta pantalla.

Pantalla 13 Parámetros de Control de Simulación Vea Tabla B.6.

Parámetro	Justificación	Valor
Tiempo de terminación de la simulación	Simular el derrame durante 25 días, ya que la gasolina es un fluido de baja viscosidad y puede llegar al nivel freático relativamente rápido en un medio permeable.	25 días
Intervalo de tiempo máximo de solución	Use un valor relativamente pequeño, ya que solo se simulan 25 días	0.1 día
Tiempo mínimo entre intervalos de tiempo impresos	Use un valor más pequeño que el intervalo mínimo para la solución.	0.05 día
Criterio de terminación	Detener la simulación en el tiempo especificado	1
Factor de masa mínima	No se usa para esta simulación	0.01

Tabla B.6: Problema 1 parámetros de control de simulación

Pantalla 14 Número de Perfiles y Tiempos de Perfilado en la Pantalla 15 Use 5 perfiles durante la simulación. Los tiempos deberían ser pequeños, ya que se espera que la gasolina llegará al nivel freático en forma relativamente rápida. Use tiempos de 0.25, 0.5, 1.0, 2.0 y 5.0 días (6, 12, 24, 48 y 60 horas).

B.1.1 Resultados del Modelo

El modelo se ejecuta introduciendo el comando

```
HSSM-KO X1STF.DAT
```

Los perfiles de saturación de la simulación se muestran en la Figura B.1. Estos perfiles se dibujaron con el programa HSSM-PLT. La profundidad del frente abrupto aumenta con el tiempo y los primeros tres perfiles muestran saturaciones de NAPL uniformes. Los últimos dos perfiles muestran saturaciones variables de NAPL, porque ocurren a las 48 y 60 horas, que están más allá de la duración del derrame (24 horas). La figura B.2 muestra la posición del frente NAPL. Esta gráfica indica que a lo largo de la simulación de 25 días, el NAPL no penetra más profundo que alrededor de 3.6 metros.

Al tener una confianza completa en la precisión de los datos de entrada, podría suponerse que la gasolina nunca llega al nivel freático. Sin embargo, la mayoría de los parámetros del modelo utilizados en este ejemplo fueron estimados a partir de tablas publicadas. En vez de aceptar los resultados de una simulación como representativos, deberían correrse varias simulaciones a fin de obtener una apreciación de los efectos de la variabilidad de los parámetros. Si la conductividad hidráulica fuera realmente 10 veces mayor que el valor promedio de 0.75 m/d, la gasolina fluiría hasta una profundidad mayor en el subsuelo. Debido a la condición de encharcamiento de carga constante supuesta para este caso, la gasolina fluiría también más rápidamente. La condición de encharcamiento de carga constante no especifica el volumen de gasolina que entra en el suelo; sólo indica que se

proporciona suficiente gasolina para mantener una carga de encharcamiento de 0.05 m de profundidad por un día. La figura B.3 muestra la posición del frente NAPL cuando la conductividad hidráulica es 7.5 m/d. A los 25 días, la gasolina llegaría a una profundidad de 24 metros, si no fuera por la profundidad del nivel freático de 5.0 metros. Con el archivo **X2STF.HSS**, la profundidad de 5 metros se alcanzó dentro de 9.8 horas.

Este ejemplo estuvo enfocado en el papel de la conductividad hidráulica para determinar la profundidad de la gasolina. También se puede demostrar de la misma manera el efecto de variación de otros parámetros. Algunos de los otros parámetros inciertos son la condición supuesta del derrame, el contenido de humedad, y los parámetros de presión capilar.

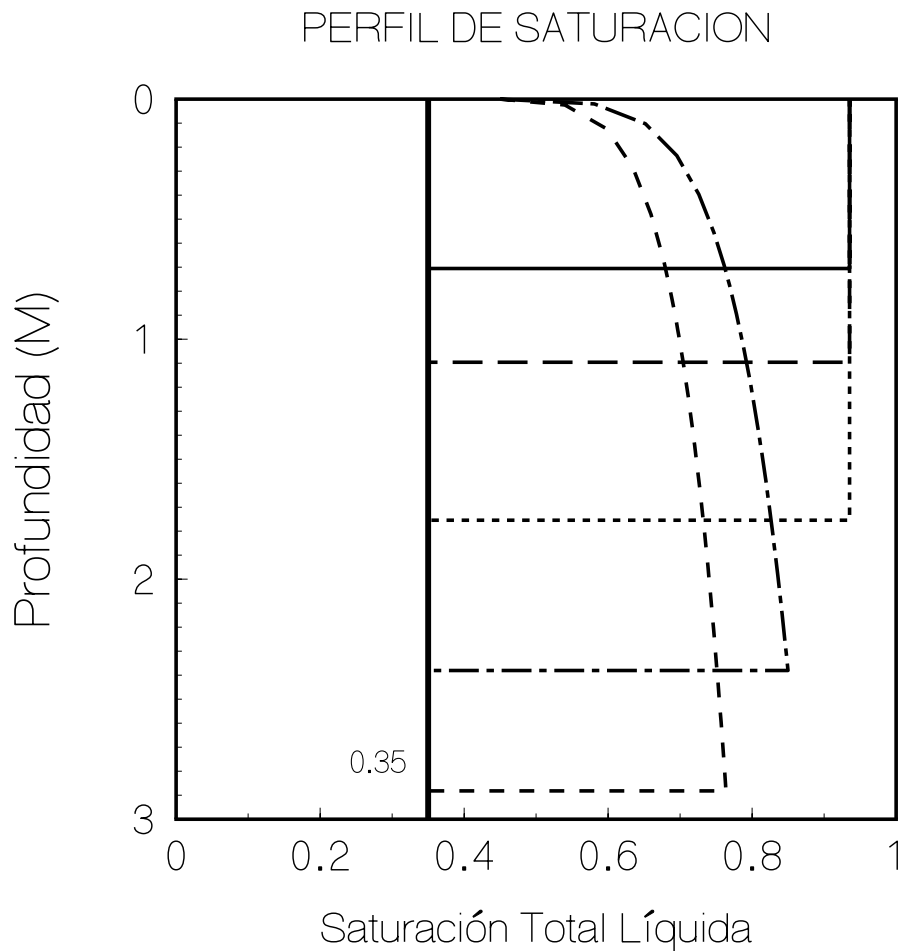


Figura B.1: Perfiles de saturación.

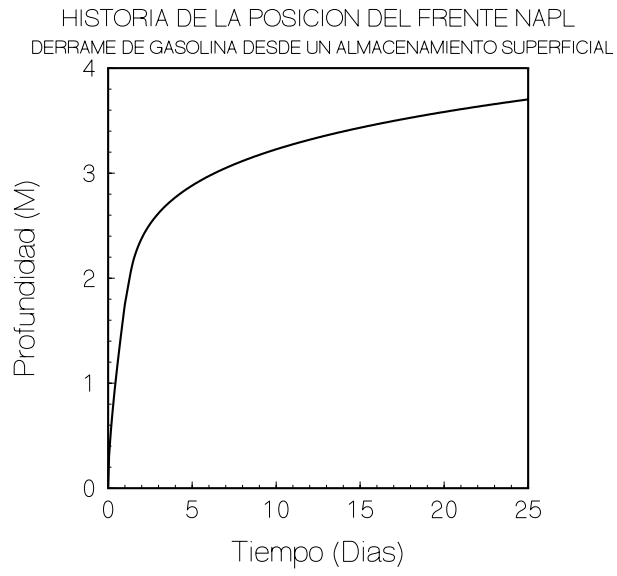


Figura B.2: Posición del frente NAPL.

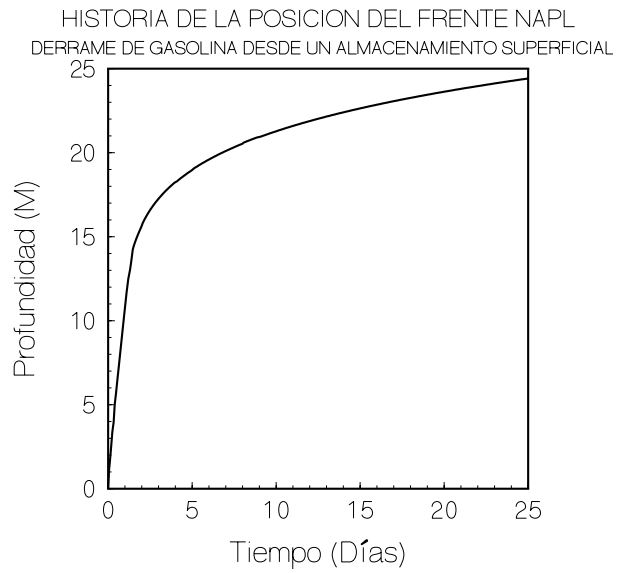


Figura B.3: Ejemplo de un almacenamiento en superficie con conductividad incrementada.

Apéndice C

Fuentes de Datos de Parámetros

Los datos que se usan en los modelos son de importancia crucial para determinar la calidad de los resultados y su aplicabilidad a los problemas del mundo real que se pretenden simular. Frecuentemente, cuando las aplicaciones del modelo no son realistas, el fracaso se debe a limitaciones en los datos y falta de una comprensión fundamental de los procesos de transporte específicos del sitio, tanto hidrológicos como químicos. La sección siguiente no está dirigida directamente a todos estos temas, sino que describe los usos y limitaciones de valores estimados de los parámetros. La siguiente discusión es con la intención de hacer hincapié en la importancia de varios parámetros de entrada del modelo HSSM. En el Inciso 4.5 se da mayor información detallada sobre los valores de los parámetros para el modelo HSSM-WIN y en el Apéndice A para el modelo HSSM-DOS. Por conveniencia, ambas secciones contienen la misma información.

Sin discusión, las mejores fuentes para los valores de los parámetros son datos específicos del sitio y de contaminantes obtenidos bajo un programa apropiado de aseguramiento y control de calidad. No hay un sustituto para datos medidos. Desafortunadamente tales datos no siempre están disponibles y es necesario recurrir a valores de parámetros estimados o de tablas. Cuando se usa este tipo de datos para modelar, debe reconocerse que se está introduciendo una incertidumbre muy importante en los resultados de la simulación. Sin embargo, los resultados del modelo pueden ser útiles, para dirigirse a tales temas como la comparación de los efectos de varias propiedades del contaminante o del suelo sobre el transporte. Por ejemplo, dado un tipo de suelo, quizás definido por parámetros seleccionados desde una tabla nacional, cómo se compara el transporte del benceno con el del tolueno? Los resultados del modelo HSSM pueden proporcionar una comprensión de efectos relativos al transporte. Debido a las limitaciones prácticas y teóricas para comprender el transporte en el subsuelo, un pronóstico del comportamiento futuro del contaminante para un sitio específico es discutible con cualquier modelo.

C.1 Propiedades del Suelo

Son de importancia primaria las propiedades del suelo: la conductividad hidráulica saturada, K_{sw} , y la curva de presión capilar agua/aire $P_c(S)$, (también conocida como curva característica de humedad o de retención de humedad). Nótese que el término "conductividad hidráulica saturada" se refiere a la conductividad con respecto al agua como se define por la ley de Darcy:

$$q_w = -K_{sw} \frac{dh}{dl} \quad (C.1)$$

en donde q_w es el flujo de agua, K_{sw} la conductividad hidráulica y $-dh/dl$ es el gradiente hidráulico (de cargas). La curva de presión capilar depende de algunas de las mismas características del medio poroso como lo hace K_s . Estas características incluyen la distribución del tamaño de los granos y los poros y las fracciones de arena, limo, arcilla y suelo. Pueden existir relaciones entre K_s y los parámetros que describen la curva $P_c(S)$ (*Brutsaert* (1967); *Brakensiek et al.* (1981); *Carsel y Parrish* (1988)).

Brooks y Corey (1964) presentaron la siguiente relación de ley potencial entre la presión capilar y la saturación reducida

$$\left(\frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right) = \left(\frac{h_{ce}}{h_c} \right)^\lambda \quad (C.2)$$

donde S_{wr} es la saturación de agua no reducible (residual), λ se denomina el índice de distribución del tamaño de poro, y h_{ce} es la carga aire de entrada. En la práctica S_{wr} , λ , y h_{ce} son parámetros que se ajustan a un conjunto de datos experimentales.

van Genuchten (1980) propuso un modelo similar

$$\frac{\theta_w - \theta_{wr}}{\theta_m - \theta_{wr}} = \left(\frac{1}{1 + (\alpha h)^n} \right)^m \quad (C.3)$$

donde θ_{wr} es el contenido residual de agua, θ_m es el contenido máximo de agua, y α , n , y m son parámetros. Nótese que el contenido de agua, θ_w , la saturación, S_w , y la porosidad, η , están relacionados por

$$\theta_w = \eta S_w \quad (C.4)$$

θ_{wr} , θ_m , α , n , y m pueden ser parámetros que se ajustan a un conjunto de datos experimentales. Comúnmente m se toma como una función simple de n (p. ej., $m = 1 - \frac{1}{n}$).

Brakensiek et al. (1981) tabularon los parámetros de *Brooks y Corey* de una serie de muestras de suelos y organizaron los resultados conforme a la clasificación de suelos. La conductividad hidráulica en cm/s se calculó con la fórmula siguiente de *Brutsaert* (1967)

$$K_{sw} = C \left(\frac{\theta_m - \theta_{wr}}{h_{ce}} \right)^2 \frac{\lambda^2}{(\lambda + 1)(\lambda + 2)} \quad (C.5)$$

donde C es una constante tomada en 270 por *Brakensiek et al.* (1981) y como 21 por *Rawls et al.* (1983). De ésta manera, esta tabla consiste de datos medidos de $P_c(S)$ ajustados al modelo de *Brooks y Corey* y valores calculados de K_{sw} . La Tabla C.1 muestra los resultados de *Brakensiek et al.* (1981) con sus distribuciones estadísticas de los valores de los parámetros. Para cada parámetro, *Brakensiek et al.* eligieron la distribución más conveniente y presentaron el resultado en términos de promedios y desviaciones estándar de distribuciones transformadas (es decir, distribución logarítmica normal). La Tabla C.1 muestra los valores no transformados que se usarían en forma directa para generar la curva de presión capilar. Estos valores fueron desarrollados utilizando las distribuciones estadísticas dadas por *Brakensiek et al.* (1981) para generar una distribución de cada parámetro. Los valores medios de las distribuciones fueron determinados y se indican en la Tabla C.1. Todos los valores del índice de distribución del tamaño de poro, λ , son bajos, lo que indica distribuciones amplias del tamaño de poro (materiales bien clasificados). Algunas arenas, en particular, pueden ser más uniformes y pueden ser mejor representadas por un valor más alto. En la Tabla C.2 se presentan los parámetros de *Brooks y Corey* para varias arenas cuyas curvas de presión capilar se midieron en RSKERL. Estos ejemplos tienen valores más altos de λ que la tabla anterior.

En la tabla de *Brakensiek et al.*, la arena tiene un valor más alto de entrada de aire (35.3 cm) que el suelo arenoso (15.9 cm). Esto sugiere que los datos de arena según *Brakensiek et al.* son dominados por arenas relativamente finas con una distribución amplia del tamaño de poro. Nótese también que el tipo de arcilla tiene un valor más bajo de entrada de aire (64.0 cm) que el suelo limoso (69.6 cm). En algunas de las clases de texturas sólo se empleó un número pequeño de muestras para generar los valores de los parámetros, lo que es una razón probable para los parámetros anómalos. Como resultado, los aspectos antes mencionados de la tabulación sugieren que puede ser únicamente útil como una guía gruesa para estimar los valores de los parámetros.

