

Modelado del transporte de solutos en suelos de
granulometría fina bajo condiciones de descarga
continua y discontinua de arsénico

M. en C. Ismael Vásquez Nogal

2023



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Ingeniería



Modelado del transporte de solutos en suelos de granulometría
fina bajo condiciones de descarga continua y discontinua de
arsénico

Tesis

Que como parte de los requisitos
para obtener el Grado de
Doctor en Ingeniería

Presenta:

M. en C. Ismael Vásquez Nogal

Dirigido por:

Dr. Eduardo Rojas González

Co-Director:

Dr. Christian Eduardo Hernández Mendoza



Dirección General de Bibliotecas y Servicios Digitales
de Información



Modelado del transporte de solutos en suelos de
granulometría fina bajo condiciones de descarga
continua y discontinua de arsénico

por

Ismael Vásquez Nogal

se distribuye bajo una [Licencia Creative Commons
Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

Clave RI: IGDC-241555



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Ingeniería
Doctorado en Ingeniería

Modelado del transporte de solutos en suelos de granulometría fina bajo condiciones de descarga continua y discontinua de arsénico

Opción de titulación
Tesis

Que como parte de los requisitos para obtener el grado de
Doctor en Ingeniería

Presenta:
M. en C. Ismael Vásquez Nogal

Dirigido por:
Dr. Eduardo Rojas González

Co-dirigido por:
Dr. Christian Eduardo Hernández Mendoza

Dr. Eduardo Rojas González
Presidente

Firma

Dr. Christian Eduardo Hernández Mendoza
Secretario

Firma

Dr. Jaime Moisés Horta Rangél
Vocal

Firma

Dr. Víctor Pérez Moreno
Suplente

Firma

Dr. Omar Chávez Alegría
Suplente

Firma

Dra. María de la Luz Pérez Rea
Directora de la Facultad

Dra. Manuel Toledano Ayala
Secretario de Investigación y Posgrado

Centro Universitario
Querétaro, Qro.
22 de marzo de 2024

AGRADECIMIENTOS

Le agradezco muy profundamente a mis tutores, al Dr. Christian E. Hernández-Mendoza y al Dr. Eduardo Rojas González por su dedicación y paciencia, que sin sus palabras precisas no hubiera podido lograr llegar a donde estoy, por sus guías y consejos, que sin duda los llevaré grabados en mi memoria en mi vida profesional.

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca otorgada para la realización de los estudios de doctorado. Me gustaría agradecer a la Universidad Autónoma de Querétaro por nuevamente abrirme las puertas y brindarme la oportunidad de seguir avanzando en mi carrera profesional, por la disposición de todos los maestros para ayudarme, siendo fundamentales para finalizar esta tesis. Agradezco a la facultad de Ingeniería y a las instalaciones del Laboratorio de Geotecnia Ambiental y del Laboratorio de Mecánica de Suelos de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Autónoma de Querétaro, en los cuales se realizó esta investigación en el marco de los proyectos CONACYT 266106, CONACYT 270161y FIN-2020-03.

Gracias a mi padre por su apoyo incondicional, por enseñarme a no rendirme y a mi madre por alentarme a seguir mis sueños. La fé de mis padres ha sido el pilar de este logro, el cual guió mi camino en este viaje académico y que a través de su amor y sacrificio me enseñaron que la mejor vida es la que está repleta de buenas acciones.

Agradezco a mis compañeros Jesús y Alex qué estuvieron conmigo en los momentos de estrés y alegría en este camino. A mis amigos Ileri, Fernando, Adriana, Dani y Paco por el apoyo, confianza y soporte que me brindaron convirtiéndose en parte de mi familia por elección y mi punto de apoyo. A mis alumnos y ahora amigos que han estado ahí para apoyarme y darme los consejos que necesitaba.

