

***ANÁLISIS DE TRANSPORTE REACTIVO MULTICOMPONENTE BAJO  
CONDICIONES DE CINÉTICA QUÍMICA EN COLUMNAS  
UNIDIMENSIONALES DE MEDIO POROSO SATURADO***

***VIKTER MARGARITA ORTIZ MACHUCA***



***Universidad Industrial de Santander  
Facultad de Ingenierías Físico Mecánicas  
Escuela de Ingeniería Civil  
Bucaramanga  
2008***



***ANÁLISIS DE TRANSPORTE REACTIVO MULTICOMPONENTE BAJO  
CONDICIONES DE CINÉTICA QUÍMICA EN COLUMNAS  
UNIDIMENSIONALES DE MEDIO POROSO SATURADO***

***VIKTER MARGARITA ORTIZ MACHUCA***

***Pasantía de Investigación como requisito para optar al título de  
Ingeniero Civil***

***Director:  
LEONARDO DAVID DONADO GARZÓN  
Profesor auxiliar***

***Universidad Industrial de Santander  
Facultad de Ingenierías Físico Mecánicas  
Escuela de Ingeniería Civil  
Bucaramanga  
2008***



## **AGRADECIMIENTOS**

La autora agradece el apoyo del Proyecto METRE-1 Modelación y Escalado de Transporte Reactivo – Etapa 1 asociado al grupo de investigación GPH, a la Universidad Industrial de Santander y su programa de movilidad de investigadores para asistencia de estudiantes. También agradece la asesoría del director del proyecto Leonardo David Donado Garzón y al investigador David Barajas Solano.

***Tabla de contenido***

	Pág.
Introducción	8
1. Transporte multicomponente	12
2. Ejemplo de aplicación	14
3. Aproximación numérica	17
4. Análisis de resultados	20
5. Conclusiones	24
Referencias	25
Anexos	27

**TITULO\***: ANÁLISIS DE TRANSPORTE REACTIVO MULTICOMPONENTE BAJO CONDICIONES DE CINÉTICA QUÍMICA EN COLUMNAS UNIDIMENSIONALES DE MEDIO POROSO SATURADO

**AUTOR\*\***: VIKTER MARGARITA ORTIZ MACHUCA

**Palabras claves**: Mezcla de aguas, reacciones cinéticas, transporte reactivo multicomponente, hidrogeología.

**Descripción**: Los acuíferos son hidrosistemas naturales de gran complejidad, razón por la cual la calidad de su agua se ve influenciada por la gran variedad de procesos presentes en ellos en la medida en que el agua se mueve a través de los materiales térreos con los cuales interacciona. Este tipo de transporte responde a dos fenómenos: la hidrodinámica del sistema y las posibles reacciones (bio) químicas que se presenten en el medio. Cuando se tiene gran variedad de especies químicas interactuando bajo estos procesos, se define el transporte reactivo como multicomponente. Si las reacciones presentes en los procesos de flujo son lentas en comparación con el tiempo de transporte, se dice que son regidas por una ley de cinética química. La tasa de reacción que describe este fenómeno se puede modelar mediante una ecuación diferencial parcial no lineal y no homogénea que no tiene solución exacta debido a la complejidad de sus términos. Esta investigación presenta una aproximación numérica de dicha ecuación mediante el método de diferencias finitas, utilizando diferencias finitas hacia adelante y de tendencia central, concluyendo que cuando los tiempos de reacción son mayores que los tiempos característicos de transporte, las reacciones químicas son mucho más representativas en el cambio de la concentración de las especies.

---

\* Pasantía de investigación

\*\* Facultad de ingenierías físico mecánicas, Escuela de ingeniería Civil, Director: Leonardo David Donado Garzón

**TITLE\***: ANALYSIS OF MULTICOMPONENT REACTIVE TRANSPORT UNDER CONDITIONS OF CHEMICAL KINETICS IN ONE-DIMENSIONAL COLUMNS OF SATURATED POROUS MEDIUM.

**AUTHOR\*\***: VIKTER MARGARITA ORTIZ MACHUCA\*\*

**KEYS WORDS**: Mixed Waters, kinetics reactions, multicomponent reactive transport, hydrogeology.

**Abstract**: The aquifers are highly complex natural hydrosystems. It implies that the quality of their water is influenced by the wide variety of processes that occur on them. Reactive transport responds to two phenomena: the hydrodynamics of the system and the possible (bio) chemical reactions that occur in the porous media. When there is a wide variety of chemical species under these processes, the reactive transport is defined as multicomponent. If the reactions in the media are slow, they are governed by the chemical kinetics of the reaction.

The coupling of two main processes: hydrodynamics of the system and chemical reactions among aqueous species, defines the behavior of the solutes in the porous media. The reaction rate that describes the source/sink term due to chemical interaction among aqueous species can be modeled by the solution of a non-linear non-homogeneous partial differential equation. The latter does not have an exact solution because of the complexity of its terms. This research provides a numerical approximation of that equation by the finite differences method.

This work is concluding that if reactive time is greater than the characteristic time of transport (typically diffusive), chemical reactions are much more representative in changing of the concentration of the species. The analysis reaction rate is studied for reactive transport in a column of saturated porous medium.

---

\* Research Internship

\*\* School of Physical Mechanical Engineering – Department of Civil Engineering. Adviser: Leonardo David Donado Garzón

## Introducción

El agua presente en los medios naturales reacciona químicamente produciendo soluciones acuosas de distintas calidades, dichas soluciones varían dependiendo de la composición del agua en la medida en que ésta es afectada por la concentración de sustancias producidas por procesos naturales y actividades humanas.