Carsel y Parrish (1988) presentaron una tabulación de datos basada en el modelo de *van Genuchten* (1980) y datos de la textura de los suelos. K_{sw} , α , n , θ_{wr} , y θ_m fueron estimados a partir de ecuaciones de regresión desarrolladas anteriormente por *Rawls y Brakensiek* (1985) para los parámetros de *Brooks y Corey*. *Carsel y Parrish* usaron una aproximación asintótica para convertir los valores h_{ce} y λ de *Brooks y Corey* a los valores α y n de *van Genuchten*. Los resultados de la tabulación de *Carsel y Parrish* (1988) se reproducen en la Tabla C.3 para los contenidos de agua saturados y residuales y en la Tabla C.4 para los parámetros n y α , y en la Tabla C.5 para la conductividad hidráulica.

Clase de Textura de Suelo (número de muestras)	λ	h_{ce} (cm)	η	θ_{wr}
Arena (19)	0.573	35.3	0.349	0.017
Suelo arenoso (69)	0.460	15.9	0.410	0.024
Arena con suelo (166)	0.398	29.2	0.423	0.048
Suelo (83)	0.258	50.9	0.452	0.034
Suelo limoso (199)	0.216	69.6	0.484	0.018
Suelo con arena y limo (129)	0.368	46.3	0.406	0.075
Suelo limoso (112)	0.283	42.3	0.476	0.087
Suelo arcillo-limoso (175)	0.178	57.8	0.473	0.054
Arcilla con suelo (26)	0.212	41.7	0.476	0.085
Arcilla (108)	0.214	64.0	0.475	0.106

Tabla C.1: Propiedades promedio de los suelos determinadas según *Brakensiek et al.* (1981).

Arena	h_{ce} (cm)	λ	S_{wr}
Lincoln	42.8	1.69	0.09
Oil Creek	53.9	4.19	0.04
Traverse City	24.0	2.43	0.0
c109	23.7	3.86	0.01
c190	10.2	4.65	0.08

Tabla C.2: Parámetros de Brooks y Corey para arenas seleccionadas.

Tipo de Suelo	Contenido Saturado de Agua θ_m			Contenido Residual de Agua θ_r		
	Tamaño de muestra	promedio	desviación estándar	Tamaño de muestra	promedio	Desviación estándar
Arcilla ^(a)	400	0.38	0.09	353	0.068	0.034
Suelo arcilloso	364	0.41	0.09	363	0.095	0.010
Suelo agrícola	735	0.43	0.10	735	0.078	0.013
Suelo con arena	315	0.41	0.09	315	0.057	0.015
Limo	82	0.46	0.11	82	0.034	0.010
Suelo limoso	1093	0.45	0.08	1093	0.067	0.015
Arcilla limosa	374	0.36	0.07	371	0.070	0.023
Suelo con arcilla limosa	641	0.43	0.07	641	0.089	0.009
Arena	246	0.43	0.06	246	0.045	0.010
Arcilla arenosa	46	0.38	0.05	46	0.100	0.013
Suelo de Arcilla arenosa	214	0.39	0.07	214	0.100	0.006
Suelo arenoso	1183	0.41	0.09	1183	0.065	0.017

^(a) El tipo de arcilla representa un suelo agrícola con un contenido de arcilla de 60% o menos.

Tabla C.3: Estadística descriptiva de los datos de *Carsel y Parrish* (1988): contenido saturado de agua y contenido residual de agua.

Tipo de Suelo	n			α_s (m ⁻¹)		
	tamaño de muestra	promedio	desviación estándar	Tamaño de muestra	promedio estándar	desviación
Arcilla ^(a)	400	1.09	0.09	400	0.80	1.2
Suelo arcilloso	364	1.31	0.09	363	1.9	1.5
Suelo agrícola	735	1.56	0.11	735	3.6	2.1
Suelo con arena	315	2.28	0.27	315	12.4	4.3
Limo	82	1.37	0.05	82	1.6	0.70
Suelo limoso	1093	1.41	0.12	1093	2.0	1.2
Arcilla limosa	374	1.09	0.06	126	.50	0.50
Suelo con arcilla limosa	641	1.23	0.06	641	1.0	0.60
Arena	246	2.68	0.29	246	14.5	2.9
Arcilla arenosa	46	1.23	0.10	46	2.7	1.7
Suelo con Arcilla arenosa	214	1.48	0.13	214	5.9	3.8
Suelo arenoso	1183	1.89	0.17	1183	7.5	3.7

Tabla C.4: Estadística descriptiva de los datos de *Carsel y Parrish* (1988): n y α_s .

Tipo de Suelo	Conductividad Hidráulica K_{sw} (m/d)		
	tamaño de muestra	promedio	desviación estándar
Arcilla ^(a)	114	0.048	0.10
Suelo arcilloso	345	0.062	0.17
Suelo agrícola	735	0.25	0.44
Suelo con arena	315	3.5	2.7
Limo	88	0.060	0.079
Suelo limoso	1093	0.11	0.30
Arcilla limosa	126	0.0048	0.026
Suelo con arcilla limosa	592	0.017	0.046
Arena	246	7.1	3.7
Arcilla arenosa	46	0.029	0.067
Suelo con arcilla arenosa	214	0.31	0.66
Suelo arenoso	1183	1.1	1.4

Tabla C.5: Estadística descriptiva de los datos de *Carsel y Parrish* (1988): conductividad hidráulica.

Como un tercer enfoque para estimar las propiedades hidráulicas del suelo, *Rawls y Brakensiek* (1985) desarrollaron ecuaciones de regresión para los parámetros de Brooks y Corey. Los datos requeridos para el uso de las regresiones son el por ciento de arena, PS, el por ciento de arcilla, PC, y la porosidad, η . La forma general de las ecuaciones de regresión es

$$f(PS, PC, \eta) = [b_o + \sum b_{ijk} PS^i PC^j \eta^k] \quad (C.6)$$

Para aplicar las ecuaciones de regresión, el por ciento de arena debe estar entre 5 y 70 y el por ciento de arcilla debe estar entre 5 y 60. La Tabla C.6 da los valores de los coeficientes de regresión para estimar el contenido residual de agua, θ_r , el logaritmo natural de la conductividad hidráulica, K_s , la carga de entrada, h_{ce} , y el índice de distribución del tamaño de poro, λ . El Apéndice F describe un programa de utilería llamado SOPROP que usa las ecuaciones de regresión para estimar estas propiedades hidráulicas.

Coefficiente	$\ln(K_{sw})$	θ_r	$\ln(h_{ce})$	$\ln(\lambda)$
b_o	-8.96847	-0.0182482	5.3396738	-0.784281
b_{100}	-	0.00087269	-	0.0177544
b_{010}	-0.028212	0.00513488	0.1845038	-
b_{001}	19.52348	0.02939286	-2.48394546	-1.062498
b_{200}	0.00018107	-	-	-0.00005304
b_{020}	-0.0094125	-0.00015395	-0.00213853	-0.00273493
b_{002}	-8.395215	-	-	1.11134946
b_{110}	-	-	-	-
b_{101}	0.077718	-0.0010827	-0.0435649	-0.03088295
b_{011}	-	-	-0.61745089	-
b_{210}	0.0000173	-	-0.00001282	-0.00000235
b_{021}	0.02733	0.00030703	0.00895359	0.00798746
b_{201}	0.001434	-	-0.00072472	-
b_{120}	-0.0000035	-	0.0000054	-
b_{012}	-	-0.0023584	0.50028060	-0.00674491
b_{202}	-0.00298	-	0.00143598	0.00026587
b_{022}	-0.019492	-0.00018233	-0.00855375	-0.00610522

Tabla C.6: Coeficientes de regresión según *Rawls y Brakensiek* (1985).

Antes de continuar, se ilustra la precisión de los valores "medios" de los parámetros tabulados mediante una comparación de las curvas de presión capilar medidas con el promedio para arena. La figura C.1 muestra la curva promedio para la arena de Brakensiek et al. y datos de varias arenas medidos en RSKERL usando una técnica desarrollada por *Su y Brooks* (1980). Estas arenas no deben considerarse como una muestra representativa, pero fueron materiales usados en varios experimentos. La clase "arena" se considera que contiene mucha variabilidad y la curva promedio no necesariamente representa una arena particular.

Las arenas 20/30, C109 y "Texas" son productos comerciales con distribuciones de tamaño de poro relativamente uniformes. Las curvas parecen casi como funciones escalonadas. La arena TCS de Traverse City, Michigan, y las arenas de Lincoln y Oil Creek, ambas del Condado de Pontotoc, Oklahoma, son materiales naturales. La arena Oil Creek tiene una distribución de tamaño de poro uniforme y no es muy representativa de arenas en general. La arena Lincoln tiene una distribución más amplia de los tamaños de poro que las otras y tiene una curva menos abrupta.

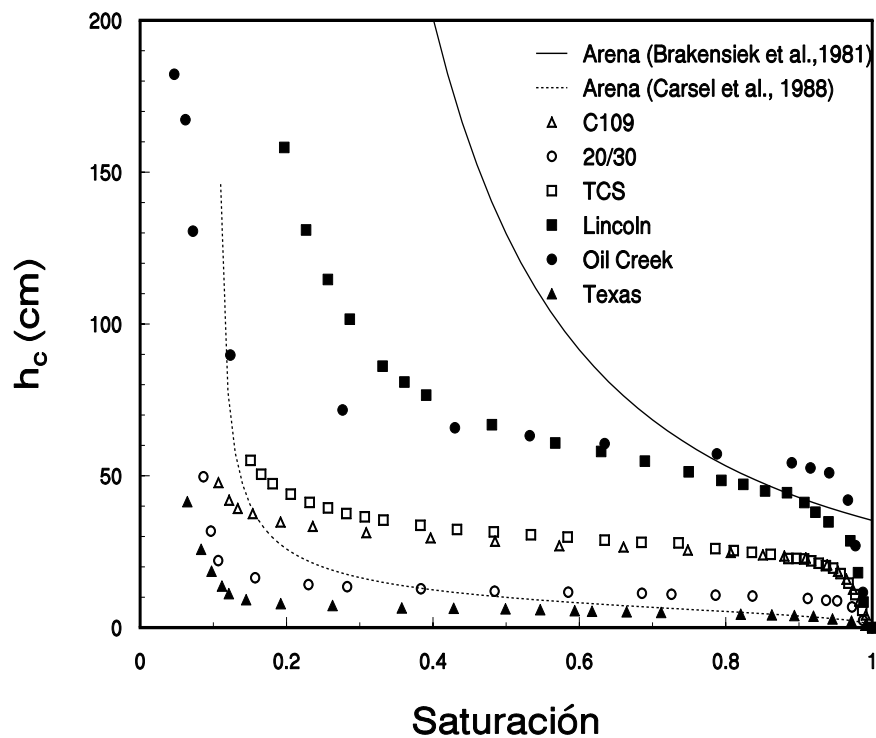


Figura C.1: Comparación de las curvas promedio de presión capilar con datos medidos.

La curva promedio de Carsel y Parrish tiene una carga de entrada de aire mucho más baja, lo que sugiere que su conjunto de datos fue dominado por arenas gruesas. Los datos como los que se muestran en la figura C.1

pueden ajustarse a cualesquiera de los modelos de presión capilar por medio de procedimientos no lineales de ajuste de curvas. El modelo llamado Curva de Retención (RETC) según *van Genuchten et al.* (1991) es un programa especial para ajustar estos modelos a los datos.

C.2 Coeficiente de Partición NAPL/Agua

La partición de los compuestos químicos que forman el NAPL entre el NAPL y la fase acuosa es otro fenómeno de gran importancia. En el modelo HSSM se supone que esta partición sigue una relación lineal de equilibrio.

$$c_o = k_o c_w \quad (C.7)$$

donde c_o es la concentración en el NAPL, c_w la concentración en el agua, y k_o es el coeficiente de partición NAPL/agua adimensional. La magnitud de este coeficiente tiene una gran influencia sobre los resultados del modelo, ya que determina parcialmente cuánto compuesto químico se libera del NAPL hacia el agua.

k_o depende de la composición del NAPL. Con base en su trabajo con 31 muestras de gasolina, *Cline et al.* (1991) sugieren que se puede usar la ley de Raoult para estimar k_o para mezclas de gasolina. La ley de Raoult proporciona una estimación de k_o para el constituyente k de un NAPL que está compuesto de un total de j constituyentes como sigue

$$k_o = \frac{\omega_k \sum \frac{c_{oj}}{\omega_j}}{s_k \gamma_k} \quad (C.8)$$

donde ω_j es el peso molecular del constituyente número j (g/mol), c_{oj} es la concentración del constituyente número j en la fase de petróleo (g/l), s_k es la solubilidad de la especie k en el agua (g/l), y γ_k es el coeficiente de actividad de la especie k . Los coeficientes de actividad son igual a 1.0 para soluciones ideales. La ecuación C.8 indica que la magnitud de k_o depende de la composición del NAPL, por lo que no es posible tabular valores de k_o para una aplicación universal. La Tabla C.7 contiene datos de partición y solubilidad para varios compuestos orgánicos de interés.

Compuesto	Solubilidad en Agua (mg/l)	k_{oc} (ml/g) o (l/kg)
benceno ^a	1750	83
etilbenceno ^a	152	1100
tolueno ^a	535	300
<i>m</i> -xileno ^a	130	982
<i>o</i> -xileno ^a	175	830
<i>p</i> -xileno ^a	196	870
MTBE eter metil <i>tert</i> -butílico	48000 ^b	11.2 ^c

^a *Mercer et al.* (1990) ^b *Cline et al.* (1991) ^c *Chemical Information Systems, Inc.* (1984)

Tabla C.7: Características de partición.

La dependencia debida a la composición de k_o presenta un problema ya que k_o varía con la composición del NAPL: gasolina, diesel, combustible, petróleo, etc. A fin de aplicar la ecuación C.8 es necesario conocer la concentración c_{oj} de cada compuesto o clase general de compuestos en la mezcla de NAPL. Adicionalmente, conforme se pierdan más compuestos solubles del NAPL, k_o puede variar. Los coeficientes de partición medidos por *Cline et al.* (1991) para benceno y tolueno, sin embargo, mostraron únicamente una ligera variación con la concentración.

Baehr y Corapcioglu (1987) usaron una mezcla simplificada para representar la gasolina que se muestra en la Tabla C.8. A partir de esta composición se calcularon varios valores de k_o por medio de la ecuación C.8 que

se enumeran en la Tabla C.9. Nótese que el benceno, tolueno y o-xileno son todos hidrófobos, pero el grado de hidrofobia varía ampliamente. En las tablas se incluyen datos para éter metilo tert-butílico (MTBE), un realzador de octanaje que puede ocupar hasta el 15% por volumen de la gasolina *Cline et al.* (1991). Los valores calculados utilizando la mezcla de *Baehr y Corapcioglu* (1987) se comparan favorablemente con los valores medidos por *Cline et al.* (1991).