RESUMEN

Los suelos son un ambiente donde el agua, el aire y las rocas interactúan, que tienen la capacidad de retener sustancias o fijarlas por adsorción protegiendo a los cuerpos de agua. Los suelos contienen sustancias orgánicas e inorgánicas que pueden convertirse en contaminantes cuando sus concentraciones exceden los límites establecidos en la normativa ambiental aplicable. Dentro de los contaminantes presentes en el suelo encontramos al arsénico, un metaloide considerado tóxico y causante de desórdenes crónicos en el ser humano debido a su ingesta accidental. Debido a lo anterior, para entender el comportamiento del contaminante en el suelo se han utilizado diversos modelos numéricos principalmente en la zona saturada del suelo, aunado a lo anterior, la contaminación del suelo genera modificaciones en el comportamiento del suelo que generalmente no son consideradas en el análisis. A la fecha, no hay un modelo que de manera integral determine el transporte de contaminantes en la zona no saturada, por lo cual, esta investigación realiza el análisis de transporte mediante una analogía térmica considerando los cambios en la curva de retención y la función de conductividad hidráulica una vez que el suelo se ha contaminado. Los resultados demuestran cambios en la clasificación del suelo, un aumento en el contenido de partículas gruesas, un intenso aumento en el ángulo de fricción interna y un aumento en la permeabilidad. Se realizó una calibración del papel filtro Whatman no. 42 para la obtención de las curvas de retención, las cuales denotan los cambios sufridos en el suelo, siendo el resultado más llamativo la fuerte disminución en el potencial mátrico y el fuerte aumento en el potencial osmótico que generalmente no es considerado en la mecánica de suelos no saturados. Finalmente, la evaluación del modelo demostró un aumento de la zona afectada por fuentes puntuales y condiciones de secado-humedecimiento respecto al suelo natural, denotando la necesidad de utilizar las curvas de retención de suelos contaminados en ambas trayectorias, siendo el resultado más llamativo es la forma ovalada de afectación en los perfiles de succión, debido a los cambios en el comportamiento hidromecánico del suelo en la zona no saturada.

Palabras clave: suelo no saturado, suelo contaminado, arsénico, transporte de contaminante, modelo

ABSTRACT

Soils are an environment where water, air, and rocks interact, which can retain substances or fix them by adsorption, protecting bodies of water. Soils contain organic and inorganic substances that can become pollutants when their concentrations exceed the limits established in the applicable environmental law. Among the contaminants in the soil, we find arsenic, a metalloid considered toxic and responsible for chronic human disorders due to accidental ingestion. Because of the above, various numerical models have been used to understand the behavior of contaminants in the soil, mainly focused on the saturated zone of the soil. Additionally, soil contamination generates changes in the geotechnical behavior of the soil that is generally not considered in the analysis. To date, no model comprehensively determines the transport of pollutants in the unsaturated zone. Therefore, this research performs the transport analysis through a thermal analogy considering the changes in the retention curve and the function of hydraulic conductivity once the soil is contaminated. The results demonstrate changes in the soil classification, an increase in the coarse particle content, an intense increase in the angle of internal friction, and an increase in permeability. The calibration of Whatman filter paper grade 42 to obtain the retention curves denotes the changes suffered in the soil. The most striking result is decreasing the matric potential while increasing the osmotic potential, which is generally not considered in unsaturated soil mechanics analysis. Finally, the evaluation of the model showed an increase in the area affected by point sources and dry-wet environments concerning the natural soil, denoting the need to use the retention curves of contaminated soils in both trajectories, the most striking result being the oval shape of affectation in the suction profiles, due to the changes in the hydromechanical behavior of the soil in the unsaturated zone.

Key words: unsaturated soil, contaminated soil, arsenic, contaminant transport, model

ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE FIGURAS	10
ÍNDICE DE TABLAS	18
ESTRUCTURA DE LA TESIS.....	20
1.1 INTRODUCCIÓN.....	22
1.2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	26
1.3 JUSTIFICACIÓN	27
1.4 HIPÓTESIS	28
1.5 OBJETIVO GENERAL.....	28
1.6 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	29
2. MARCO TEÓRICO.....	30
2.1 SUELOS NO SATURADOS	30
2.2 CURVA DE RETENCIÓN AGUA-SUELO (SWRC)	31
2.2.1 MODELO DE VAN GENUCHTEN (1980)	33
2.2.2 MODELOS FRACTALES PARA AJUSTAR LA SWRC	35
2.2.3 MODELO DE FUENTES (1992) PARA DESCRIBIR LA SWRC	36
2.2.4 MODELO DE D. G. FREDLUND, A. XING, Y S. HUANG (1994)	37
2.3 CONTAMINANTES	38
2.3.1 ARSÉNICO.....	40
2.4 POROSIMETRÍA	46
2.5 MODELOS DE TRANSPORTE DE SOLUTOS.....	52
2.5.1 MODELO DE ALSHAWABKEH Y RAHBAR (2006)	54
2.5.2 MODELO DE H. J. ZHANG, D. S. JENG, D. A. BARRY; B. R. SEYMOUR, Y L. LI, (2012)	57
2.5.3 MODELO DE Z. LI, Z. ZHOU, Y. DAI, Y B. DAI, (2019)	62
2.5.4 MODELO DE S. G. FITYUS, D. W. SMITH, Y J. R. BOOKER, (1999)	65
2.6 MODELO DE ANALOGÍA TÉRMICA DE ZHANG (2004)	68
2.6.1 PROPIEDADES HIDRÁULICAS DE FLUJO.....	71
2.6.2 ANÁLISIS DE FLUJO.....	72
2.6.3 GEOMETRÍA Y MALLADO.....	74
2.6.4 ANÁLISIS MECÁNICO.....	79

3.	METODOLOGÍA	82
3.1	LOCALIZACIÓN DEL SUELO A ESTUDIAR.....	84
3.2	GRADO DE COMPACTACIÓN	85
3.3	CONTENIDO DE LÍQUIDO (AGUA Y/O CONTAMINANTE).....	85
3.4	CONTAMINANTE UTILIZADO EN EL SUELO	85
3.4.1	<i>CONCENTRACIÓN DEL CONTAMINANTE</i>	<i>86</i>
3.5	PREPARACIÓN DE LAS MUESTRAS CONTAMINADAS CON ARSÉNICO	86
3.6	DETERMINACIÓN DEL POTENCIAL DE HIDRÓGENO	89
3.7	DETERMINACIÓN DE LA CAPACIDAD DE INTERCAMBIO CATIÓNICO.....	89
3.8	CARACTERIZACIÓN GEOTÉCNICA.....	89
3.8.1	<i>ANÁLISIS GRANULOMÉTRICO POR MALLAS</i>	<i>90</i>
3.8.2	<i>LÍMITES DE CONSISTENCIA</i>	<i>90</i>
3.8.3	<i>DETERMINACIÓN DEL PESO ESPECÍFICO DE LA MASA DEL SUELO</i>	<i>91</i>
3.8.4	<i>RESISTENCIA DEL SUELO AL CORTE DIRECTO.....</i>	<i>92</i>
3.8.5	<i>ENSAYE DE CONSOLIDACIÓN.....</i>	<i>92</i>
3.8.6	<i>COEFICIENTE DE PERMEABILIDAD SATURADA</i>	<i>92</i>
3.9	SUCCIÓN.....	94
3.9.1	<i>EVALUACIÓN DE LA SUCCIÓN DE UN SUELO CONTAMINADO POR MEDIO DE LA CALIBRACIÓN DEL PAPEL FILTRO WHATMAN NO. 42.....</i>	<i>95</i>
3.10	DIFRACCIÓN DE RAYOS X	96
3.11	MORFOLOGÍA DEL SUELO	97
3.12	POROSIMETRÍA DEL SUELO	98
3.13	ANÁLISIS DE FLUORESCENCIA DE RAYOS X POR REFLEXIÓN TOTAL.....	98
3.14	ANALOGÍA TÉRMICA	99
3.14.1	<i>DATOS DE ENTRADA</i>	<i>99</i>
3.14.2	<i>ANÁLISIS HIDRÁULICO</i>	<i>100</i>
3.14.3	<i>GEOMETRÍA Y MALLADO.....</i>	<i>104</i>
4.	RESULTADOS Y DISCUSIÓN	106
4.1	EVALUACIÓN DE LA CONTAMINACIÓN DE LA MUESTRA DE SUELO POR EL MÉTODO DE GOTEO 106	