La variación de la calidad del agua no puede catalogarse de una manera negativa sin hacer referencia al uso para el cual el agua sea destinada, ya que algunas de sus reacciones originan alteraciones negativas y otras pueden llegar a ser útiles en su consumo y aprovechamiento.

En medios porosos como los acuíferos es muy importante conocer cómo evoluciona la calidad del agua en la medida en que el agua se mueve a través de los materiales téreos con los cuales interacciona. Los acuíferos en su fase natural presentan una gran variación tanto de sus propiedades físicas como químicas. Las primeras son fundamentales para determinar la hidrodinámica del agua [Domenico y Schwartz 1990] y las segundas proporcionan cambios importantes en la calidad. En conclusión, el transporte de solutos en acuíferos está definido por una ecuación de balance de masas (ecuación de transporte) y por la ley de acción de masas de las reacciones químicas entre las especies involucradas [e.g., Saaltink, et al, 1998].

Las reacciones químicas pueden ser clasificadas de acuerdo a su cinética como lentas o rápidas, analizando su tasa de reacción. En las reacciones rápidas (en equilibrio) la tasa de reacción es instantánea y es una función dependiente del tiempo y el espacio [De Simoni et al., 2005]. En las reacciones lentas (cinéticas) esa tasa de reacción adicionalmente es función de otras variables como: - las concentraciones de las especies acuosas, -las componentes (que son combinaciones lineales de las concentraciones de las especies), -las propiedades físicas como la temperatura y la salinidad; - las constantes de equilibrio envueltas en el problema.

Cuando la constante de equilibrio no varía en el espacio o el tiempo, la velocidad de reacción es proporcional a la tasa de mezcla,  $\nabla^T \mathbf{u} \mathbf{D} \nabla \mathbf{u}$ , donde  $\mathbf{u}$  es el vector de las concentraciones de componentes conservadores y  $\mathbf{D}$  es el tensor de dispersión [De Simoni et al., 2005].

La tasa de reacción se aprecia como un término fuente/sumidero en las ecuaciones de balance de masa y su estudio es importante porque proporciona información fundamental acerca del transporte y control dinámico de la reacción global [Domenico y Schwartz 1990].

En sistemas de transporte reactivo en los que se tienen condiciones de no equilibrio, al analizar su tasa de reacción se observa un comportamiento no lineal, donde los fenómenos de advección, difusión y dispersión hidrodinámica deben ser tenidos en cuenta debido a su alta influencia en la reacción. Los fenómenos de advección y difusión están relacionados según el número adimensional de Péclet, para el cual valores pequeños indica que el tiempo dispersivo es más significativo debido a que la disolución o la precipitación son muy uniformes y estos dos procesos pueden ser reversibles uno con el otro; mientras que para valores mayores de Péclet toma más importancia el tiempo advectivo, aumenta la conductividad hidráulica y no es comparable con reacciones lentas [Kang et al., 2003] la relación de estos fenómenos con el número Péclet se observa en la figura 1. El número de Péclet es presentado en la figura 1 y relaciona los dos tiempos característicos de transporte.

$$Pe = \frac{\tau_d}{\tau_a} = \frac{ql}{D} \quad (1)$$

Es por esto que la ecuación que describe la tasa de reacción en un sistema multicomponente reactivo, presenta términos complejos los cuales deben ser solucionados utilizando métodos numéricos [Sánchez-Vila et al., 2007; Freedman et al., 2003].

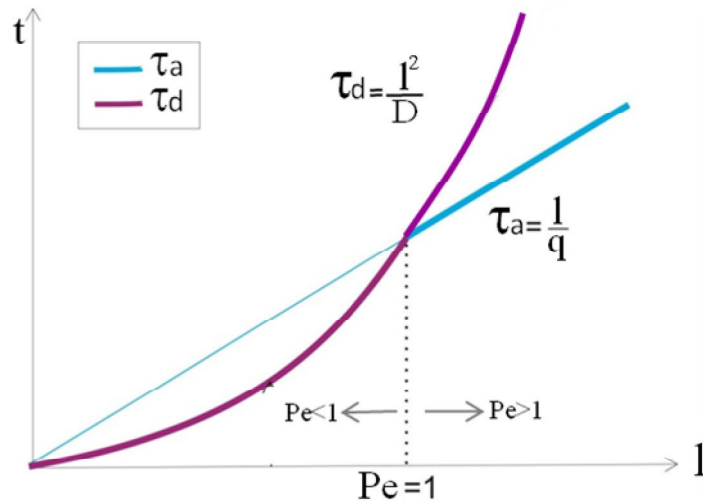


Figura 1. Comportamiento del tiempo característico de transporte

Para condiciones locales de no equilibrio las concentraciones de las especies no pueden ser separadas de la tasa de reacción, lo cual complica el problema matemático, y así no es posible derivar una expresión explícita para evaluar la tasa de reacción. *Sanchez-Vila et al. [2007]* presentan una aproximación numérica mediante expansiones a la ecuación diferencial parcial no lineal para el cálculo de la tasa de reacción, en el cual la escala de tiempo de reacción química  $\tau_r$  y de transporte hidrodinámico  $\tau_D$  están relacionadas por el número adimensional Damköhler [e.g., *Knapp, 1989*]:

$$Da = \frac{\tau_D}{\tau_r} = Pe \frac{\tau_a}{\tau_r} \quad (2)$$

El tiempo de transporte hidrodinámico está expresado por el tiempo difusivo  $\tau_D$  ya que las reacciones cinéticas son muy lentas y para poder relacionarlas con el tiempo de transporte deben asumirse sistemas más lentos hidrodinámicamente hablando como se aprecia en la figura 1.