Compuesto	c_{oj} inicial (g/cm ³)	Peso Molecular, ω_j
benceno	0.0082 (1.14%)	78
tolueno	0.0426 (6.07%)	92
xileno	0.0718(10.00%)	106
1-hexeno	0.0159 (2.22%)	84
ciclohexano	0.0021 (0.29%)	84
h-hexano	0.0204(2.84%)	86
otros aromáticos	0.0740 (10.31%)	106
otras parafinas (C ₄ -C ₈)	0.3367 (46.91%)	97.2
extremos pesados (> C ₈)	0.1451 (20.21%)	128

Tabla C.8: Mezcla de pseudo-gasolina (*Baehr y Corapcioglu*, 1987).

Compuesto	Promedio k_o	Coefficiente de variación % desv.
MTBE éter metil <i>tert</i> -butílico	15.5	19
benceno	350 (312)	21
tolueno	1250 (1202)	14
etilbenceno	4500	13
<i>m</i> -, <i>p</i> -xileno	4350	12
<i>o</i> -xileno	3630 (4440)	12
<i>n</i> -propilbenceno	18500	30
3-,4-etiltolueno	12500	19
1,2,3-trimetilbenceno	13800	20

Tabla C.9: Coeficientes de partición combustible/agua medidos por *Cline et al.* (1991) comparados con valores de k_o calculados por *Baehr y Corapcioglu* (1987) en paréntesis.

Suponiendo condiciones ideales, *Cline et al.* (1991) usaron una aproximación adicional de la ley de Raoult, que puede declararse como sigue

$$k_o = \frac{1 \times 10^6 \left(\frac{\rho_o}{\omega_o} \right)}{\frac{s_k}{\omega_k}} \quad (C.9)$$

donde ρ_o es la densidad de la fase NAPL (g/ml), ω_o es el peso molecular medio de la fase NAPL (g/mol), ω_k es el peso molecular del compuesto k (g/mol) y s_k la solubilidad del compuesto de interés en mg/l. *Cline et al.* (1991) demostraron que esta aproximación proporcionaba un ajuste adecuado con los coeficientes de partición medidos de sus 31 muestras de gasolina. *Cline et al.* usaron una densidad media de la gasolina de 0.74 g/ml y un peso molecular medio de la gasolina de 100-105 g/mol. Los coeficientes de partición medidos mostraron una variación aproximada del 30%, y la relación según la ley de Raoult ajustada representó en forma adecuada la tendencia de los valores sobre una gráfica doble-logarítmica. En el Apéndice G se describe un programa de

utilería denominado RAOULT que lleva a cabo los cálculos según la ley de Raoult usando las ecuaciones C.8 y C.9.

Además del coeficiente de partición, la composición del NAPL es importante para determinar las concentraciones de los compuestos en el agua subterránea contaminada. En vista de que la concentración en la fase acuosa depende de la concentración de la fase de petróleo, la composición del NAPL dicta ambos, el coeficiente de partición y la cantidad de compuesto disponible para la contaminación de la fase acuosa.

C.3 Estimación de la Saturación Máxima de NAPL en la Lente

Cuando el LNAPL se acumula en una lente, desplaza el agua de la franja capilar y por debajo del nivel freático. No toda la fase de humedecimiento se desplaza, y la saturación de LNAPL aumenta desde la base de la lente hacia la cima. La distribución del LNAPL cerca del nivel freático es determinada por las fuerzas de gravedad y capilaridad, y por la dinámica de las fluctuaciones del nivel freático. La forma usual de registrar el espesor del LNAPL es por medio de pozos de observación. Bajo condiciones donde el nivel freático es estático, estos pozos de observación registran la distribución de energía real dentro de la formación, independientemente de las fuerzas capilares. Debido a que los pozos de observación tienen un radio grande, la presión capilar es despreciable. Cuando el nivel freático fluctúa, tal como en un ambiente de mareas, el espesor del LNAPL en el pozo de observación puede mostrar poca similitud con el espesor real dentro de la formación *Kemblowski y Chiang* (1990). El modelo HSSM supone que el nivel freático es estático y se requiere estimar una saturación media del LNAPL dentro de la lente. Este apéndice describe el método para estimar la saturación media del LNAPL y el Apéndice H describe la utilería NTHICK para efectuar estos cálculos.

La saturación máxima de la fase LNAPL en la lente se determina por medio de la aproximación de la distribución del LNAPL en la franja capilar. La curva de retención de humedad de suelo da la distribución del agua en un sistema de dos fases, aire-agua, la cual usando el modelo Brooks y Corey, es

$$\Theta_w = \left(\frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr}} \right) = \left(\frac{h_{ce}}{z} \right)^\lambda, z > h_{ce} \quad (C.10)$$

donde z se mide en forma ascendente desde el nivel freático y Θ_w es la saturación reducida de agua. A elevaciones abajo de la carga de entrada, h_{ce} , Θ_w son iguales a uno. La ecuación C.10 da la saturación reducida de agua como una función de la elevación arriba del nivel freático bajo condiciones de equilibrio vertical. Para aplicar este modelo a un sistema de fases múltiples que incluye el producto libre en el nivel freático, hay que determinar como se puede estimar el comportamiento de equilibrio para un sistema aire-LNAPL y LNAPL-agua a partir de aquellos para un sistema aire-agua. Si se deprecian los cambios en la estructura del suelo (expansión, etc.), entonces la diferencia en el comportamiento de un sistema de fluido a otro puede atribuirse únicamente a diferencias en las propiedades de los fluidos. El desarrollo de expresiones para las relaciones entre las distribuciones de fluidos se inicia con los parámetros de Brooks y Corey para el sistema aire-agua: h_{ce} , λ y S_{wr} . Para sistemas múltiples de fluidos los subíndices 'w', 'o' y 'a' designan las fases de agua, NAPL y aire. La primera generalización de la ecuación C.10 da relaciones para las presiones de entrada en un sistema compuesto de los fluidos i y j

$$p_{bij} = p_{baw} \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_{aw}} = \rho_w g h_{ce} \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_{aw}} \quad (C.11)$$

donde p_{bij} es la presión de burbujeo (o entrada) en un sistema compuesto de los fluidos i y j , σ_{ij} es la tensión en la interfaz la tensión entre los fluidos, i y j , y g es la aceleración de la gravedad. p_{baw} es la presión de entrada asociada con la carga de entrada, h_{ce} . La ecuación C.11 sigue de la suposición que el tamaño máximo de poro permanece constante y que la presión de entrada depende únicamente de la tensión superficial. La presión capilar entre los fluidos i y j , p_{cij} queda definida por

$$p_{cij} = \Delta\rho_{ij} g z \quad (C.12)$$

donde $\Delta\rho_{ij}$ es la diferencia en densidad entre los fluidos i y j , y se elige el nivel de referencia z a la elevación

donde desaparece la presión capilar. Esto da

$$\Theta_j = \left(\frac{\rho_w h_{ce} \sigma_{ij}}{\Delta \rho_{ij} \sigma_{aw} z} \right)^\lambda = \left(\frac{h_{ceij}}{z} \right)^\lambda \quad (C.13)$$

para $z \geq h_{ceij}$ donde j es la fase de humedecimiento y

$$h_{ceij} = \frac{\rho_w h_{ce} \sigma_{ij}}{\Delta \rho_{ij} \sigma_{aw}} \quad (C.14)$$

Leverett (1941) introdujo relaciones de escala similares, las cuales fueron usadas después por *van Dam* (1967), *Schiegg* (1985), *Parker et al.* (1987), *Cary et al.* (1989), *Demond y Roberts* (1991), y otros. Para el sistema aire-NAPL $\Delta \rho_{ao}$ puede tomarse como igual a ρ_o , debido a la baja densidad del aire.

En un sistema de tres-fases, el agua se toma como el fluido humectante, el LNAPL se considera de propiedad humectante intermedia, mientras que el aire es un fluido no humectante. La implicación de este orden de propiedad humectante es que el agua se encuentra en los poros pequeños, el LNAPL en los poros intermedios y el aire en los poros más grandes. Ya que las relaciones de presión capilar se definen para pares de dos fluidos, es necesario trabajar con pares de fluidos en forma separada en un sistema de tres fases. Este enfoque fue desarrollado por *Leverett* (1941) y adoptado por *Schiegg* (1985), *Parker et al.* (1987) y otros. La *suposición de Leverett* es que la saturación del agua en un sistema de tres fases depende únicamente de la presión capilar NAPL-agua, mientras que la saturación total de líquidos, $S_t = S_w + S_o$, es una función de la curvatura interfacial de la interfaz aire-NAPL, independiente del número de proporciones de líquidos contenidas en el medio poroso. Con el modelo de retención según la ley potencial de Brooks y Corey, estas relaciones pueden escribirse como

$$\Theta_w = \Theta_w(p_{cow}) = \left(\frac{h_{ceow}}{z - z_{ow}} \right)^\lambda \quad (C.15)$$

y

$$\Theta_t = \Theta_t(p_{cao}) = \left(\frac{h_{ceao}}{z - z_{ao}} \right)^\lambda \quad (C.16)$$

donde z_{ow} y z_{ao} son las elevaciones a las cuales desaparecerían las presiones capilares correspondientes.

En vista de que las saturaciones residuales de LNAPL arriba y debajo del nivel freático pueden ser diferentes, las funciones de escala para las saturaciones reducidas son

$$\Theta_w(p_{cow}) = \frac{S_w - S_{wr}}{1 - S_{wr} - S_{ors}} \quad (C.17)$$

y

$$\Theta_t(p_{cao}) = \frac{S_t - S_{wr} - S_{orv}}{1 - S_{wr} - S_{orv}} = \frac{S_w + S_o - S_{wr} - S_{orv}}{1 - S_{wr} - S_{orv}} \quad (C.18)$$

donde S_{wr} es la retención de agua o capacidad de campo, y S_{or} y S_{orv} son las saturaciones residuales de NAPL en las zonas saturada y vadosa, respectivamente.

Juntas las ecuaciones C.15 hasta la C.18 determinan la distribución de fluidos cerca del nivel freático. Lo que todavía sigue faltando es una determinación de los niveles de referencia de presión capilar z_{ow} y z_{ao} . Sin embargo, estos son los niveles a los cuales se encontrarían las interfaces de fluidos en los pozos de observación en donde las fuerzas capilares están ausentes, y el problema se reduce al problema estándar de manómetros de la hidrostática. Dejemos que la elevación z_{aw} sea la de la interfaz del agua libre en ausencia del NAPL, mientras z_{ao} y z_{ow} sean las elevaciones correspondientes cuando existe una capa de NAPL de un espesor aparente b_o y densidad ρ_o . Un cálculo simple de la hidrostática muestra que

$$z_{aw} - z_{ow} = \frac{\rho_o}{\rho_w} b_o \quad (C.19)$$

donde ρ_w es la densidad del agua. También se encuentra que

$$z_{ao} - z_{aw} = \left(\frac{\rho_w - \rho_o}{\rho_w} \right) b_o \quad (C.20)$$

El espesor total del hidrocarburo presente en la región libre de productos, con exclusión de cualquier hidrocarburo atrapado arriba o debajo del nivel freático, se encuentra integrando la diferencia entre el contenido total de líquidos y el contenido de agua encima de la región libre de producto:

$$D_o = \int (\theta_t - \theta_w) dz \quad (C.21)$$

Este uso del espesor de la capa de NAPL, D_o , corresponde al de *Schwille* (1967) quien lo usó para la relación entre la cantidad de NAPL que se esparce lateralmente sobre la superficie del agua subterránea y el área ocupada por ella. Otros autores se han referido al espesor de la capa de NAPL como aquel que pueda observarse visualmente en un aparato de laboratorio.

Los contenidos totales de agua y líquidos se estiman utilizando una forma modificada de la función de presión capilar de Brooks y Corey con h_c igual a la elevación arriba de la interfaz del fluido como se ve en un pozo de observación. La elevación del contenido de agua se mide a partir del nivel de la interfaz hidrocarburo-agua, mientras que la elevación para el contenido total de líquidos se mide a partir del nivel de la interfaz aire-hidrocarburo en el pozo. Las cargas de entrada de la fase no humectante para los sistemas de fluidos hidrocarburo-agua y aire-hidrocarburo, h_{ceow} y h_{cea0} respectivamente, se estiman a partir de

$$h_{ceow} = \frac{\rho_w \sigma_{ow}}{(\rho_w - \rho_o) \sigma_{aw}} \quad (C.22)$$

y

$$h_{cea0} = \frac{\rho_w \sigma_{ao}}{\rho_o \sigma_{aw}} h_{ce} \quad (C.23)$$

donde h_{ce} es la carga normal de aire de entrada para el sistema aire-agua. Con las ecuaciones C.15 a C.18 se puede evaluar la integral en la ecuación C.21. El resultado puede escribirse como

$$D_o = \alpha + \beta(b_o) b_o \quad (C.24)$$

donde

$$\alpha = \frac{\eta [\lambda(1 - S_{wr}) - S_{ors}] h_{ceow} - [\lambda(1 - S_{wr} - S_{orv})] h_{cea0}}{1 - \lambda} \quad (C.25)$$

$$\beta(b_o) = \eta(1 - S_{wr}) + \frac{\chi}{1 - \chi} \eta S_{orv} - \frac{\eta(1 - S_{wr} - S_{ors})}{1 - \lambda} \left(\frac{(1 - \chi) h_{ceow}}{b_o} \right)^\lambda \quad (C.26)$$

$$\chi = \frac{\sigma_{ao}}{\sigma_{ow}} \left(\frac{\rho_w - \rho_o}{\rho_o} \right) \left(\frac{1 - S_{wr} - S_{orv}}{1 - S_{wr} - S_{ors}} \right)^{\frac{1}{\lambda}} \quad (C.27)$$

Resultados similares fueron presentados por *Farr et al.* (1990) y *Lenhard y Parker* (1990). En la ecuación C.24, b_o es el espesor de la capa de hidrocarburo que se vería en un (pozo de observación) capilar grande, y S_{orv} y S_{ors} son las saturaciones residuales de hidrocarburos arriba y debajo de la lente, respectivamente. La función $\beta(b_o)$ tiene una dependencia débil de b_o , especialmente con espesores moderados a grandes de LNAPL. Esto implica que la relación entre D_o y b_o es casi lineal. La relación del espesor medio de la formación, D_o , y el espesor en el pozo de observación, b_o , da la saturación media del NAPL en la lente.

$$S_{o(max)} = \frac{D_o}{\eta b_o} = \frac{1}{\eta} \left(\frac{\alpha}{b_o} + \beta \right) \quad (C.28)$$

Apéndice D

Revisión Concisa de las Bases Teóricas del Modelo HSSM

Este apéndice contiene una revisión de las bases teóricas del Modelo de Evaluación de Derrames de Hidrocarburos. Esta presentación está basada en el material elaborado en *The Hydrocarbon Spill Screening Model (HSSM) Volume 2: Theoretical Background and Source Codes* (Charbeneau et al., 1995).