4.2	DIFRACCIÓN DE RAYOS X	110
4.3	PH	113
4.4	ESPECIACIÓN QUÍMICA DEL ARSÉNICO	115
4.5	CAPACIDAD DE INTERCAMBIO CATIÓNICO	116
4.6	DISTRIBUCIÓN DEL TAMAÑO DE LOS GRÁNULOS DEL SUELO	117
4.7	LÍMITES DE CONSISTENCIA.....	122
4.8	PRUEBAS DE CORTE.....	126
4.9	PRUEBAS DE COMPACTACIÓN	128
4.10	CONSOLIDACIÓN	129
4.11	CONDUCTIVIDAD HIDRÁULICA	132
	4.11.1 COEFICIENTE DE PERMEABILIDAD SATURADO	132
	4.11.2 PREDICCIÓN DEL COEFICIENTE DE PERMEABILIDAD POR EL MÉTODO DE CONSOLIDACIÓN.....	135
4.12	CARACTERIZACIÓN GEOTÉCNICA.....	136
4.13	SUCCIÓN	137
	4.13.1 SUCCIÓN DEL SUELO NO CONTAMINADO.....	137
	4.13.2 SUCCIÓN DE UN SUELO CONTAMINADO CON ARSÉNICO	139
4.14	POROSIMETRÍA	145
4.15	AJUSTE DE LA CURVA DE RETENCIÓN A TRAVÉS DE LA CURVA GRANULOMÉTRICA POR EL MÉTODO DE FUENTES (1992).....	147
	4.15.1 COMPARACIÓN DE LAS CURVAS DE RETENCIÓN OBTENIDAS POR LA SIMULACIÓN DE FUENTES CON LAS OBTENIDAS DEL PAPEL FILTRO.....	149
	4.15.2 COMPARACIÓN DE LAS FUNCIONES DE CONDUCTIVIDAD HIDRÁULICA (FCH) OBTENIDAS POR LA SIMULACIÓN DE FUENTES CON LAS OBTENIDAS DEL PAPEL DE FILTRO	
	154	
4.16	PROPIEDADES HIDRÁULICAS DEL MODELO DE FLUJO EN LA ANALOGÍA TÉRMICA	156
	4.16.1 FUNCIÓN DE DIFUSIVIDAD	156
	4.16.2 ZONA ACTIVA Y PERFIL DE SUCCIONES TOTALES.....	162
4.17	ANÁLISIS DE FLUJO DE LA ANALOGÍA TÉRMICA.....	164
	4.17.1 GEOMETRÍA Y MALLADO.....	164
	4.17.2 FUNCIÓN DE PRECIPITACIÓN COSINUSOIDAL.....	165

<i>4.17.3 PERFIL DE SUCCIONES CONSIDERANDO UNA DESCARGA TRANSITORIA</i>	167
<i>4.17.4 DESCARGA PUNTUAL</i>	178
<i>4.17.5 FLUJO DEL ARSÉNICO EN EL SUELO</i>	198
CONCLUSIONES	216
REFERENCIAS	219
ABREVIATURAS Y SIGLAS	233

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Definición del valor de entrada de aire y contenido de agua residual.	34
Figura 2. Típica SWRC para la predicción de la FCH en el punto medio del j-ésimo intervalo de contenido de agua	38
Figura 3. Fuentes contaminantes en suelo y agua.	39
Figura 4. Contaminación de agua subterránea (a) y suelo (b) por arsénico en el mundo.	41
Figura 5. Ciclo bioquímico del arsénico.	42
Figura 6. Productos de disociación en función del pH del a) arsenito y b) arseniato	44
Figura 7. Clasificación de los Isotermas.....	48
Figura 8. Clasificación de los tipos de histéresis.....	50
Figura 9. Algoritmo del estudio hidro-mecánico de un suelo no saturado.....	70
Figura 10. A) Flujo de calor y b) Superficies de convección	76
Figura 11. Características de los elementos cuadrangulares finitos del acoplamiento termo-mecánico	77
Figura 12. Algoritmo del análisis de flujo.....	78
Figura 13. Diagrama del Modelo de estado crítico en suelos, q vs p' , superficie de falla (sf_1) y esfuerzo de preconsolidación p'_c	80
Figura 14. Diseño experimental del proyecto en sus 4 etapas.....	83
Figura 15. Localización del pozo a cielo abierto donde se extrajo la muestra de suelo natural.....	84