A partir de lo planteado por *Sánchez-Vila et al. (2007)* esta investigación presenta una aproximación numérica para la tasa de reacción de un sistema multi-componente reactivo, utilizando el método de diferencias finitas hacia delante para las variables que involucran el tiempo y diferencias finitas de tendencia central para el espacio, es decir, se planteó un esquema implícito.

Se adimensionalizaron todos los términos de la ecuación para trabajar con números finitos de Damköhler y se usó como ejemplo de aplicación una columna unidimensional de material poroso con inyección continua, esta adimensionalización se muestra en la tabla 1.

En la primera sección de esta investigación se describirá el transporte reactivo a partir de lo cual se obtuvieron los términos que forman la ecuaciones planteadas en este estudio y que describe el comportamiento de la tasa de reacción en un sistema de transporte multi-componente reactivo.

La segunda sección describe el método numérico utilizado en la solución del problema, adaptando el método de diferencias finitas hacia adelante para términos que consideren el tiempo, y diferencias finitas de tendencia central para términos que consideren la posición, a partir de condiciones iniciales y de contorno. Las condiciones de inyección fueron definidas por una función de entrada de paso constante en una columna de material homogéneo en un estado de equilibrio en sus fases acuosas.

Por último se analizarán los resultados obtenidos a partir de la aproximación numérica, comparándolos con lo presentados por investigaciones que han tratado de modelar y describir la tasa de reacción como De Simoni et al. (2005) y *Sánchez-Vila et al. (2007)*.

## 1. Transporte Multicomponente

En el transporte de solutos se pueden estudiar dos distintos casos (Fig. 2), el transporte de solutos conservativo y el transporte de solutos reactivo. En el transporte conservativo las concentraciones de solutos son constantes y solo se observan fenómenos físicos que ocasionan el movimiento de solutos en el medio. En consecuencia, los parámetros relativos al flujo y la dispersión hidrodinámica como la conductividad hidráulica  $K$ , la velocidad de flujo y la dispersividad  $\alpha$ , que son los únicos importantes. Para el transporte reactivo las condiciones físicas son las mismas e igual de importantes, pero en este caso si ocurren procesos de degradación y bioquímicos, que implican mayor complejidad en su modelación. En el transporte multicomponente reactivo pueden ocurrir tres distintos casos de estudio, (a) cuando solo ocurren reacciones en equilibrio y la tasa de reacción está solo en función del tiempo y el espacio [De Simoni et al., 2005], (b) cuando las reacciones presentes son cinéticas, es decir su tasa de reacción además de estar en función del tiempo y del espacio depende de las concentraciones de las especies, de la naturaleza de las sustancias, entre otras variables [Sanchez-Vila et al., 2007], (c) y cuando se presentan reacciones cinéticas y en equilibrio simultáneamente [Donado et al., en preparación], este caso es el que ocurre con mayor frecuencia ya que es el que se acerca más a la realidad y que hasta ahora está siendo objeto de estudio.

Para desarrollar la ecuación de transporte, se debe partir de la ecuación de conservación de masa, la cual representa la variación de la tasa de flujo que entra contra la tasa de flujo que sale, siendo esto equivalente al cambio de la concentración en el tiempo. En general esta ecuación se cumple para cualquier dominio. [Domenico and Schwartz 1990]

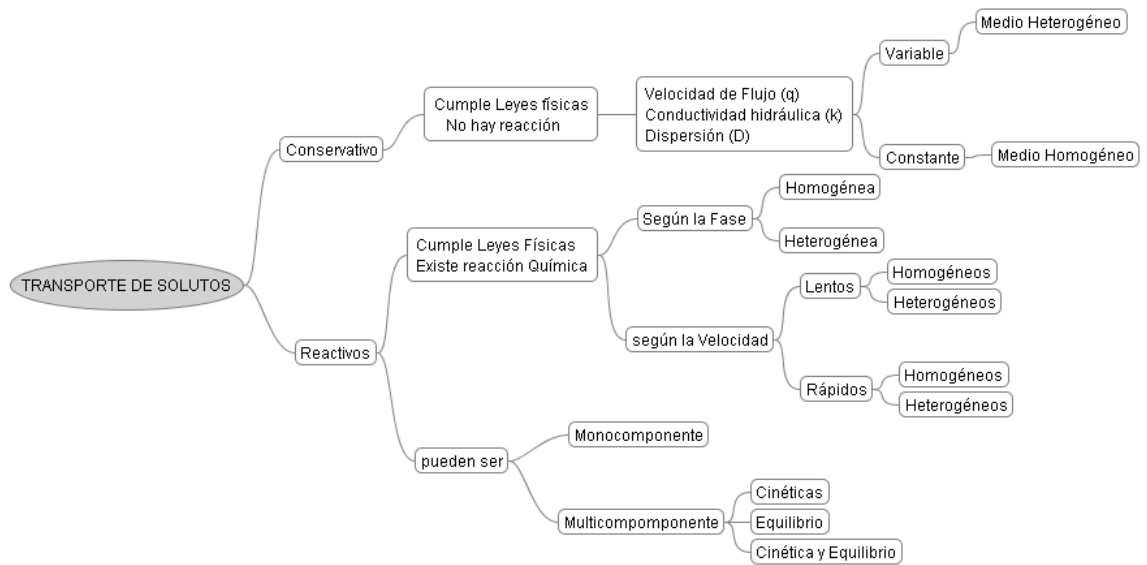


Figura 2. Mapa Mental sobre el transporte reactivo

## 2. Ejemplo de aplicación

En esta sección se presenta una aplicación simple de las ventajas de la solución analítica determinada por *Sanchez-Vila et al. (2007)*. Se presenta el caso de una reacción cinética entre dos especies acuosas formando un mineral como el caso de la magnesita ( $MgCO_3$ ):