D.1 Modelo de Transporte Cinemático de Contaminante Aceitoso

El modelo cinemático de contaminante aceitoso (KOPT) fue derivado de la ecuación de conservación de fase para un NAPL en presencia de una cantidad fija de agua y aire en el espacio poroso. La cantidad de agua está determinada por la velocidad de recarga y la saturación del aire atrapado se estima de la observación que el agua llena únicamente alrededor del 50% del espacio poroso durante la infiltración. Durante el derrame del NAPL y, dependiendo del flujo de condición de frontera, el flujo puede moverse por gravedad y presión. Al finalizar el derrame se supone que el flujo se mueve únicamente por gravedad. Toda la ecuación de conservación contiene únicamente términos con las unidades de longitud y tiempo, que se denomina flujo cinemático. La ecuación de conservación resultante para la fase NAPL es

$$\eta \frac{\partial S_o}{\partial t} = \frac{dK_{eo}(S_o, S_{w(avg)})}{dS_o} \frac{\partial S_o}{\partial z} = 0 \quad (D.1)$$

En donde η es la porosidad, $K_{eo}(S_o, S_{w(avg)})$ es la conductividad efectiva para el NAPL, que es una función de S_o , de la saturación de NAPL (fracción del espacio poroso rellena por el NAPL) y $S_{w(avg)}$, la saturación de agua determinada por la recarga, z es la profundidad debajo de la superficie y t el tiempo. La ecuación D.1 tiene la solución de acuerdo con el método de características.

$$\frac{dS_o}{dt} = 0 \quad \text{junto con} \quad \frac{dz}{dt} = \frac{1}{\eta} \frac{dK_{eo}(S_o, S_{w(avg)})}{dS_o} \quad (D.2)$$

La ecuación D.2 se denomina la solución del método clásico de características de la ecuación D.1. En vista de que la función de conductividad efectiva es no lineal, debe suplementarse por una solución generalizada o de impacto, dado por

$$\frac{dz}{dt} = \frac{q_1 - q_2}{\eta (S_1 - S_2)} \quad (D.3)$$

donde q_1 y q_2 son los flujos de NAPL de cada lado de la arista frontal del NAPL invasor (ver figura D.1), y S_1 y S_2 son las saturaciones del NAPL correspondientes. Las ecuaciones D.2 y D.3 están implementadas en el módulo KOPT. Durante la infiltración bajo condiciones de encharcamiento, los flujos en la ecuación D.3 son determinados por el modelo Green Ampt (*Green y Ampt*, 1911).

La figura D.2 ilustra en forma esquemática la solución obtenida del modelo KOPT. Mientras que el NAPL se está infiltrando, la arista frontal del NAPL está representada por un frente abrupto (ver figura D.1). La posición del frente está dada por la ecuación D.3. Después del final del derrame, la redistribución del NAPL está gobernada por la gravedad (ecuación D.2). La distribución resultante del NAPL detrás del frente es uniforme (figura D.1, derecha) y existe una disminución gradual en la saturación desde el frente hacia la superficie del terreno. En vista de que la saturación del NAPL se reduce con el tiempo en el frente, la velocidad dada por la ecuación D.3 también se reduce gradualmente. La figura D.2 muestra la reducción gradual de velocidad del frente conforme

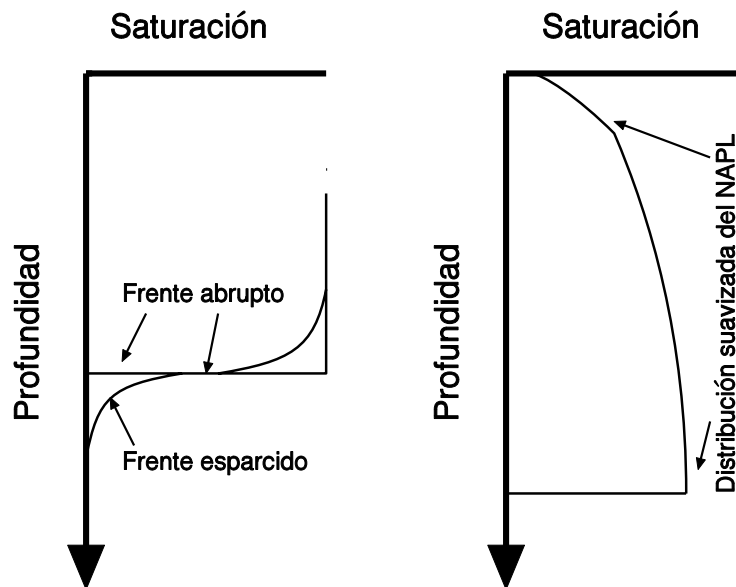


Figura D.1: Comparación entre frentes abruptos y esparcidos durante la infiltración (izquierda) y el perfil de NAPL durante la redistribución (derecha).

avanza el tiempo.

El compuesto disuelto del NAPL (es decir, compuesto de *benceno* de una *gasolina* NAPL) se simula por la solución de una ecuación de conservación de masa. La solución también se obtiene por medio del método de características, aunque, ya que la ecuación de conservación es lineal, en este caso, no se requiere ninguna solución de impacto. La ecuación de conservación es

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\eta \left(S_w + S_o k_o + \frac{\rho_b k_d}{\eta} \right) c_w \right] + \frac{\partial}{\partial z} (q_o c_o + q_w c_w) = 0 \quad (\text{D.4})$$

en donde k_o es el coeficiente de partición de equilibrio lineal entre el agua y las fases de NAPL ($k_o = c_o/c_w$), ρ_b es la densidad global, c_s es la concentración de la fase de suelo, k_d es el coeficiente de partición de equilibrio lineal entre las fases de suelo y agua ($k_d = c_s/c_w$) y q_o y q_w son los flujos de NAPL y agua respectivamente. La solución del método de características es

$$\frac{dc_w}{dt} = 0 \quad \text{junto con} \quad \frac{dz}{dt} = \frac{1}{\eta} \frac{q_w + q_o k_o}{\left(S_w + S_o k_o + \frac{\rho_b k_d}{\eta} \right)} \quad (\text{D.5})$$

que esta implementada en KOPT.

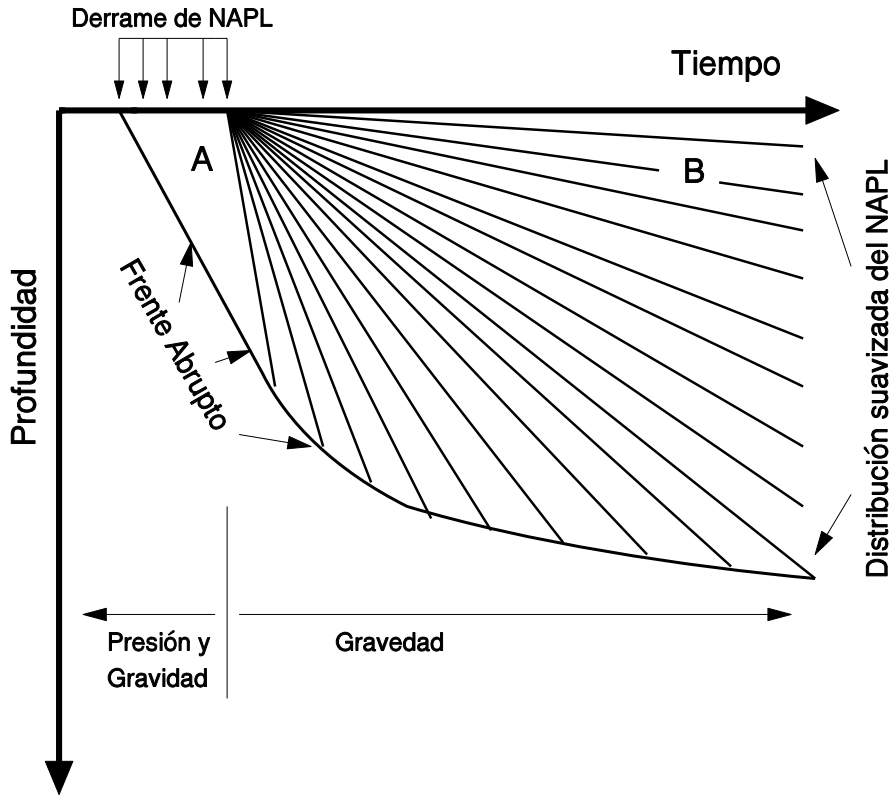


Figura D.2: Representación de profundidad contra tiempo de la solución del modelo KOPT.

D.2 Modelo OILENS

El modelo OILENS simula el flujo de NAPL y su compuesto en una lente cerca del nivel freático. Las distribuciones del agua, NAPL y aire son idealizadas, de acuerdo con la teoría descrita en el apéndice C.3, que da una saturación uniforme equivalente de NAPL en la lente ($S_{o(max)}$ en ecuación C.28). Partiendo de esta suposición, puede escribirse una ecuación de conservación de masa para la lente NAPL. Se utilizan dos ecuaciones de conservación: una para un cilindro localizado directamente debajo del la fuente de NAPL, y otra para todo el lente (figura D.3). La ecuación para el cilindro da

$$\pi R_s^2 \eta S_{o(max)} \beta \frac{dh_{os}}{dt} = Q_{KOPT} - Q_{radial} - Q_{loss} \quad (D.6)$$

en donde R_s es el radio de la fuente del NAPL, $S_{o(max)}$ la saturación en la lente, β está definida como $\beta = \rho_w / (\rho_w - \rho_o)$, h_{os} es la carga del NAPL en la fuente, Q_{KOPT} es el flujo volumétrico de entrada a la lente, Q_{radial} es el flujo volumétrico de salida desde el cilindro central, Q_{loss} es la suma de las pérdidas volumétricas debidas a disolución y entrapamiento de la fase NAPL en las zonas saturada y vadosa. La altura de la lente a cualquier radio está determinada por la suposición de Dupuit que genera perfiles basados en la suposición, que la carga es constante a lo largo de secciones verticales (Bear, 1972). La ecuación de continuidad para el volumen de la lente, V_L , es

$$\frac{dV_L}{dt} = Q_{KOPT} - Q_{out} = \frac{\partial V_L}{\partial h_{os}} \frac{dh_{os}}{dt} + \frac{\partial V_L}{\partial R_T} \frac{dR_T}{dt} \quad (D.7)$$

en donde Q_{out} es la pérdida del NAPL por disolución y entrapamiento con la saturación residual y R_T es el radio de la lente. El entrapamiento del NAPL ocurre conforme se colapsa el lente después de que se detenga el flujo de entrada a la lente (ilustrado por la superficie asciurada cruzada en la figura 2.4). El volumen de la lente esta determinado por

$$V_L = \frac{\pi R_T^2 \eta S_{o(max)} \beta h_{os} \sqrt{\frac{\pi}{4}} \operatorname{erf} \left[\sqrt{\ln \left(\frac{R_T}{R_s} \right)^2} \right]}{\sqrt{\ln \left(\frac{R_T}{R_s} \right)^2}} \quad (D.8)$$

Las ecuaciones D.6 y D.7 forman un sistema de dos ecuaciones diferenciales ordinarias acopladas en dos incógnitas, h_{os} y R_T . La clave para la solución eficiente de estas ecuaciones es la expresión analítica para el volumen de la lente, V_L , dada en la ecuación D.8.

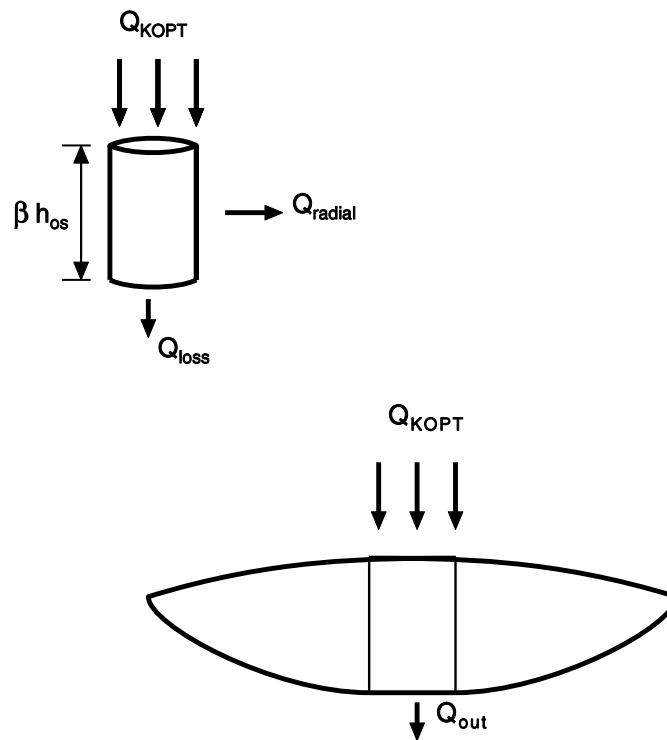


Figura D.3: La lente NAPL y su cilindro central (arriba a la izquierda) para la aplicación de la ecuación de conservación.

El modelo KOPT genera ambos, el flujo del NAPL hacia la lente y la concentración del compuesto como funciones del tiempo. Se supone que la disolución del compuesto en el acuífero es causada por contaminación del agua de recarga que se mueve a través del lente, y por contacto con el agua subterránea que fluye. El flujo de masa por recarga, \dot{m}_{infil} , es estimado como

$$\dot{m}_{infil} = q_{wi} \pi R_T^2 c_{wo} \quad (D.9)$$

en donde q_{wi} es la velocidad de recarga y c_{wo} concentración de la fase de agua del compuesto en equilibrio. La contribución al flujo de masa por el agua subterránea en movimiento en contacto con el NAPL, \dot{m}_{diss} , es

$$\dot{m}_{diss} = 4 c_{wo} \eta v R_T \sqrt{\frac{2 R_T \alpha v}{\pi}} \int_0^1 (1 - w^2)^{\frac{1}{4}} dw \quad (D.10)$$

end donde v es la velocidad de filtración y α_V la dispersividad vertical del acuífero. La integral en la ecuación D.10 es aproximadamente igual a 0.87402.

El flujo de masa hacia el acuífero está dado por la suma de las ecuaciones D.9 y D.10. Esta cantidad varía con el tiempo, ya que depende del radio de la lente del NAPL y de la cantidad del compuesto disuelto en el NAPL. Conforme aumenta el radio de la lente, aumenta el flujo de masa; pero conforme se vacía el compuesto de la lente, también declina el flujo de masa.

D.3 Modelo de Estela de Fuente Transitoria tipo Gaussiana

Con el lente NAPL localizado en la franja capilar, la fuente de contaminación permanece cerca de la parte superior del acuífero (figura 1.3). El modelo refleja este comportamiento, suponiendo que los contaminantes sólo están presentes en cierto espesor del acuífero, que se denomina espesor de penetración. Este espesor es determinado a partir del tamaño de la lente, la velocidad de recarga, la velocidad del agua subterránea y la dispersividad vertical. En el modelo HSSM, el contaminante en el acuífero se promedia con el espesor de penetración y las concentraciones varían en dos dimensiones: en forma longitudinal y transversal al plano horizontal.