Figura 16. Muestras de suelo recién fabricadas para ser utilizadas por el método de contaminación por goteo.....	87
Figura 17. Preparación muestras para calibración de papel filtro Whatman no. 42	96
Figura 18. Precipitación mensual en el municipio de Santiago de Querétaro	103
Figura 19. Datos de precipitación de la EMA-OMUAQ	104
Figura 20. Contenido de líquidos en distintas zonas de suelo en contaminación por goteo.....	106
Figura 21. Muestra de suelo para contaminación por goteo a 25 mg/kg a 28 días: a) erosión de la superficie de la muestra, y b) muestra con acumulación de contaminante en el fondo del recipiente.....	107
Figura 22. Muestra de suelo para contaminación por goteo a 50 mg/kg a 28 días: a) erosión de la superficie de la muestra, y b) muestra con acumulación de contaminante en el fondo del recipiente.....	107
Figura 23. Muestra de suelo para contaminación por goteo a 25 mg/kg a 28 días: a) muestra completa, y b) corte transversal de la muestra contaminada	108
Figura 24. Muestra de suelo para contaminación por goteo a 50 mg/kg a 28 días: a) muestra completa, y b) corte transversal de la muestra contaminada	109
Figura 25. Difracción de Rayos X: a) Equipo de Difracción de Rayos X, y b) montaje de muestras para análisis.	111
Figura 26. Difracción de Rayos X, muestras contaminadas con arsénico.	112
Figura 27. pH en suelo contaminado con arsénico.	114
Figura 28. Diagrama Eh-pH de especies acuosas de arsénico en el sistema As-O ₂ -H ₂ O a 25 °C y 1 bar de presión total en muestras de suelo arcilloso.....	116

Figura 29. Capacidad de intercambio catiónico en muestras contaminadas	117
Figura 30. Muestras de suelo contaminado con a) 0 mg/kg As, b) 25 mg/kg As y c) 50 mg/kg As.	118
Figura 31. Curvas granulométricas del suelo en estado natural y contaminado ..	119
Figura 32. Imagen SEM HR de a) muestra natural a 1,800 aumentos, y, b) muestra contaminada a 50 mg/kg a 1,500 aumentos.	121
Figura 33. Imagen SEM HR de a) muestra natural, y, b) muestra contaminada a 50 mg/kg a 3,000 aumentos.....	121
Figura 34. Imagen SEM HR de a) muestra natural y b) muestra contaminada a 50 mg/kg a 8,000 aumentos.....	122
Figura 35. Determinación del límite líquido en la copa de Casagrande para 25 mg/kg.	123
Figura 36. Carta de plasticidad y clasificación del suelo en distintas concentraciones de As.....	124
Figura 37. Prueba de corte directo: a) Preparación de la muestra y b) montaje de la muestra en concentración de 25 mg/kg.	126
Figura 38. Pruebas de corte suelo contaminado con As.....	127
Figura 39. Pruebas de compactación Proctor estándar	128
Figura 40. Curva de consolidación para muestras contaminadas con arsénico en: a) 0 mg/kg, b) 25 mg/kg y c) 50 mg/kg	130
Figura 41. Pruebas de consolidación en muestras de suelo contaminado.	131
Figura 42. Montaje de la muestra de suelo en estado natural para la prueba de conductividad hidráulica saturada.....	133

Figura 43. Conductividad hidráulica saturada para distintas concentraciones de arsénico.	134
Figura 44. SWRC 0 mg/kg, Succión vs grado de saturación: a) succión total y b) succión mátrica.....	138
Figura 45. Calibración de papel filtro Whatman No. 42 en muestras contaminadas con arsénico.....	139
Figura 46. Trayectoria de humedecimiento agua-suelo-contaminante.	141
Figura 47. Trayectoria de secado agua-suelo-contaminante	142
Figura 48. Comparación de la trayectoria de humedecimiento agua-suelo-contaminante.	143
Figura 49. Comparación de la trayectoria de secado agua-suelo-contaminante. Succión total (kPa) vs Grado de saturación.	144
Figura 50. Pruebas de porosimetría, a) Isotermas para muestras contaminadas y b) distribución de tamaño de poro.....	145
Figura 51. Comparación de las SWRC obtenidas por simulación para muestras contaminadas con arsénico: a) 0 mg/kg, b) 25 mg/kg y c) 50 mg/kg.	148
Figura 52. Comparación de las SWRC simuladas vs papel filtro con Mualem: a) 0 mg/kg, b) 25 mg/kg y c) 50 mg/kg.....	152
Figura 53. Función de conductividad hidráulica. Succión mátrica (kPa) vs Conductividad hidráulica (m/s): a) suelo natural y b) suelo contaminado	155
Figura 54. a) Difusividad y b) Función de conductividad hidráulica como función de la succión en la concentración de 0 mg/kg de arsénico.....	157
Figura 55. a) Difusividad y b) Función de conductividad hidráulica como función de la succión en la concentración de 25 mg/kg de arsénico	159