Las ecuaciones de transporte de cada una de las especies acuosas  $c_1 = c_{Mg^{+2}}$  y  $c_2 = c_{CO^{-2}}$  se relacionan mediante un término fuente/sumidero que hace referencia a la disolución o precipitación de magnesita:

$$\phi \frac{\partial c_i}{\partial t} + \mathbf{q} \cdot \nabla c_i - \nabla \mathbf{D} \nabla c_i = -r \quad (i=1, 2) \quad (4)$$

Donde  $\phi$  es la porosidad,  $\mathbf{q}$  es el vector de velocidad de Darcy,  $\mathbf{D}$  es el tensor de dispersión hidrodinámica y  $r$  la reacción entre las dos especies. Este sistema por sí sólo es indeterminado por lo que al realizar combinaciones lineales de estas ecuaciones se presenta la componente  $u = c_1 - c_2$ , la cual cumple con la solución de un soluto conservativo, dependiendo de las condiciones iniciales y de frontera impuestas al sistema, y es computado por la solución de:

$$\phi \frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{q} \cdot \nabla u - \nabla \mathbf{D} \nabla c_i = 0 \quad (5)$$

La tasa de reacción cinética es una función del producto de actividad iónica (IAP) que determina la ley de acción de masas, y se puede calcular mediante [Steeffel and Vancappellen, 1990]:

$$r = -Sk_0(1 - \Omega) = \frac{\sqrt{K}}{\tau_r}(1 - \Omega) \quad (6)$$

Donde el tiempo de reacción está definido como  $\tau_r = \frac{\sqrt{K}}{k_0 S}$  y el IAP por  $\Omega = c_1 c_2 / K$ , El término  $k_0$  es la tasa cinética de reacción de formación del mineral,  $S$  la superficie específica del mineral, y  $K$  es la constante de equilibrio del mineral.

Para un mejor análisis matemático, los términos del sistema se adimensionalizan. Las escalas de tiempo de advección y dispersión se relacionan utilizando el numero Péclet.

Para adimensionalizar los términos se planteó que:

**Tabla 1.** Adimensionalización de parámetros y variables

$u' = u / \sqrt{K}$	$r' = \frac{\tau_d}{\sqrt{K}} r$
$c' = c / \sqrt{K}$	$Pe = \frac{\tau_d}{\tau_a}$
$t' = \frac{t}{\tau_D}$	$x' = \frac{x}{l}$

Donde las apóstrofes identifican las variables adimensionales y  $l$  es la longitud característica del sistema, es decir la longitud de la columna.

Ahora usando el número de Damköhler definido en la Ecuación (2) se obtiene que:

$$r' = -Da(1 - c_1' c_2'). \quad (7)$$

Para obtener las expresiones explícitas para las concentraciones y poder plantear una ecuación que represente la tasa de reacción, se operan las ecuaciones (6) en (4) logrando como resultado la siguiente ecuación:

$$c'_{1/2} = \pm \frac{u'}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{u'^2 + 4\left(1 + \frac{r'}{Da}\right)} \quad (8)$$

Así pues el sistema a solucionar es una combinación entre (7) y (8):

$$\phi \frac{\partial c'_2}{\partial t'} = -Pe \frac{\partial c'_2}{\partial x'} + \frac{\partial^2 c'_2}{\partial x'^2} - r' \quad (9)$$

### 3. Aproximación numérica

Para el desarrollo de las ecuaciones se utilizó el método de diferencias finitas, este método consiste en un proceso de discretización, donde el conjunto infinito de números que representan la función incógnita en el continuo es reemplazado por un número finito de parámetros incógnita, el método parte de la expansión de Taylor, teorema que es muy útil para predecir el valor de una función en un punto en términos del valor de la función y sus derivadas en otro punto. [Chapra y Canale, 1999]

Estas aproximaciones se pueden obtener usando diferencias hacia delante, hacia atrás y de tendencia central, esto depende del paso, que es la longitud del intervalo sobre el cual se hace la aproximación, se llama hacia delante cuando se usan los datos  $i$  e  $i+1$  para estimar las derivadas, este es el caso de los términos que involucran el tiempo para la ecuación en estudio. En las diferencias finitas de tendencia central se usan los datos  $i-1$  e  $i+1$  para determinar las derivadas, en este caso se usa este método para términos que involucran la posición.

En la aproximación numérica todos los términos que se usaron son adimensionales, por lo cual en adelante se le omitirán las apóstrofes.

Los términos son reducidos y dejados en función de  $(u, c_2)$  aquí se emplea el método de diferencias finitas con respecto a la variable  $u$ , al desarrollar la ecuación en función de  $(u, c_2)$  simplifica el problema, se partió de la expresión general

$$\phi \frac{\partial c_2}{\partial t} = -Pe \frac{\partial c_2}{\partial x} + \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} - r \quad (10)$$

Donde:

$$r_k = -Da \cdot \left(1 - (uc_2 + c_2^2)\right) \quad (11)$$

La componente es cálculo de la solución de:

$$\phi \frac{\partial u}{\partial t} = -Pe \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - r \quad (12)$$

Se supone que el agua que sale no reacciona más, por lo tanto no hay cambio de concentración. En el anexo B. se presenta una gráfica que muestra en forma clara el modelo.

A partir del esquema numérico (anexo A.) se resuelve la ecuación 12 y se analizan los resultados tomando valores de Damköhler para percibir las variaciones que presenta la reacción con respecto a los tiempos de transporte y reacción.

**4.1 Condiciones de contorno:** Para la solución de esta ecuación se tomó como ejemplo una columna finita homogénea de magnesita la cual se saturó con agua que inicialmente estaba en equilibrio químico con el mineral.