El transporte bidimensional del soluto con decaimiento de primer orden obedece a

$$R_d \frac{\partial c}{\partial t} = \underbrace{D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}}_{\text{Dispersión}} - \underbrace{v \frac{\partial c}{\partial x}}_{\text{Advección}} - \underbrace{\lambda^* R_d c}_{\text{Decaimiento}} \quad (\text{D.11})$$

en donde R_d es el coeficiente de retardo, c la concentración, t el tiempo, D_L y D_T son los coeficientes de dispersión longitudinal y transversal respectivamente, x la distancia longitudinal, y la distancia transversal a la línea del centro de la estela en el plano horizontal, v la velocidad de filtración y λ^* es la constante de decaimiento de primer orden. Las condiciones de frontera definen la fuente tipo gaussiana

$$\begin{aligned} c(x, y, 0) &= 0 & (\text{D.12}) \\ c(0, y, t) &= c_o \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma^2}\right) \\ c(\infty, y, t) = c(x, -\infty, t) = c(x, \infty, t) &= 0 \end{aligned}$$

donde σ es la desviación estándar de la distribución del contaminante transversal a la estela (ver figura 2.5, página 13), y c_o es la concentración pico. Cuando se hacen adimensionales, las ecuaciones son

$$\frac{\partial C}{\partial T} + \frac{\partial C}{\partial X} + \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} + D \frac{\partial^2 C}{\partial Y^2} + \Lambda C = 0 \quad (\text{D.13})$$

y

$$C(0, Y, T) = \exp(-Y^2) \quad (\text{D.14})$$

con las variables adimensionales definidas por

$$\begin{aligned} X &= \frac{vx}{D_L} \\ Y &= \frac{y}{\sigma} \\ T &= \frac{v^2 t}{R_d D_L} \\ \Lambda &= \frac{R_d \lambda^* D_L}{v^2} \\ D &= \frac{D_L D_T}{\sigma^2 v^2} \\ C &= \frac{c}{c_o} \end{aligned}$$

La aplicación de las técnicas de transformadas de Fourier y Laplace da la solución para la condición de frontera en tiempo no variable (equation D.13) como

$$C(X, Y, T) = X \int_0^T \frac{\exp\left(-\frac{X^2}{4t} - \frac{Y^2}{2 + 4Dt} + \frac{X}{2} - \frac{1 + 4\Lambda t}{4}\right)}{\sqrt{4\pi t^3(1 + 2Dt)}} dt \quad (D.15)$$

Sin embargo, el flujo de masa al acuífero siempre es dependiente del tiempo. La condición de frontera está incorporada en TSGPLUME, al usar el principio de Duhamel (*Carslaw y Jaeger*, 1959):

$$C(X, Y, T) = \int_0^T B(T - \omega) \frac{\partial C(X, Y, \omega)}{\partial t} d\omega \quad (D.16)$$

en donde $B(T)$ es el flujo de masa dependiente del tiempo de las ecuaciones D.9 y D.10.

Apéndice E

Conversión Aproximada de los Parámetros de la Curva de Presión Capilar

Los módulos KOPT y OILENS están diseñados en primer lugar para usar el modelo de Brooks y Corey. Sin embargo, el modelo HSSM-KO permite la entrada de los parámetros de presión capilar de van Genuchten. Estos no son usados en forma directa por el modelo, sino más bien se convierten automáticamente a parámetros aproximadamente equivalentes de Brooks y Corey por medio de un método propuesto por *Lenhard et al.* (1989). En vista de que el modelo de van Genuchten no es equivalente al de Brooks y Corey, los parámetros no son exactamente equivalentes. La conversión está dada por

$$\lambda = \frac{m}{1-m} (1 - 0.5^{\frac{1}{m}}) \quad (E.1)$$

$$h_{ce} = \frac{S_*^{(\frac{1}{\lambda})}}{\alpha} (S_*^{(-\frac{1}{m})} - 1)^{1-m} \quad (E.2)$$

donde

$$m = 1 - \frac{1}{n} \quad (E.3)$$

y S_* es definida por la relación empírica de *Lenhard et al.* (1989)

$$S_* = 0.72 - 0.35 \exp(-n^4) \quad (E.4)$$

La Figura E.1 compara el modelo de Brooks y Corey con el modelo de van Genuchten para conjuntos equivalentes de parámetros. Los conjuntos de parámetros equivalentes se muestran en la Tabla E.1.

Textura del Suelo	θ_m	θ_r	Brooks y Corey		van Genuchten	
			λ	h_{ce}	n	α
Arena	0.43	0.0443	1.1852	4.628	2.7953	0.1417
Suelo areno-arcilloso	0.39	0.1121	0.3887	8.0941	1.4321	0.0858

Tabla E.1: Parámetros equivalentes de la curva de presión capilar.

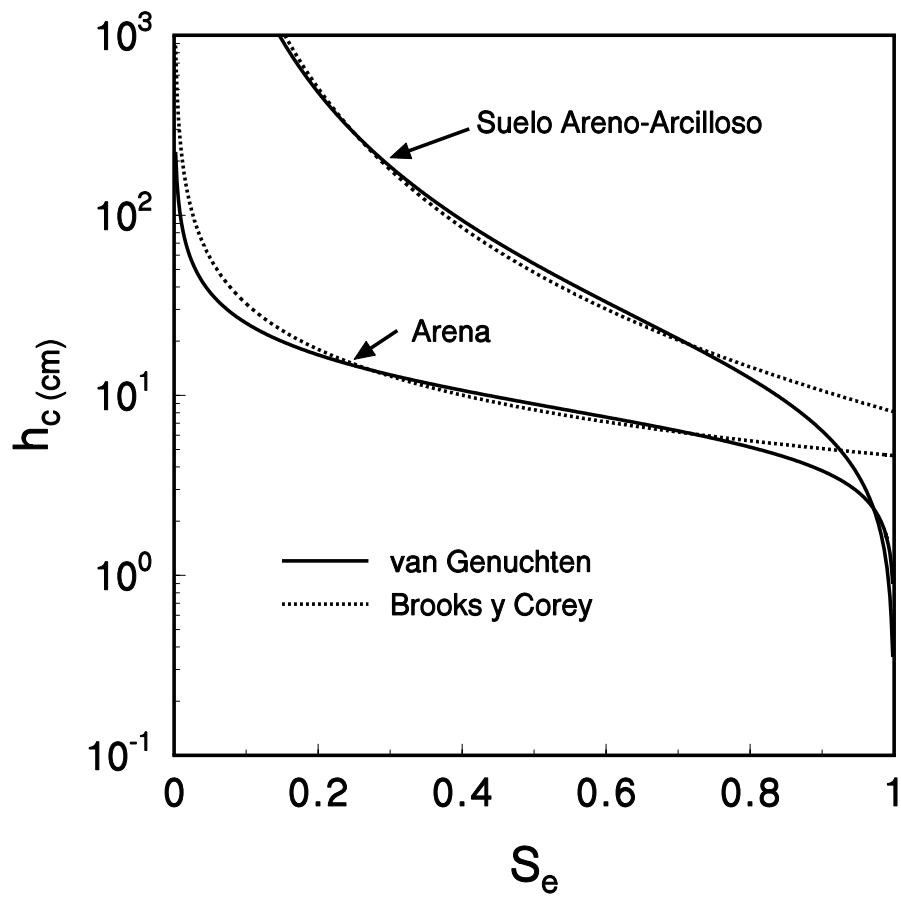


Figura E.1: Comparación de parámetros equivalentes de Brooks y Corey y de van Genuchten para arena y suelos areno-arcillosos, $S_e = (\theta_w - \theta_{wr}) / (\theta_m - \theta_r)$.

Apéndice F

Utilería de Regresión para Propiedades de Suelo (SOPROP)

La utilería SOPROP se proporciona con el modelo HSSM a fin de estimar las propiedades de los suelos a partir del conjunto de ecuaciones de regresión desarrolladas por *Rawls y Brakensiek* (1985). SOPROP se ejecuta desde el punto de petición de DOS tecleando el comando:

SOPROP

No se requieren ningunos archivos de entrada o de salida en virtud de que todas las entradas y salidas de la utilería se dirigen a la pantalla. Se le pide al usuario

- el por ciento de arena, PS,
- el por ciento de arcilla, PC, y
- la porosidad, η .

Se calculan la conductividad hidráulica y los parámetros de Brooks y Corey y luego se escriben en la pantalla como se muestra en la Figura F.1. Recuerde que los datos en los que se basan las ecuaciones de regresión son de suelos agrícolas y forestales; de manera que la salida de SOPROP es apropiada para suelos similares con un porcentaje de arena entre 5.0 y 70.0 y un porcentaje de arcilla entre 5.0 y 60.0.

La gama de valores de parámetros que se producen por estas ecuaciones se muestra en la Tabla F.1. Un extremo ocurre cuando el por ciento de arena está en su valor máximo (70%) y el porcentaje de arcilla está en su valor mínimo (5%). La conductividad hidráulica, como es de esperarse, es la más alta (0.92 m/d) con la porosidad más alta (0.40). Las conductividades hidráulicas mayores que este valor están fuera del rango de los parámetros tabulados que forman la base para las ecuaciones de regresión. Asimismo otro extremo ocurre cuando el por ciento de arena es un mínimo (5%) y el por ciento de arcilla es un máximo (60%). Con porosidad baja (0.30) la conductividad es baja (2.3×10^{-7} m/d) y la carga de entrada de aire es alta (6.4 m).

```

*****
ESTIMACION DE LAS PROPIEDADES HIDRAULICAS DE SUELOS
SEGUN LAS ECUACIONES DE REGRESION DE
RAWLS Y BRAKENSIEK (1985)

*****

PARA SUELO CON:
  70.0000 PORCIENTO DE ARENA
  5.0000 PORCIENTO DE ARCILLA
  .3500 POROSIDAD
LOS PARAMETROS HIDRAULICOS ESTIMADOS SON:

CONDUCTIVIDAD HIDRAULICA                .4257 m/d
PARAMETROS DE BROOKS Y COREY:
SATURACION RESIDUAL DE AGUA              .1403
CARGA DE ENTRADA DE AIRE                 .1754 m
INDICE DE DISTRIBUCION DE TAMAÑO DE PORO .4902

***EJECUCION EXITOSA DE SOPROP

```

Figura F.1: Salida de pantalla de SOPROP.

Parámetros de entrada de SOPROP			Resultados de SOPROP			
Porcentaje de arena	Porcentaje de arcilla	Porosidad	K_{sw} (m/d)	S_{wr}	h_{ce} (m)	λ
70	5	0.40	0.92	0.12	0.14	0.46
70	5	0.35	0.43	0.14	0.18	0.49
70	5	0.30	0.18	0.18	0.24	0.53
70	5	0.25	0.065	0.22	0.33	0.58
5	60	0.50	1.5×10^{-3}	0.21	1.3	0.12
5	60	0.40	1.3×10^{-5}	0.16	2.9	0.053
5	60	0.30	2.3×10^{-7}	0.023	6.4	0.015

Tabla F.1: Rango de valores de parámetros producidos por las ecuaciones de regresión de *Rawls* y *Brakensiek* (1985).

Apéndice G

Utilería RAOULT

El cálculo del coeficiente de partición NAPL/agua, k_o , se simplifica mediante el uso de la utilería RAOULT. Esta utilería usa la composición de la fase de hidrocarburo para determinar el coeficiente de partición con las ecuaciones C.8 y C.9. La utilería se ejecuta tecleando

RAOULT

en el punto de petición de DOS. El programa lee automáticamente un conjunto de datos por default para gasolina y comienza la ejecución del programa.

La Figura G.1 muestra los mensajes de pantalla del conjunto de datos por default escritos por RAOULT. Los datos fueron tomados de *Baehr y Corapcioglu (1987)* y están contenidos en el archivo **RAOULT.DAT**. El archivo de datos puede editarse o se pueden cambiar los datos en forma interactiva contestando con 'S' a la pregunta "Cambia los datos de entrada?". Los procedimientos para cambiar los datos se dan más adelante.

```
*****
CALCULO DE LA PARTICION SEGUN LA LEY DE RAOULT
*****

SUST. QUIMICA          SOLUBILIDAD   CONC.        PESO          COEFICIENTE
                        (MG/L)       (G/CC)       MOLECULAR     DE ACTIVIDAD
=====
1 BENCENO              1750.0000    .0082        78.0000      1.0000
2 TOLUENO              535.0000    .0426        92.0000      1.0000
3 XYLENOS              167.0000    .0718        106.0000     1.0000
4 1-HEXANO             .0000        .0159        84.0000      1.0000
5 CYCLOHEXANO          .0000        .0021        84.0000      1.0000
6 N-HEXANO             .0000        .0204        86.0000      1.0000
7 OTROS_AROMATICOS     .0000        .0740        106.0000     1.0000
8 OTRAS_PARAFINAS      .0000        .3367        97.2000      1.0000
9 EXTREMOS_PESADOS     .0000        .1451        128.0000     1.0000

CAMBIA LOS DATOS DE ENTRADA ? (S o N)
```

Figura G.1: Pantalla principal de la utilería RAOULT.

Cuando no hay cambios en el conjunto de datos de entrada (conteste 'N' a la petición "Cambia los datos de entrada?" ver Figura G.2), RAOULT determina la densidad del hidrocarburo y su peso molecular promedio. Estas cantidades se usan para calcular el coeficiente de partición hidrocarburo/agua usando las ecuaciones C.8 y C.9. Los dos resultados son similares y se presentan como determinados en base a la composición y en base al peso molecular promedio, respectivamente. El usuario tiene la opción de calcular los coeficientes de partición para otros compuestos o salirse de la utilería.

```

CAMBIA LOS DATOS DE ENTRADA ? (S o N)
N

DENSIDAD DEL HIDROCARBURO =      .7168
PESO MOLECULAR PROMEDIO   =    104.0458

SELECCIONE EL COMPUESTO DE INTERES POR NUMERO
1

COEFICIENTE DE PARTICION HIDROCARBURO/AGUA CALCULADO:
EN BASE A LA COMPOSICION:
  311.6757
EN BASE AL PESO MOLECULAR PROMEDIO:
  307.0647

SALIR ? (S o N)
S

*** EJECUCION EXITOSA DE RAOULT

```

Figura G.2: Ejemplo de cálculo de RAOULT para el compuesto de benceno de la gasolina.

La composición por default del hidrocarburo puede cambiarse por edición directa del archivo de datos **RAOULT.DAT**. El conjunto de datos por default se muestra en la Figura G.3. El conjunto de datos es en su mayor parte de formato libre, con las excepciones que se anotan. La primera línea contiene el número de compuestos químicos que forman el hidrocarburo; en este caso nueve. RAOULT aceptará 200 compuestos químicos que forman la fase de hidrocarburo. El resto de las líneas contiene datos para cada compuesto químico. Primero se da el nom-

9

BENCENO	0.0082	1750.	78.	1.
TOLUENO	0.0426	535.	92.	1.
XYLENOS	0.0718	167.	106.	1.
1-HEXENO	0.0159	0.	84.	1.
CYCLOHEXANO	0.0021	0.	84.	1.
N-HEXANO	0.0204	0.	86.	1.
OTROS_AROMATICOS	0.0740	0.	106.	1.
OTRAS_PARAFINAS	0.3367	0.	97.2	1.
EXTREMOS_PESADOS	0.1451	0.	128.	1.

Figura G.3: Conjunto de datos por default de RAOULT.DAT.

bre del compuesto químico y debe quedar contenido dentro de los primeros 20 espacios de cada línea. El nombre puede contener cualquier combinación de letras, números, u otros caracteres del teclado; sin embargo, no debe contener ningún espacio en blanco. En el conjunto de datos por default, los espacios en blanco son reemplazados por subrayado (como en "OTRAS_AROMATICOS"). RAOULT termina el nombre del compuesto químico en la columna en donde se encuentre el primer número, de manera que no se requiere usar todos los 20 espacios destinados para el nombre del compuesto químico. Cada línea contiene los datos siguientes para el compuesto químico:

- concentración del compuesto químico en el NAPL en g/cm^3 ,
- solubilidad en agua del compuesto puro en mg/l ,
- peso molecular del compuesto químico (g/mol), y

coeficiente de actividad.

En este caso los coeficientes de actividad se toman igual a 1.0. Cada uno de los conceptos de datos deben quedar separados por lo menos por un espacio en blanco.

Los datos también pueden ser modificados en forma interactiva dentro de RAOULT al contestar 'S' a la pregunta "Cambia los datos de entrada?". La Figura G.4 muestra la secuela de preguntas para cambiar la solubilidad del benceno de 1750 mg/l a 1780 mg/l y los coeficientes de partición resultantes calculados.