Figura 56. Comparación de las funciones de Difusividad como función de la succión en a) trayectoria de secado y b) trayectoria de humedecimiento	160
Figura 57. Comparación de las funciones de Difusividad como función del contenido volumétrico de agua en a) trayectoria de secado y b) trayectoria de humedecimiento	161
Figura 58. Perfiles de humedad de la región de Jurica, Qro.....	163
Figura 59. Perfiles de succión en la región de Jurica, Qro.....	163
Figura 60. Geometría y mallado del modelo discreto de flujo, 4 m de profundidad, 12 m de longitud y mallado de 0.1 m	165
Figura 61. Función de precipitación cosinusoidal	166
Figura 62. Modelo discreto de flujo transitorio: a) suelo natural a 150 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 150 días	169
Figura 63. Modelo discreto de flujo transitorio: a) suelo natural a 270 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 270 días	171
Figura 64. Modelo discreto de flujo transitorio: a) suelo natural a 720 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 720 días	172
Figura 68. Modelo discreto de flujo transitorio: a) suelo natural a 480 días, y b) suelo natural a 510 días.	174
Figura 69. Modelo discreto de flujo transitorio: a) suelo natural a 870 días, y b) suelo natural a 900 días.	175
Figura 70. Modelo discreto de flujo transitorio: a) suelo natural a 1230 días, y b) suelo natural a 1260 días.....	176
Figura 71. Modelo discreto de flujo transitorio en suelo natural a 1440 días, con profundidad máxima de 2.78 m.....	177

Figura 72. Perfil de succión utilizando una descarga puntual de 0.002 t/m ³ en un tiempo de 930 días	179
Figura 73. Zona afectada por cambios de ψ_t en una descarga de 0.00015 T/m ³	180
Figura 74. Zona afectada por cambios de ψ_t en una descarga de 0.002 T/m ³	181
Figura 75. Zona afectada por cambios de ψ_t en una descarga de 0.006 T/m ³	181
Figura 76. Zona afectada por cambios de ψ_t en una descarga de 0.012 T/m ³	182
Figura 77. Comparación entre las zonas afectadas por succión en diferentes cambios de descarga (cambios en densidad)	183
Figura 78. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 30 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 30 días	184
Figura 79. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 150 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 150 días	186
Figura 80. $\Delta\psi_t$ respecto al tiempo en suelos contaminados con As a 0 mg/kg y 25 mg/kg	189
Figura 81. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 330 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 330 días	190
Figura 82. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 540 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 540 días	193
Figura 83. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 810 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 810 días	194
Figura 84. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 1170 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 1170 días	195

Figura 85. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 1350 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 1350 días	197
Figura 86. Distribución de la concentración de As para una descarga transitoria considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 150 días.....	199
Figura 87. Distribución de la concentración de As para una descarga transitoria considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 270 días.....	200
Figura 88. Distribución de la concentración de As para una descarga transitoria considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 720 días.....	201
Figura 89. Distribución de la concentración de As para una descarga transitoria considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 1170 días.....	204
Figura 90. Distribución de la concentración de As para una descarga transitoria considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 1440 días.....	205
Figura 91. Distribución de la concentración de As considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 150 días	207
Figura 92. Distribución de la concentración de As considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 330 días	208
Figura 93. Distribución de la concentración de As considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 540 días	210

Figura 94. Distribución de la concentración de As considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 810 días211

Figura 95. Distribución de la concentración de As considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 1170 días213

Figura 96. Distribución de la concentración de As considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 1350 días214