Esta reacción se presenta en aproximadamente 54 días [Azaroual et al. 2003], en la cual se consideró el pH de la reacción mayor a 10,3 y las concentraciones iniciales fueron  $c_{Mg^{2+}}^0 \equiv c_1^0 = 0.537$  y  $c_{CO_3^{2-}}^0 \equiv c_2^0 = 1.858$ . Se agregó agua con concentraciones distintas a las mencionadas, que estando en equilibrio con el mineral fue inyectada en  $x=0$ , las concentraciones del agua agregada fueron  $c_{Mg^{2+}}^{ext} = 2.148$  y  $c_{CO_3^{2-}}^{ext} = 0.465$ .

La representación iconográfica del proceso se presenta en las figuras (3) y (4), que muestran cómo varía la tasa de reacción en una columna inicialmente saturada, en la que se inyecta constantemente una solución desequilibrante que a través del tiempo y las distintas posiciones de la columna va variando la tasa de reacción.

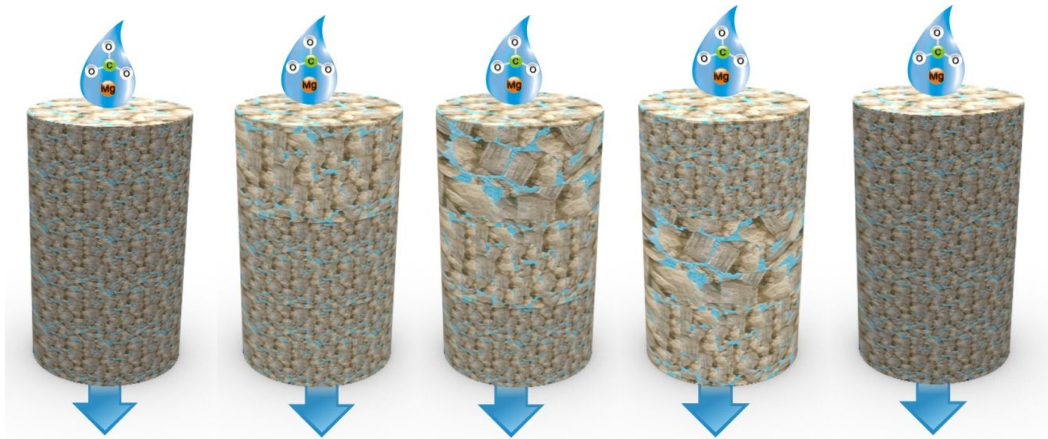


Figura 3. Representación de la variación de la tasa de reacción en el tiempo

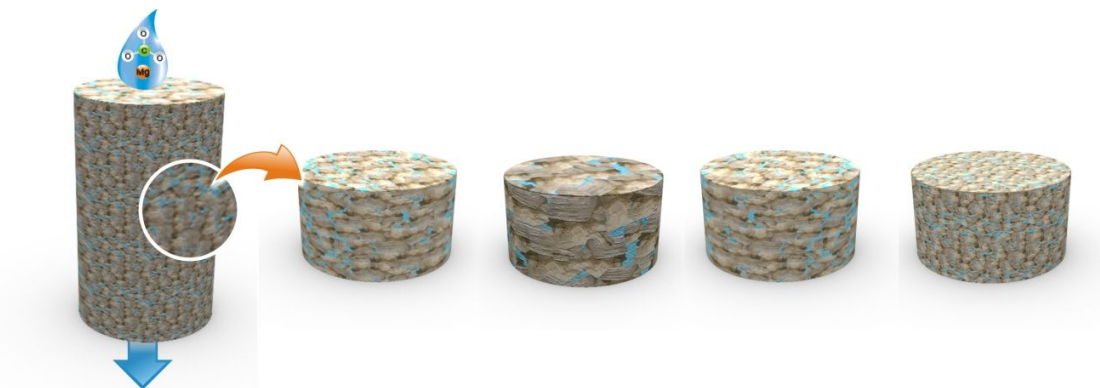


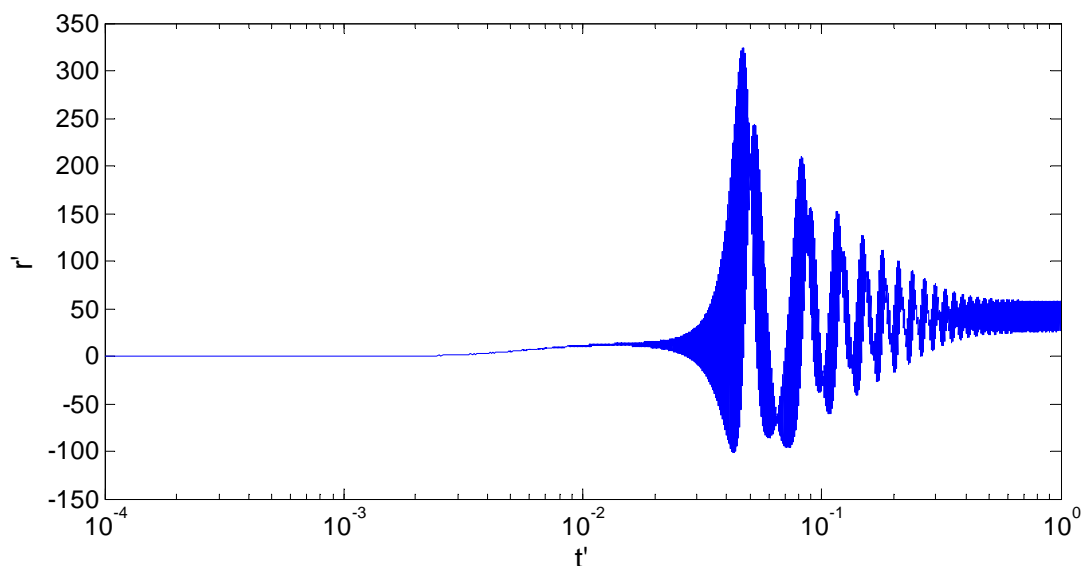
Figura 4. Representación de la variación de la tasa de reacción en una posición