CAMBIA LOS DATOS DE ENTRADA ? (S o N)

S

SELECCIONE EL CONCEPTO POR NUMERO

1

SELECCIONE EL CONCEPTO DE DATO POR CAMBIAR

1 NOMBRE

2 SOLUBILIDAD

3 CONCENTRACION

4 PESO MOLECULAR

5 COEFICIENTE DE ACTIVIDAD

2

INTRODUZCA LA NUEVA SOLUBILIDAD EN MG/L

1780.

QUIERE CAMBIAR OTRO CONCEPTO DE DATOS? (S o N)

N

COMPUESTO QUIMICO	SOLUBILIDAD (MG/L)	CONC. (G/CC)	PESO MOLECULAR	COEFICIENTE DE ACTIVIDAD
1 BENCENO	1780.0000	.0082	78.0000	1.0000
2 TOLUENO	535.0000	.0426	92.0000	1.0000
3 XYLENOS	167.0000	.0718	106.0000	1.0000
4 1-HEXENO	.0000	.0159	84.0000	1.0000
5 CYCLOHEXANO	.0000	.0021	84.0000	1.0000
6 N-HEXANO	.0000	.0204	86.0000	1.0000
7 OTROS_AROMATICOS	.0000	.0740	106.0000	1.0000
8 OTRAS_PARAFINAS	.0000	.3367	97.2000	1.0000
9 EXTREMOS_PESADOS	.0000	.1451	128.0000	1.0000

CAMBIA LOS DATOS DE ENTRADA ? (S o N)

N

DENSIDAD DEL HIDROCARBURO = .7168

PESO MOLECULAR PROMEDIO = 104.0458

SELECCIONE EL COMPUESTO DE INTERES POR NUMERO

1

COEFICIENTE DE PARTICION HIDROCARBURO/AGUA CALCULADO:

EN BASE A COMPOSICION:

306.4227

EN BASE AL PESO MOLECULAR PROMEDIO:

301.8895

SALIR ? (S o N)

S

*** EJECUCION EXITOSA DE RAOULT

Figura G.4: Modificación interactiva del conjunto de datos por default de RAOULT.

Apéndice H

Utilería NTHICK

Se proporciona un programa de utilería, NTHICK con el modelo HSSM para calcular la saturación promediada de LNAPL en la lente, $S_{o(max)}$, con base en la teoría presentada en el Apéndice C.3. NTHICK usa los valores del conjunto de datos de entrada del modelo HSSM-KO para desarrollar una relación entre los espesores dentro de los pozos de observación, espesores promediados del LNAPL en la formación y las saturaciones promediadas de LNAPL. NTHICK requiere de una serie de parámetros tomados del conjunto de datos de entrada del modelo HSSM-KO. Estos parámetros se enumeran en la Tabla H.1 y pueden escribirse en forma manual en el archivo de entrada de NTHICK (Figura H.1). Sin embargo, la entrada manual de datos no es necesaria porque el modelo HSSM-KO crea automáticamente un archivo con la extensión **.NTH** que contiene casi todos los parámetros de entrada de NTHICK. Sólo es necesario agregar la tensión interfacial LNAPL/agua, σ_{ow} , que no es usada por el modelo HSSM-KO o HSSM-T, al archivo **.NTH** producido por el modelo HSSM-KO. NTHICK solicita el valor de σ_{ow} si no se encuentra en el archivo **.NTH**, y reescribe el archivo incluyendo el valor de σ_{ow} como el quinto renglón del archivo ***.NTH**. El programa también escribe toda la salida en el archivo de datos de entrada (***.NTH**). Este proceso no interfiere con una corrida posterior de NTHICK con el conjunto de datos; sin embargo, al volver a correr el programa con el archivo de datos de entrada, se pierden los primeros resultados.

Renglón del archivo de *.NTH	Parámetros
Renglón 1	Porosidad, η
	Carga de entrada de aire, h_{ce} (m)
	λ de Brooks y Corey
	Saturación residual de agua, S_{wr}
Renglón 2	Saturación residual de LNAPL en la zona vadosa, S_{orv}
	Saturación residual de LNAPL del acuífero, S_{ors}
Renglón 3	Tensión superficial del agua, σ_{aw} (dina/cm)
	Tensión superficial del LNAPL, σ_{ao} (dina/cm)
Renglón 4	Densidad del agua, ρ_w (g/cm ³)
	Densidad del LNAPL, ρ_o (g/cm ³)
Renglón 5	Tensión interfacial LNAPL/agua, σ_{ow} (dina/cm)

Tabla H.1: Datos de entrada requeridos para NTHICK.

```
.4000  0.07  1.500  .10
.12500 .25
70.000 30.0000
1.0000 .7200
45.0000
```

Figura H.1: Archivo de datos de entrada de NTHICK.

El resultado del programa es una lista de espesores y saturaciones de LNAPL. La Figura H.2 muestra un conjunto típico de mensajes de salida de NTHICK. Los mensajes se escriben ambos en la pantalla y en el archivo de datos de entrada como se indicó arriba. Primero NTHICK repite el conjunto de los datos de entrada. Continúa

con la lista calculada de espesores en pozos de observación en metros, espesores promediados de la formación en metros y saturaciones de LNAPL en la lente. Los espesores de la lente varían obviamente con el radio y ningún valor de $S_{o(max)}$ es exactamente correcto para toda la lente.

El modelo HSSM requiere como entrada, sin embargo, un solo valor para la saturación de LNAPL en la lente. En la siguiente sección se da un procedimiento para determinar un valor de $S_{o(max)}$.

```
*****
ESTIMACION DE LA SATURACION DE NAPL EN OILENS
*****

POROSIDAD                .4000 (*)
CARGA DE ENTRADA DE AIRE .0700 (M)
LAMBDA DE BROOKS Y COREY 1.5000 (*)
SATURACION RESIDUAL DE AGUA .1000 (*)
SAT. RESIDUAL DE NAPL EN ZONA VADOSA .1250 (*)
SAT. RESIDUAL DE NAPL EN ACUIFERO .2500 (*)
TENSION SUPERFICIAL DEL AGUA 70.0000 (DINA/CM)
TENSION SUPERFICIAL DEL NAPL 30.0000 (DINA/CM)
DENSIDAD DEL AGUA        1.0000 (G/CC)
DENSIDAD DEL NAPL        .7200 (G/CC)
TENSION INTERFACIAL NAPL/AGUA 45.0000 (DINA/CM)
```

ESPESOR EN POZO DE OBSERVACION (M)	ESPESOR PROMEDIADO DE FORMACION (M)	SATURACION DE NAPL
.1190	.0005	.0112
.2690	.0382	.3553
.4190	.0877	.5230
.5690	.1404	.6167
.7190	.1945	.6764
.8690	.2495	.7177
1.0190	.3049	.7481
1.1690	.3607	.7714
1.3190	.4167	.7898
1.4690	.4729	.8047
1.6190	.5292	.8171
1.7690	.5856	.8276
1.9190	.6421	.8365

SALIR DEL PROGRAMA ? (S O N)

Figura H.2: Mensajes típicos de salida de NTHICK.

La petición "Salir del programa ?" al final de la Figura H.2 ya sea termina el programa al contestar "N" o continúa al contestar "S" con la estimación de la saturación de NAPL para un espesor específico de la formación de NAPL. La Figura H.3 muestra la serie de peticiones de NTHICK que ocurre cuando continúa la ejecución del programa. Se le pide al usuario introducir el espesor de NAPL en la formación en metros: aquí se usa 0.1410 m. Como se indica en el Apéndice H.1 más adelante, el espesor de la formación de NAPL se obtiene de la salida del modelo HSSM. NTHICK responde repitiendo en eco el espesor promedio de NAPL especificado (.1410) y

calculando la saturación de la lente de NAPL asociada (.3217).

SALIR DEL PROGRAMA ? (S O N)

N

INTRODUZCA EL ESPESOR PROMEDIO DE NAPL EN LA FORMACION (M)

.1410

ESPESOR PROMEDIO ESPECIFICADO DE NAPL EN LA FORMACION = .1410 (m)

SATURACION DE LA LENTE NAPL = .3217 (*)

Figura H.3: Estimación de la saturación del NAPL en NTHICK.

H.1 Procedimiento para el Empleo de NTHICK

Como se indicó arriba, la saturación de la lente LNAPL depende del espesor de la lente. Más adelante se da un procedimiento para usar NTHICK para determinar la saturación de la lente:

1. Desarrolle un conjunto de datos para HSSM-KO, incluyendo un valor de prueba de $S_{o(max)}$ y varios tiempos de perfilado.
2. Corra el modelo HSSM-KO.
3. Edite el archivo de salida *.HSS y determine el espesor máximo de la lente. El espesor máximo de la lente puede determinarse a partir de los perfiles de la lente. El espesor máximo de la lente se lee restando la profundidad máxima de la cima y de la base de la lente (columnas 4 y 5 del primer renglón de datos en la Figura H.4). La salida de esta tabla proviene del conjunto de datos **X2BT.DAT** descrito en el Inciso 5.2.

Si este espesor no es mayor que la diferencia entre las columnas 2 y 3, entonces la lente aún no ha alcanzado su extensión máxima y debe emplearse un tiempo de perfilado posterior. En este caso la extensión máxima de la lente a partir de las columnas 4 y 5 es $10.0943m - 9.9533m = 0.1410m$, que es mayor que la extensión actual de la lente a partir de las columnas 2 y 3 de $10.0440m - 9.9729m = 0.0711m$. En vista de que la extensión máxima de la lente es mayor que la extensión actual, puede usarse este perfil para determinar el espesor de la lente y se introduce el espesor de 0.1410 m en NTHICK.

4. Corra NTHICK con el espesor determinado en el paso 3. El espesor se introduce en forma interactiva en la segunda parte de los mensajes de pantalla de NTHICK (Figura H.4). NTHICK calcula la saturación asociada de la lente $S_{o(max)}$.
5. Promedie la entrada de $S_{o(max)}$ del paso 1 y del paso 4.
6. Vuelva a correr el modelo HSSM con el $S_{o(max)}$ determinado en el paso 5.
7. Repita hasta que los valores de $S_{o(max)}$ se encuentren dentro del rango de 0.01. Si este procedimiento no converge con unas cuantas pruebas, deberá utilizarse un procedimiento de bisección (Forsythe et al., 1977).

H.2 Ejemplo de Secuencia de Cálculo de NTHICK

La Tabla H.2 muestra una secuencia ejemplo de los resultados de NTHICK y HSSM-KO que se usan para definir el parámetro de entrada, $S_{o(max)}$. La columna (a) enumera los valores de prueba de $S_{o(max)}$ que fueron usados en el conjunto de datos **X2BT.DAT**. En el primer intento se fijó el valor arbitrariamente en 0.5000. La columna

(b) da el espesor máximo de la lente NAPL en metros, como fue determinado del archivo **X2BT.HSS** como se explicó arriba. Estos valores fueron usados en NTHICK para determinar el valor apropiado de $S_{o(max)}$ para la lente (columna c). En vista de que los valores en las columnas (a) y (c) no son comparables (0.5000 vs. 0.2253), no se usó el valor apropiado de entrada y se requiere otro intento. El segundo intento se inicia fijando $S_{o(max)}$ en un valor promedio de los valores anteriores en las columnas (a) y (c), que es $0.5 * (0.5000 + 0.2253) = 0.3627$. La secuencia de correr HSSM-KO, determinar el espesor máximo de la lente NAPL, y estimar el valor apropiado de $S_{o(max)}$ continúa hasta que los valores en las columnas (a) y (c) se comparan en forma bastante cercana. En este ejemplo fueron necesarias cuatro iteraciones para encontrar el valor correcto de alrededor de 0.32 para $S_{o(max)}$.

Intento	Saturación Inicial de NAPL $S_{o(max)}$ (a)	Espesor máximo de la Lente NAPL (b)	Saturación de NAPL de NTHICK (c)
1	0.5000	0.0803	0.2253
2	0.3627	0.1219	0.2948
3	0.3288	0.1393	0.3194
4	0.3240	0.1421	0.3231

Tabla H.2: Ejemplo de secuencia de resultados de NTHICK y HSSM-KO.

 * PERFIL RADIAL A TRAVES DE LA LENTE DE PETROLEO

TIEMPO = 200.0000
 RADIO DE LA LENTE = 10.6437
 PROF. NIVEL FREATICO = 10.0000

RADIO	LENTE ACTUAL DE NAPL		EXTENSION MAX. LENTE NAPL	
	PROF. CIMA LENTE	PROF. BASE LENTE	PROF. CIMA LENTE	PROF. BASE LENTE
=====	=====	=====	=====	=====
(1)	(2)	(3)	(4)	(5)
.0000	9.9729	10.0440	9.9533	10.0943
2.0000	9.9729	10.0440	9.9533	10.0943
2.4322	9.9739	10.0413	9.9579	10.0827
2.8644	9.9748	10.0390	9.9617	10.0727
3.2966	9.9757	10.0368	9.9650	10.0642
3.7287	9.9764	10.0348	9.9680	10.0567
4.1609	9.9772	10.0330	9.9704	10.0503
4.5931	9.9779	10.0312	9.9726	10.0446
5.0253	9.9785	10.0295	9.9746	10.0397
5.4575	9.9792	10.0278	9.9762	10.0354
5.8897	9.9798	10.0262	9.9777	10.0315
6.3218	9.9804	10.0246	9.9790	10.0282
6.7540	9.9811	10.0229	9.9802	10.0251
7.1862	9.9817	10.0213	9.9812	10.0226
7.6184	9.9823	10.0197	9.9821	10.0202
8.0506	9.9830	10.0180	9.9830	10.0181
8.4828	9.9837	10.0162	9.9837	10.0162
8.9149	9.9844	10.0143	9.9844	10.0143
9.3471	9.9852	10.0123	9.9852	10.0123
9.7793	9.9861	10.0099	9.9861	10.0099
10.2115	9.9873	10.0069	9.9873	10.0069
10.6437	9.9900	10.0000	9.9900	10.0000

FLUJO ACUMULADO DE ENTRADA A LA LENTE 1555.

BALANCES DE MASA GLOBALES DE KOPT Y OILENS
 MASA TOTAL DE NAPL AGREGADA EN FRONTERA (KG) 4091.
 MASA DE NAPL RECUPERADA POR BALANCE DE MASA (KG) 4059.
 PORCENTAJE DE ERROR - .7962

Figura H.4: Perfil de la lente del archivo de salida *.HSS.

Apéndice I

Utilería REBUILD

Ambos módulos computacionales de HSSM usan archivos temporales para escribir los archivos de salida y de gráficas. Solamente al final de una simulación exitosa se unen los archivos temporales en los archivos de salida y de gráficas denominados según especificación del usuario. Si se interrumpe una simulación por cualquier razón, no ocurrirá la unión de los archivos temporales. El usuario se quedará con añicos y pedazos de la salida de simulación esparcidos entre archivos temporales. La utilería REBUILD está diseñada para crear los archivos principales de salida (**name.HSS** y **name.TSG**) a partir de los archivos temporales. También intenta crear los archivos de gráficas. Sin embargo, es frecuente que los archivos de gráficas tienen renglones o conjuntos de datos incompletos y no pueden graficarse. REBUILD no intenta recrear el archivo de datos de entrada de HSSM-T bajo la suposición que una simulación interrumpida no puede tener una distribución apropiada del flujo de masa para correr HSSM-T. REBUILD se ejecuta tecleando simplemente

REBUILD

desde el punto de petición de DOS o seleccionando la opción del menú (3c) "Correr REBUILD" desde Windows. REBUILD usa los archivos temporales, si es que existen, para juntar los nombres correctos de archivo para "reconstruir". De ésta manera, REBUILD está totalmente automatizado.