#### 4. Análisis de resultados

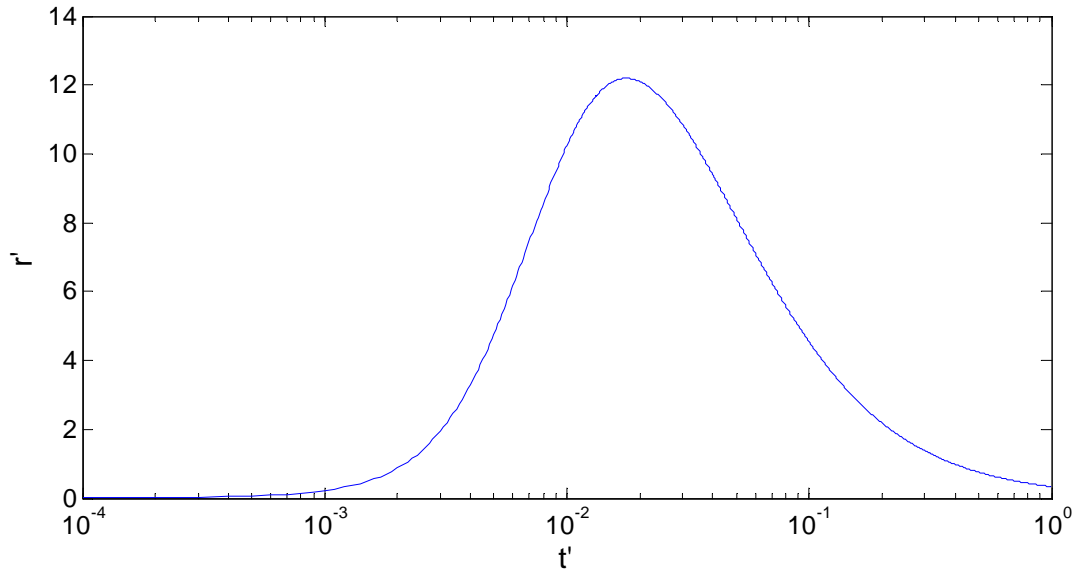
Para hacer un análisis significativo, se hicieron pruebas y análisis comparando los resultados arrojados por esta investigación usando esquemas implícito y explícito con los resultados publicados anteriormente por *Sánchez-Vila et al. (2007)* utilizando una columna finita de material granular, resultados que se modelan y presentan mediante las gráficas de tasa de reacción contra el tiempo de reacción.

Para el análisis de resultados se usó el esquema implícito puesto que el esquema explícito mostraba inestabilidad numérica generando dudas en los resultados, las figuras 5 y 6 muestran un ejemplo claro de inestabilidad numérica, ambas figuras fueron generadas a partir de los mismos datos de entrada, con  $Da = 100$  en el intervalo de tiempo  $[0,1]$  y todas las posiciones del intervalo  $[0,5]$  se graficó para la posición  $x = 0.2$  para los dos casos y un  $dx = 0.01$ .

La figura 5 muestra tanto inestabilidades locales como globales, para el análisis de resultados se trabajó con la solución implícita.



**Figura 5.** Solución explícita para  $Da = 100$ ,  $x = 0.2$ ,  $t \in [0,1]$ ,  $x \in [0,5]$ .



**Figura 6.** Solución implícita para  $Da = 100$ ,  $x = 0.2$ ,  $t \in [0,1]$ ,  $x \in [0,5]$ .

En las figuras de tasa de reacción contra el tiempo se observa que la tendencia de todas las trayectorias es la misma, al utilizar una columna finita la reacción en su etapa inicial está en equilibrio, toma entonces un valor de cero en todos los casos. Nótese también que en tiempo final todas vuelven al equilibrio tomando también el valor de cero. La proporcionalidad que existe entre los valores de Damköhler y la tasa de reacción, conlleva a una de las conclusiones más destacadas; para valores de Damköhler grandes, el tiempo de reacción tiende a cero, es decir que la reacción cinética puede aproximarse a una reacción en equilibrio, corroborando lo planteado por *Sánchez-Vila et al. (2007)*, por el contrario si el valor de Damköhler es cercano a cero, el tiempo de reacción es muy grande, es válido aproximarlo como una reacción cinética. El instante donde ocurre el máximo valor de tasa de reacción varía de acuerdo a la posición donde se evalúa la columna.

En la figura 7 se muestra la curva de tasa de reacción contra el tiempo para un  $Da=1000$  y la solución planteada por *De Simoni et al. (2005)* para una reacción en equilibrio, corroborando que para números de Damköhler grandes se tienen reacciones en equilibrio. En esta gráfica los parámetros usados en las dos curvas fueron los mismos,

para tiempos en el intervalo  $[0,1]$  y la misma posición  $x = 0.2$  de la columna de intervalo  $[0,5]$ , con  $dx = 0.01$  y  $dt = 0.0001$