Apéndice J

Instalación Doble para las Interfaces DOS y Windows

Ambas interfaces pueden instalarse en la misma máquina siguiendo estas instrucciones:

- Termine el proceso de instalación de DOS descrito en el Inciso A.7.
- Agregue el directorio HSSM a la trayectoria como se describe en el Inciso A.7.
- Termine el procedimiento de instalación de Windows descrito en los Incisos 4.3 y 4.3.3. El directorio de HSSM debería ser el mismo que el usado para la instalación DOS.

La instalación doble resulta en una copia de cada uno de **HSSM-KO.EXE**, **HSSM-T.EXE** y de los otros archivos que se copian al disco duro. Todos los componentes de las interfaces se encuentran en este directorio único. El modelo HSSM puede correrse entonces desde cualquier directorio DOS o desde Windows. Los archivos de entrada para DOS y Windows pueden usarse con cualquier interfaz. Sin embargo, Windows coloca la trayectoria completa del directorio para los nombres de los archivo de gráficas y salida en el archivo de entrada de HSSM (ver Tabla 4.8). Esta práctica puede conducir a confusión si se usan los archivos después con la interfaz DOS, ya que los archivos de salida y de gráficas pueden colocarse en un directorio diferente que el ocupado por el archivo de entrada. Esta confusión no se presenta al usar la interfaz de Windows, porque HSSM-WIN actualiza automáticamente los nombres de los archivos para que coincidan con el directorio del archivo actual de entrada.

Apéndice K

Edición Directa de los Archivos de Datos de HSSM-KO

A veces es conveniente editar los archivos de datos en forma directa, sin usar HSSM-WIN o PRE-HSSM. Las Figuras K.1, K.2, K.3, y K.4 muestran los conceptos que aparecen en cada renglón de un archivo de datos válido. Todos los datos se introducen sin formato; es decir, no se requiere un espaciado especial, aunque cada concepto debe quedar separado por lo menos por un espacio en blanco. Generalmente, se requiere una entrada para cada variable dada, aún para conceptos que no sean usados en una simulación particular; por lo tanto, se recomienda el uso de PRE-HSSM o HSSM-WIN para generar los archivos de entrada.

```
C * DATOS DE ENTRADA REQUERIDOS POR KOPT
C * LOS ARCHIVOS DE DATOS PUEDEN PREPARARSE O EDITARSE USANDO EL
C * PREPROCESADOR PREHSSM
C *
C *
C * NOTAS:
C * 1.  TODOS LOS NOMBRES DE VARIABLES ESTAN DE ACUERDO CON LAS
C *      CONVENCIONES DE NOMBRAMIENTO DE FORTRAN--LOS NOMBRES QUE EMPIEZAN
C *      CON I HASTA M SON ENTEROS, TODOS LOS DEMAS REALES.
C * 2.  TODAS LAS ENTRADAS SON DE FORMATO LIBRE
C * 3.  LOS CEROS DEBERAN LEERSE EN CAMPOS CORRESPONDIENTES A VALORES NO
C *      USADOS
C * 4.  LAS UNIDADES DE LOS DATOS DE ENTRADA SE ESPECIFICAN COMO SIGUE
C *      (*)      ADIMENSIONAL O NO APLICABLE
C *      (M)      METROS
C *      (D)      DIAS
C *      (C)      GRADOS C
C *      (CP)     CENTIPOISE  1.0 CP = 0.01 GR/CM/SEC
C *      (M/D)    METROS POR DIA
C *      (M2/D)   METROS AL CUADRADO POR DIA
C *      (MG/L)   MILIGRAMOS POR LITRO
C *      (L/KG)   LITROS POR KILOGRAMO DE SUELO
C *      (GR/CC)  GRAMOS POR CENTIMETRO CUBICO
C *
C *  RENGLO 1..BANDERA DE SALIDA DE IMPRESORA.....
C *  IFACE  BANDERA DE INTERFAZ (CARACTER * 1)
C *      'W' CONJUNTO DE DATOS DE ENTRADA PREPARADO POR INTERFAZ WINDOWS
C *      'D' CONJUNTO DE DATOS DE ENTRADA PREPARADO POR INTERFAZ MSDOS
C *      ' ' NO SE USO NINGUNA INTERFAZ
C *  IWR    FACTOR DE SALIDA DE ESCRITURA          (*)
C *      0  SUPRIMIR TODA LA SALIDA
C *      1  PRODUCIR SALIDA
```

Figura K.1: Estructura del archivo de entrada de HSSM-KO; parte 1.

```

C * IKOPT      BANDERA DEL MODELO KOPT
C *           0 LECTURA E IMPRESION EN ECO DE DATOS ENTRADA SOLAMENTE
C *           1 CORRER MODELO KOPT
C * ICONC     BANDERA DE COMPUESTO DISUELTO
C *           0 NINGUN COMPUESTO DISUELTO
C *           1 COMPUESTO DISUELTO
C * ILENS     BANDERA DEL MODELO OILENS
C *           0 NO CORRER OILENS
C *           1 CORRER OILENS
C * ITSGP     BANDERA DEL ARCHIVO TSGPLUME
C *           0 NO CREAR ARCHIVO DE ENTRADA DE TSGPLUME
C *           1 CREAR ARCHIVO TSGPLUME
C *
C *   RENGLONES 2-6. . .NOMBRES DE ARCHIVOS DE SALIDA Y DE GRAFICAS. . .
C *   OFILE (1)                ARCHIVO DE SALIDA KOPT/OILENS
C *   OFILE (2)                ARCHIVO DE GRAFICA 1 DE KOPT/OILENS
C *   OFILE (3)                ARCHIVO DE GRAFICA 2 DE KOPT/OILENS
C *   OFILE (4)                ARCHIVO DE GRAFICA 3 DE KOPT/OILENS
C *   OFILE (5)                ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA DE TSGPLOME
C *   OFILE (6)                ARCHIVO DE SALIDA DE TSGPLUME
C *   OFILE (7)                ARCHIVO DE GRAFICA DE TSGPLUME
C *
C *   RENGLONES 7-9.TITULO DE CORRIDA...(5A10/5A10/5A10).....
C *   NT(15)   TITULO DE CORRIDA 3 RENGLONES DE 50 CARACTERES CADA UNO (*)
C *
C *   RENGLON 10..PROPIEDADES DE LA MATRIZ.....
C *   WKS      CONDUCTIVIDAD HIDRAULICA VERTICAL SATURADA (AGUA)      (M/D)
C *   RKS      RELACION ENTRE CONDUCTIVIDAD HORIZONTAL Y VERTICAL    (*)
C *   KRF      INDICE DE SELECCION DEL MODELO DE PERMEABILIDAD RELATIVA (*)
C *           1 MODELO BURDINE--BROOKS & COREY
C *   XLAMB    INDICE DE DISTRIBUCION DEL TAMAÑO DE PORO              (*)
C *           PARA KRF = 1, INTRODUCZA LAMBDA
C *   ETA      POROSIDAD                                             (*)
C *   SWR      SATURACION RESIDUAL DE AGUA                          (*)
C *
C *   RENGLON 11..PROPIEDADES DEL AGUA.....
C *   WMU      VISCOSIDAD DINAMICA DEL AGUA                          (CP)
C *   WRHO     DENSIDAD DEL AGUA                                     (GR/CC)
C *   IRT      TIPO DE ENTRADA POR LLUVIA: 1=FLUJO ESPECIFICADO      (*)
C *           2=SATURACION ESPECIFICADA                             (*)
C *   QW/SWMAX FLUJO O SATURACION CONSTANTES DE AGUA                (M/D) 0 (*)
C *   XMKRW    PERM. MAX. RELATIVA DE AGUA DURANTE INFILTRACION    (*)
C *   WTABLE   PROFUNDIDAD AL NIVEL FREATICO                        (M)
C *

```

Figura K.2: Estructura del archivo de entrada de HSSM-KO; parte 2.

```

C * RENGLON 12..CARACTERISTICAS DEL PETROLEO.....
C * PMU          VISCOSIDAD DINAMICA DEL PETROLEO          (CP)
C * PRHO         DENSIDAD DEL PETROLEO                    (GR/CC)
C * SPR         SATURACION RESIDUAL DEL PETROLEO (ENTRAMPADO) (*)
C * IAT         TIPO DE ENTRADA DE PETROLEO 1=FLUJO ESPECIFICADO (*)
C *                                     2=VOLUMEN/AREA ESPECIFICADO
C *                                     3=PROF. CONST. ENCHARCAMIENTO
C *                                     4=VAR. DESPUES DE PERIODO CONST.
C *
C * RENGLON 13..APROXIMACION DE SUCCION CAPILAR.(PARAMETROS ADICIONALES)...
C * HWE         CARGA DE ENTRADA DE AIRE                  (M)
C * WSIG        TENSION SUPERFICIAL DEL AGUA              (DINA/CM)
C * OSIG        TENSION SUPERFICIAL DEL PETROLEO          (DINA/CM)
C *
C * RENGLON 14..(PARA IAT=1 Y IAT=3)...FLUJO DE PETROLEO.....
C * QP          FLUJO DE PETROLEO PARA CASOS DE IAT = 1    (M/D)
C * TPB         TIEMPO DE INICIO DEL EVENTO DE PETROLEO    (D)
C * TPE         TIEMPO DE TERMINACION DEL EVENTO DE PETROLEO (D)
C * HS         CARGA CONSTANTE PARA CASOS DE IAT=3        (M)
C *
C * RENGLON 15..(PARA IAT = 2)...VOLUMEN DE PETROLEO.....
C * PVOL        VOLUMEN/AREA DEL PETROLEO INCORPORADO AL SUELO (M)
C * DPL        PROF. INFERIOR DE LA ZONA CONTAMINADA INICIALMENTE (M)
C *
C * RENGLON 16..COMPUESTO DISUELTO.....
C * COINI       CONCENTRACION INICIAL EN PETROLEO (VER NOTA 5.) (MG/L)
C *
C * RENGLON 17..COMPUESTO DISUELTO.....
C * COEFICIENTES DE PARTICION:
C * XXXK        PETROLEO/AGUA          (CO = XXXK*CW)          (*)
C * XXXV        PETROLEO/AIRE          (CA = XXXV*CO)          (*)
C * XXXS        SOLIDO/AGUA (COMPUESTO) (L/KG)
C * XXXSH       SOLIDO/AGUA (HIDROCARBURO) (L/KG)
C * RHOS        DENSIDAD GLOBAL DE LA MATRIZ (GR/CC)
C *
C * RENGLON 18..PARAMETROS DEL SUB-MODELO OILENS (1).....
C * RADI        RADIO DE LA FUENTE (M)
C * RMF        FACTOR DE MULTIPLICACION DEL RADIO (*)
C * FRING       ALTURA DE LA FRANJA CAPILAR (M)
C * VDISP       DISPERSIVIDAD VERTICAL DEL ACUIFERO (M)
C * GRAD        GRADIENTE DEL AGUA SUBTERRANEA (*)
C * SPRB        SAT. DEL PETROLEO ENTRAMPADO BAJO EL NIVEL FREATICO (*)
C *

```

Figura K.3: Estructura del archivo de entrada de HSSM-KO; parte 3.

```

C * RENGLO 19.PARAMETROS DEL SUB-MODELO OILENS (2).....
C * SOLC SOLUBILIDAD DEL COMPUESTO EN AGUA (MG/L)
C * SOLH SOLUBILIDAD EN AGUA DEL HIDROCARBURO (PETROLEO) (MG/L)
C *
C * RENGLO 20.PARAMETROS DE SIMULACION .....
C * TM TIEMPO DE TERMINACION DE SIMULACION (VER KSTOP) (D)
C * DM INTERVALO MAX. DE TIEMPO DE SOLUCION (D)
C * DTPR TIEMPO MINIMO ENTRE INTERVALOS DE TIEMPO IMPRESOS Y (D)
C * COMPROBACIONES DE BALANCE DE MASA
C * KSTOP CRITERIOS DE TERMINACION (*)
C * 1 TIEMPO DE TERMINACION ESPECIFICADO POR USUARIO (TM)
C * 2 SE DETIENE EL MOVIMIENTO DE LA LENTE
C * 3 FLUJO DE MASA DEL COMPUESTO AL ACUIFERO MENOR QUE EL MAXIMO
C * 4 MASA DEL COMPUESTO EN LENTE DE PETROLEO MENOR QUE
C * OPERC*FLUJO MAX. ACUMULADO HACIA LA LENTE
C * (1 ES DEFAULT PARA NINGUNA SIMULACION DE OILENS O CUANDO EL
C * PETROLEO NO LLEGA AL NIVEL FREATICO ANTES DEL TIEMPO = TM)
C * OPERC FACTOR USADO CON KSTOP = 4 (0.0 < OPERC <1.0) (*)
C *
C * RENGLO 21.PERFILES.....
C * NTIMES NUMERO DE PERFILES (HASTA 10) (*)
C *
C * RENGLO 22.....
C * PR(NTIMES) TIEMPOS DE PERFILADO (D)
C * OMITIR RENGLO 22 SI NTIMES = 0
C *
C * RENGLO 23.PARAMETROS DE ENTRADA DE TSGPLUME.....
C * DLONG DISPERSIVIDAD LONGITUDINAL DEL ACUIFERO (M)
C * DTRAN DISPERSIVIDAD TRANSVERSAL DEL ACUIFERO (M)
C * PMAX PORCENTAJE DEL RADIO MAXIMO DEL COMPUESTO (*)
C * CMINW CONCENTRACION MIMINA DE INTERES EN POZO RECEPTOR (MG/L)
C * NWEEL NUMERO DE POZOS RECEPTORES (HASTA 8) (*)
C *
C * RENGLO 24.PARAMETROS DE ENTRADA DE TSGPLUME 2.....
C * BEGT TIEMPO DE INICIO (D)
C * ENDT TIEMPO DE TERMINACION (D)
C * TINC INCREMENTO DE TIEMPO (D)
C * TAQU ESPESOR ACUIFERO (M)
C *
C * RENGLO 25.....
C * XWELL(I) COORDENADA-X DEL POZO RECEPTOR (M)
C * YWELL(I) COORDENADA-Y DEL POZO RECEPTOR (M)
C *

```

Figura K.4: Estructura del archivo de entrada de HSSM-KO; parte 4.

Apéndice L

Edición Directa de los Archivos de Datos de HSSM-T

Los parámetros requeridos para HSSM-T se enumeran en la Figura L.1. Igual que con HSSM-KO, todos los datos de entrada son de formato libre. Se recomienda crear archivos nuevos de entrada de HSSM-T corriendo HSSM-KO.

```
C * DATOS DE ENTRADA DE TSGPLUME
C *
C * RENGLON 1
C * IFILE ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA KOPT/OILENS (A40)
C * RENGLON 2
C * OFILE ARCHIVO DE DATOS DE SALIDA KOPT/OILENS (A40)
C * RENGLON 3
C * TFILE ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA DE TSGPLUME (A40)
C * RENGLON 4
C * KKSTOP CRITERIOS DE PARADA DE KOPT/OILENS (A40)
C * RENGLON 5
C * AL DISPERSIVIDAD LONGITUDINAL (M)
C * AT DISPERSIVIDAD TRANSVERSAL (M)
C * AV DISPERSIVIDAD VERTICAL (M)
C * VEL VELOCIDAD DE FILTRACION (M/D)
C * POR POROSIDAD (*)
C * TAQU ESPESOR ACUIFERO (M)
C * RENGLON 6
C * R FACTOR DE RETARDO (*)
C * PMAX PORCENTAJE DEL RADIO MAX. DE CONTAMINANTE (*)
C * CMIN CONCENTRACION MINIMA DE SALIDA (MG/L)
C * ZLAM COEFICIENTE DE DECAIMIENTO DEL ACUIFERO (1/D)
C * RENGLON 7
C * BTIME TIEMPO DE INICIO (D)
C * ETIME TIEMPO DE TERMINACION (D)
C * TINTE INCREMENTO DE TIEMPO (D)
C * RENGLON 8
C * NWELL NUMERO DE POZOS RECEPTORES (*)
C * RENGLON 9 A 9 + NWELL-1
C * XX COORDENADA X DEL POZO (M)
C * XY COORDENADA Y DEL POZO (M)
C * RENGLON 9 + NWELL HASTA EL FINAL
C * TI TIEMPO (*)
C * RC RADIO DEL CONTAMINANTE (M)
C * HF FLUJO DE HIDROCARBURO (KG/D)
C * CF FLUJO DE CONTAMINANTE (KG/D)
```

Figura L.1: Estructura del archivo de datos de entrada de HSSM-T.

Apéndice M

Plantillas de Entrada de Datos de PRE-HSSM

Las tablas siguientes están de ser usadas como plantillas para los datos de entrada de la versión MS-DOS del modelo HSSM. Cada pantalla de datos de entrada está representada por medio de una plantilla en PRE-HSSM. Estas páginas están destinadas como ayuda para la preparación de conjuntos de datos de entrada.

Interruptores de Control de Simulación		
Variable	Descripción	Valor
IFACE	Bandera de Interfaz	D
IWR	Bandera de impresión	
IKOPT	Bandera de KOPT	
ICONC	Bandera de Concentración	
ILENS	Bandera de OILENS	
ITSGP	Bandera de TSGPLUME	

Nombres de Archivos de Salida		
Archivo	Descripción	Nombre del Tronco
*.HSS	Archivo de Salida formateado de HSSM-KO	
*.PL1	Archivo de Gráfica 1 de HSSM-KO	
*.PL2	Archivo de Gráfica 2 de HSSM-KO	
*.PL3	Archivo de Gráfica 3 de HSSM-KO	
*.PMI	Archivo de Datos de Entrada de HSSM-T	
*.TSG	Archivo de Salida de HSSM-T formateado	
*.PMP	Archivos de Gráficas de HSSM-T	

Título de Corrida

Propiedades de la Matriz		
Variable	Descripción	Valor
WKS	Conductividad Hidráulica Saturada (m/d)	
RKS	Relación de Conductividad Horizontal a Vertical	
KRF	Índice de Selección de Permeabilidad Relativa	
XLAMB	Si KRF = 1 Lambda de Brooks y Corey Si KRF = 2 n de van Genuchten	
ETA	Porosidad	
SWR	Saturación Residual de Agua	

Propiedades Hidráulicas		
Variable	Descripción	Valor
WMU	Viscosidad Dinámica del Agua (cp)	
WRHO	Densidad del Agua (g/cm ³)	
IRT	Tipo de Entrada por Recarga	
QW/SWMAX	Si IRT = 1 Flujo de Agua (m/d) Si IRT = 2 Saturación de Agua	
XMKRW	Permeabilidad Máx. Relativa Durante Infiltración	
WTABLE	Profundidad al Nivel Freático (m)	

Propiedades de la Fase NAPL		
Variable	Descripción	Valor
PMU	Viscosidad Dinámica del NAPL (cp)	
PHRO	Densidad del NAPL (g/cm ³)	
SPR	Saturación del NAPL entrampado en Zona vadosa (*)	
IAT	Tipo de Aplicación del NAPL 1=flujo especificado 2=volúmen/área especificado 3=encharcamiento de carga constante 4= encharcamiento variable después de período de carga constante	

Parámetros de Aproximación de Succión Capilar		
Variable	Descripción	Valor
HWE	Si KRF = 1 Carga de entrada de Aire de Brooks y Corey (m) Si KRF = 2 α de van Genuchten (1/m)	
WSIG	Tensión Superficial del Agua (dina/cm)	
OSIG	Tensión Superficial del NAPL (dina/cm)	

Condición de Frontera del Flujo de NAPL (IAT = 1)		
Variable	Descripción	Valor
QP	Flujo de NAPL (m/d)	
TPB	Tiempo de Inicio del Evento de NAPL (d)	
TPE	Tiempo de Terminación del Evento de NAPL (d)	

Condición de Frontera de Volúmen/Area del NAPL (IAT = 2)		
Variable	Descripción	Valor
PVOL	Volúmen/Area del NAPL (m)	
DPL	Profundidad inferior de la Zona de NAPL (m)	

Encharcamiento de NAPL de Carga Constante o Variable (IAT = 3,4)		
Variable	Descripción	Valor
TPB	Tiempo de Inicio del Evento de NAPL (d)	
TPE	Tiempo de Terminación del Evento de NAPL (d)	
HS	Carga Constante(m)	

Concentración del Compuesto Disuelto		
Variable	Descripción	Valor
COINI	Concentración Inicial en el NAPL (mg/l)	

Coefficientes de Partición de Equilibrio Lineal		
Variable	Descripción	Valor
XXKO	NAPL/Agua	
XXKS	Compuesto Químico Sólido/Agua (l/Kg)	
XXKSH	Sólido/Agua del NAPL (l/Kg)	
RHOS	Densidad Global (g/cm ³)	

PARAMETROS DEL MODELO OILENS: 1		
Variable	Descripción	Valor
RADI	Radio de la Fuente (m)	
RMF	Factor de Multiplicación del Radio (*)	
FRING	Parámetro de Esparcido de la Lente (m)	
VDISP	Dispersividad Vertical del Acuífero (m)	
VEL	Velocidad [Darcy] del Agua Subterránea (m/d)	
SPRB	Saturación del NAPL entrampado en Acuífero (*)	

PARAMETROS DEL MODELO OILENS: 2		
Variable	Descripción	Valor
XMSOL	Saturación Máxima del NAPL en la Lente	
SOLC	Solubilidad en Agua del Compuesto (mg/l)	
SOLH	Solubilidad en Agua del Hidrocarburo (NAPL) (mg/l)	

Parámetros de Simulación		
Variable	Descripción	Valor
TM	Tiempo de Terminación de la Simulación (d)	
DM	Intervalo Máximo de Tiempo de Solución (d)	
DTPR	Tiempo Mínimo entre Intervalos de Tiempo Impresos (d)	
KSTOP	Criterio de Terminación	
OPERC	Fracción de Masa (KSTOP = 4)	

Perfiles		
Variable	Descripción	Valor
NTIMES	Número de Tiempos de Perfilado	

Tiempos de Perfilado		
Variable	Descripción	Valor
PR(1)	Tiempo de Perfilado (d)	
PR(2)	Tiempo de Perfilado (d)	
PR(3)	Tiempo de Perfilado (d)	
PR(4)	Tiempo de Perfilado (d)	
PR(5)	Tiempo de Perfilado (d)	
PR(6)	Tiempo de Perfilado (d)	
PR(7)	Tiempo de Perfilado (d)	
PR(8)	Tiempo de Perfilado (d)	
PR(9)	Tiempo de Perfilado (d)	
PR(10)	Tiempo de Perfilado (d)	

Datos de TSGPLUME		
Variable	Descripción	Valor
DLONG	Dispersividad Longitudinal del Acuífero (m)	
DTRANS	Dispersividad Transversal del Acuífero (m)	
PMAX	Porcentaje Máximo del Radio de Contaminante	
CMINW	Concentración Mínima de Salida (mg/l)	
ZLAM	Coefficiente de Decaimiento del Acuífero (1/d)	
NWELL	Número de Puntos Receptores	

Tiempos de Simulación de TSGPLUME		
Variable	Descripción	Valor
BEGT	Tiempo de Inicio (d)	
ENDT	Tiempo de Terminación (d)	
TINC	Incremento de Tiempo (d)	
TAQU	Espesor Acuífero (m)	

Localización de los Pozos Receptores			
Variable	Descripción	Valor X	Valor Y
X(1), Y(1)	Coordenadas X y Y del Receptor 1		
X(2), Y(2)	Coordenadas X y Y del Receptor 2		
X(3), Y(3)	Coordenadas X y Y del Receptor 3		
X(4), Y(4)	Coordenadas X y Y del Receptor 4		
X(5), Y(5)	Coordenadas X y Y del Receptor 5		
X(6), Y(6)	Coordenadas X y Y del Receptor 6		

Apéndice N

Plantillas de Datos de Entrada de HSSM-WIN

Las figuras siguientes deben usarse como plantillas para los datos de entrada para la interfaz MS-Windows (HSSM-WIN). Cada cuadro de diálogo de entrada en HSSM-WIN es representado por una plantilla. Estas páginas se destinan como ayuda para la preparación de los conjuntos de datos de entrada.

Parámetros Generales del Modelo

Títulos de la Corrida

ACEPTAR
CANCELAR

Interruptores de Impresión

Crear archivos de salida
 Eco de impresión de datos únicamente
 Correr modelos

Interruptores de Módulos

Correr KOPT
 Correr DILENS
 Escribir archivo de entrada HSSM-T

Nombres de Archivos

NOTA: Estos nombres de archivos se usarán si el archivo de datos se guarda bajo un nombre nuevo con la opción "Guardar Como"

Archivo de entrada HSSM-KO
 Archivo de Salidat HSSM-KO
 Archivo de gráfica 1 de HSSM-KO
 Archivo de gráfica 2 de HSSM-KO
 Archivo de gráfica 3 de HSSM-KO
 Archivo de entrada de HSSM-T
 Archivo de salida de HSSM-T
 Archivo de gráfica de HSSM-T

Parámetros Hidráulicos

PROPIEDADES HIDRAULICAS

Viscosidad dinámica del agua (cp)
 Densidad del agua (g/cm³)
 Tensión superf. agua (dina/cm)
 Valor máx. de k_{rw} durante inf.

Recarga

Velocidad media de recarga (m/d) valor:
 Saturación

Modelo de la curva de presión Capilar

Brooks y Corey
 van Genuchten

Lambda de Brooks y Corey
 Carga de entrada de aire (m)
 Saturación residual de agua
 Alpha de van Genuchten (1/m)
 n de van Genuchten

Archivo de Datos:

Activar comprobación de rango

ACEPTAR
Cancelar

PROPIEDADES DEL MEDIO POROSO

Conductividad hidr. vert. sat. (m/d)
 Razón de cond. hidr. horiz/vert
 Porosidad
 Densidad global (g/cm³)
 Espesor saturado del acuífero (m)
 Profundidad al nivel freático (m)
 Parámetro de espesor capilar (m)
 Gradiente agua subt. (m/m)
 Dispersividad longitudinal (m)
 Dispersividad transversal (m)
 Dispersividad vertical (m)

Parámetros de la Fase de Hidrocarburos	
PROPIEDADES DE LA FASE DE HIDROCARBUROS	Archivo: <input type="button" value="ACEPTAR"/> <input type="button" value="CANCELAR"/>
Densidad del NAPL (g/cm ³)	<input type="text"/>
Viscosidad din. NAPL (cp)	<input type="text"/>
Solubilidad del Hidrocarburo (mg/l)	<input type="text"/>
Sat. res. NAPL en Acuífero	<input type="text"/>
Sat. res. NAPL en Zona vadosa . .	<input type="text"/>
Coef. part. suelo/agua (l/kg)	<input type="text"/>
Tens. superf. NAPL (dina/cm)	<input type="text"/>
PROPIEDADS DE COMPUESTOS DISUELTOS	
<input checked="" type="checkbox"/> Existe Compuesto Disuelto	
Conc. inic. comp. en NAPL (mg/l).	<input type="text"/>
Coef. partición NAPL/agua	<input type="text"/>
Coef. partición suelo/agua (l/kg) .	<input type="text"/>
Solubilidad compuesto (mg/l)	<input type="text"/>
<input type="checkbox"/> Vida med. Compuesto en acuíf.	<input type="text"/>
<input checked="" type="checkbox"/> Activar comprobación de rango	<input type="button" value="CANCELAR"/>
DERRAME DE HIDROCARBUROS	
<input checked="" type="radio"/> Flujo especificado	
<input type="radio"/> Volúmen/Area especificado	
<input type="radio"/> Encharcamiento de carga const.	
<input type="radio"/> Encharc. var. desp. carga const.	
Flujo de NAPL (m/d)	<input type="text"/>
Tiempo de inicio (d)	<input type="text"/>
Tiempo de terminación (d)	<input type="text"/>
Profundidad encharcamiento (m)	<input type="text"/>
Volúmen/Area del NAPL (m)	<input type="text"/>
Prof. inf. zona NAPL (m)	<input type="text"/>

Parámetros de Simulación	
PARAMETROS DE CONTROL DE SIMULACION	Archivo: <input type="button" value="ACEPTAR"/> <input type="button" value="CANCELAR"/>
Radio fuente de la lente NAPL (m).	<input type="text"/>
Factor de multiplicación del radio. .	<input type="text"/>
Sat. máx. NAPL en lente NAPL. . . .	<input type="text"/>
Tiempo term. simulación (d)	<input type="text"/>
Interv. máx. tiempo solución (d) . .	<input type="text"/>
Tiempo mínimo entre intervalos de tiempo impresos (d)	<input type="text"/>
Criterio de terminación de Simulación OILENS	
<input checked="" type="radio"/> Tiempo especificado por usuario	
<input type="radio"/> Esparcido de la lente NAPL se para	
<input type="radio"/> Flujo máx. masa contaminante al acuífero	
<input type="radio"/> Contaminante lixiviado de la lente	
Fracción de masa remanente.	<input type="text"/>
<input checked="" type="checkbox"/> Activar comprobación de rango	<input type="button" value="CANCELAR"/>
PERFILES DE LA LENTE	
Introduzca tiempo (d) para cada uno de hasta 10 perfiles	1 <input type="text"/>
	2 <input type="text"/>
	3 <input type="text"/>
	4 <input type="text"/>
	5 <input type="text"/>
	6 <input type="text"/>
	7 <input type="text"/>
	8 <input type="text"/>
	9 <input type="text"/>
	10 <input type="text"/>
Número de perfiles <input type="text"/>	
PARAMETROS DEL MODELO HSSM-T	
Porc. máx. radio contam. (%)	<input type="text"/>
Concentración min. de salida (mg/l) .	<input type="text"/>
Tiempo de inicio (d)	<input type="text"/>
Tiempo de terminación (d)	<input type="text"/>
Incremento de tiempo (d)	<input type="text"/>
LOCALIZACION POZOS RECEPTORES	
Introduzca coordenadas para cada uno de hasta de 6 pozos	X (m) Y (m)
	1 <input type="text"/> <input type="text"/>
	2 <input type="text"/> <input type="text"/>
	3 <input type="text"/> <input type="text"/>
	4 <input type="text"/> <input type="text"/>
	5 <input type="text"/> <input type="text"/>
	6 <input type="text"/> <input type="text"/>
Número de pozos <input type="text"/>	