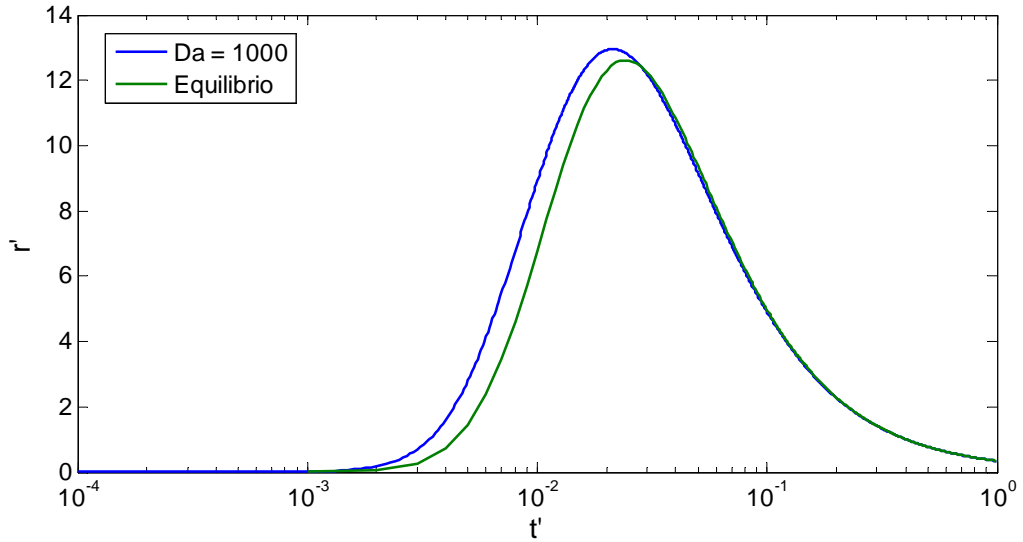


Figura 7. Comparación con la solución de *De Simoni et al 2005*.

En la figura 8 se presenta la variación de la curva de tasa de reacción contra tiempo para distintos valores de Damköhler todas en un intervalo de tiempo de  $[0,10]$  y la posición  $x = 0.2$  de una columna de  $[0,5]$  con  $dx = 0.01$  y  $dt = 0.001$

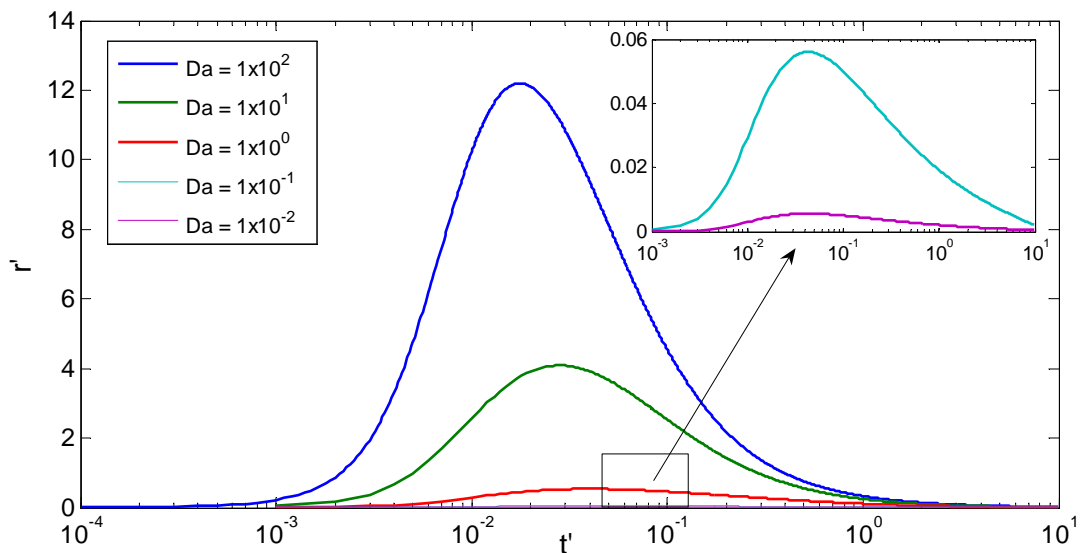
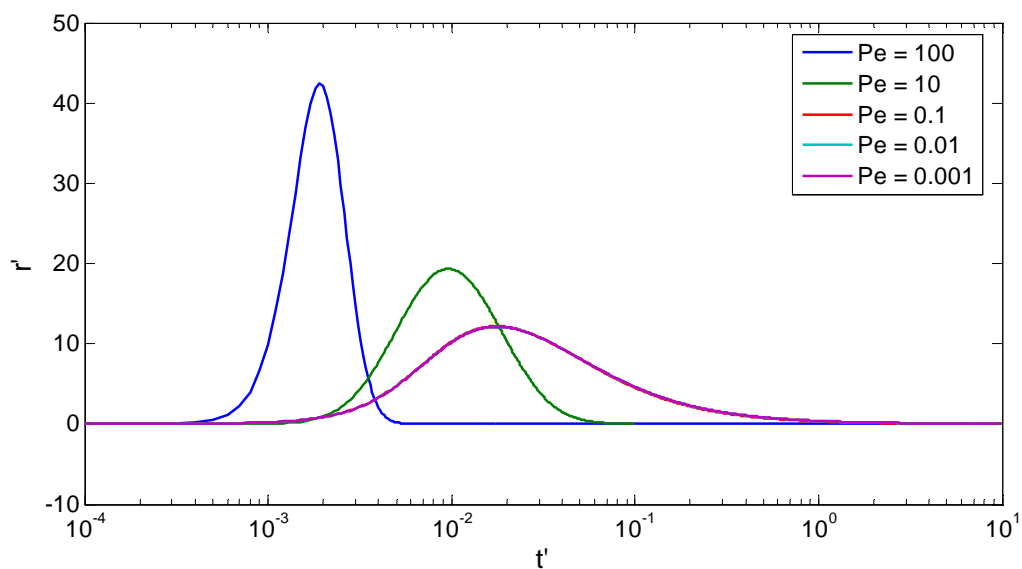


Figura 8. Variación de la tasa de reacción en el tiempo para distintos valores de  $Da$ .

En la figura 9. se presenta la variación del número Péclet, con un valor de  $Da = 100$  y se muestra claramente como en valores por debajo de la unidad  $Pe = 0.1, Pe = 0.01$  y  $Pe = 0.001$  no existe variación en la tasa de reacción, siendo indiferente para la solución tomar este tipo de valores, mientras que para valores grandes de Péclet la reacción tiende a convertirse en una reacción en equilibrio como la planteada por *De Simoni et al (2005)*. En esta gráfica se asumió una columna con intervalo de tiempo de  $[0,10]$  y la posición  $x = 0.2$ , de una columna de  $[0,5]$ , con  $dx = 0.01$  y  $dt = 0.001$ .



**Figura 9.** Variación de Péclet para  $Da = 100$ .

Los resultados obtenidos fueron socializados a la comunidad científica en el X Seminario Internacional de Medio Ambiente y Desarrollo Sostenible realizado en Bucaramanga el 26, 27 y 28 de Septiembre de 2007 y en el 50° Congreso ACODAL y 12° Bolivariano de AIDIS.

## **5. Conclusiones**

Esta investigación presentó una aproximación numérica de la tasa de reacción en sistemas multicomponentes reactivos para cinética química en medios porosos saturados, que muestra un excelente comportamiento en la solución de la ecuación que modela este fenómeno, ajustándose mejor a la realidad en comparación con la solución semi-analítica presentada por Sánchez-Vila et al. (2007) ya que presenta menos incertidumbre.

Si se realizara un modelamiento físico en escala de laboratorio de la tasa de reacción, se esperaría que el análisis de la prueba se ajuste correctamente.

También es importante mencionar que esta investigación sirve como benchmark de modelos más complejos, ya que se presenta una solución simple que sirve para la calibración de los mismos.

Se corroboró que para tiempos dispersivos grandes en comparación con tiempos de reacción, es decir valores de Damköhler pequeños, la tasa de reacción es comparable con reacciones cinéticas, mientras que para tiempos de reacción más rápidos en comparación con el tiempo de transporte hidrodinámico, las reacciones son analizadas como instantáneas.

El valor de número adimensional Péclet en el análisis de la tasa de reacción para reacciones cinéticas debe ser tomado menor que la unidad, de modo que el tiempo característico de transporte hidrodinámico sea el tiempo de difusión y pueda ser comparada la tasa de reacción con reacciones cinéticas.

## Referencias

- Azaoual, M.; C. Kervvan; M.V. Durance; S. Brochot and P. Durst, (2003). SCALE2000 User's manual, BRGM Orleans, pp 57.
- Chapra, S.C. and R.P. Canale (1999) Métodos numéricos para ingenieros, tercera edición, Mc Graw-Hill. pag: 84-109
- De Simoni, M., J. Carrera, X. Sanchez-Vila, and A. Guadagnini (2005), A procedure for the solution of multicomponent reactive transport problems, Water Resour. Res., 41, W11410, doi:10.1029/2005WR004056.
- Domenico, P. A. y Schwartz F. W. (1990) Physical and chemical hydrogeology. Jhon Wiley and sons, Inc.
- Donado, L.D., A. Guadagnini, X. Sanchez-Vila y J. Carrera [En preparación] Solution for multicomponent reactive transport under equilibrium and kinetic reactions.
- Freedman VL, K.P. Saripalli, y P.D. Meyer (2003). Influence of mineral precipitation and dissolution on hydrologic properties of porous media in static and dynamic systems. Source: Applied Geochemistry. Vol. 18
- Kang Q.J., X.D. Zhang y S.Y. Chen (2003) Simulation of dissolution and precipitation in porous media, Journal of Geophysical research-solid earth. Geochemistry & Geophysics. IDS: 740HU, DOI: 10.1029/2003JB002504
- Knapp, R. B. (1989), Spatial and temporal scales of local equilibrium in dynamic fluid-rock systems, Geochim. Cosmochim. Acta, 53, 1955–1964.
- Saaltink MW, C. Ayora, J. Carrera (1998). A mathematical formulation for reactive transport that eliminates mineral concentrations. IDS: ZW923, ISSN: 0043-1397.

Sanchez-Vila, X., M. Dentz, y L. D. Donado (2007), Transport-controlled reaction rates under local non-equilibrium conditions, *Geophys. Res. Lett.*, 34, L10404, doi:10.1029/2007GL029410.

Steefel, C. I., y A. C. Lasaga (1994), A coupled model for transport of multiple chemical species and kinetic precipitation/dissolution reactions with application to reactive flow in single phase hydrothermal systems, *Am. J. Sci.*, 294, 529– 592.

Steefel, C.I., y K.T.B. MacQuarrie (1996). Approaches to modeling of reactive transport in porous media, Ch. 2. In: Lichtner, P.C., Steefel, C.I., Oelkers, E.H. (Eds.), *Reactive Transport in Porous Media*, Reviews in Mineralogy, vol. 34. Mineralogical Society of America, Washington, DC.

Steefel, C.I., P. Vancappellen (1990) A new kinetic approach to modeling water-rock interaction – The role of nucleation, precursors and ostwald ripening. IDS Number: EF789, ISSN: 0016-7037

## Anexos

- a. Esquema numérico para la solución de la ecuación (12)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\Delta t} [u_j^{i+1} - u_j^i] \quad (13)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{2\Delta x} [u_{j+1}^i - u_{j-1}^i] \quad (14)$$

- b. Esquema del modelo numérico utilizado.