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Concentraciones de arsénico en suelo y agua reportados en México	45
Tabla 2. Comparaciones de símbolos entre la consolidación y termodinámica en problemas acoplados	69
Tabla 3. Concentraciones de NaCl para la calibración del papel filtro Whatman no. 42	95
Tabla 4. Composición química del suelo natural	99
Tabla 5. pH en contaminación por goteo a 14 días, 28 días y 56 días	109
Tabla 6. Análisis de varianza de pH de muestras contaminadas con arsénico....	110
Tabla 7. Resultados del análisis de difracción de rayos x	113
Tabla 8. Contenido de gravas, arenas y finos bajo distintas concentraciones de arsénico.	118
Tabla 9. Clasificación SUCS de muestras contaminadas con As a distintas concentraciones	124
Tabla 10. Valores de cohesión y fricción interna de suelos contaminados con arsénico en distintas concentraciones.	127
Tabla 11. Valores de consolidación	130
Tabla 12. Coeficiente de permeabilidad por medio del ensaye oedométrico	135
Tabla 13. Caracterización geotécnica de un suelo contaminado con arsénico en distintas concentraciones	136
Tabla 14. Análisis estadístico de la calibración del papel filtro Whatman no. 42.	140
Tabla 15. Diámetro de poro y superficie específica	146

Tabla 16. Resultados del ajuste de la curva granulométrica para obtener la SWRC	147
Tabla 17. Valores de la restricción n para ajustar la SWRC	150

ESTRUCTURA DE LA TESIS

En el Capítulo I se orienta al concepto de suelos contaminados y a la importancia de estudiar su ruta de transporte en la zona no saturada, recurriendo a diversos autores que analizan el transporte de contaminantes con distintos enfoques, que van más allá del comportamiento en suelos saturados y se enfocan en el proceso de consolidación. A través del breve recorrido de modelos, interrogantes relacionadas con el comportamiento de contaminantes establecen posibilidades teóricas que no se pueden excluir, debido a la incertidumbre del mecanismo de contaminación del suelo con arsénico y su relación con su comportamiento hidromecánico en su zona no saturada.

El Capítulo II explica, el comportamiento hidromecánico presente en la zona no saturada a través de la curva de retención agua-suelo y su relación con la parte hidráulica del suelo. Posteriormente, se describe el proceso de contaminación y las implicaciones negativas del arsénico refiriéndose a la parte ambiental a través de los cambios en las propiedades químicas y físicas del suelo una vez que se contamina el suelo, situación que toma importancia al mencionarse diversos lugares que han sido contaminadas y reportados en México. Tomando como punto de partida lo anterior, se presentan los modelos de flujo de contaminantes disponibles en la literatura y como a través de una analogía térmica se refuerza la hipótesis de acoplar los cambios en el comportamiento hidromecánico una vez que se han contaminado con arsénico en un modelo de flujo para explicar el comportamiento de este contaminante en la zona no saturada.

En el Capítulo III se plantean a partir de 4 etapas, las estrategias encaminadas a comprender el cambio que se produce en el comportamiento hidromecánico del suelo una vez que el arsénico entra en contacto, tomando como partida el método de contaminación y la caracterización del suelo con dos concentraciones de arsénico a fin de obtener una concentración crítica de arsénico, y como puede ser posible obtener las curvas de retención agua-suelo-arsénico e

incorporar esos datos en un modelo de flujo que pueda ser capaz de considerar fuentes puntuales a fin de analizar el área afectada por el arsénico.

En el Capítulo IV se presentan los resultados de la caracterización geotécnica de dos concentraciones de arsénico (25 mg/kg y 50 mg/kg), los resultados de implementar una metodología para obtener la curva de retención de suelos contaminados con arsénico y los resultados del comportamiento hidráulico aunado a los perfiles de succión en el suelo en un modelo con analogía térmica producto de considerar los cambios en la curva de retención del suelo contaminado y su perfil de concentraciones en el suelo.

1.1 INTRODUCCIÓN

Los suelos son un ambiente en el cual interactúan el agua, el aire y las rocas, y son considerados elementos que retienen sustancias (Su *et al.*, 2022) o las fijan por medio de adsorción, de modo que son capaces de contribuir a la protección del ambiente (Francisca *et al.*, 2012). Sin embargo, estos elementos pueden llegar a convertirse en contaminantes cuando exceden los límites establecidos en las regulaciones ambientales aplicables.

El movimiento del contaminante a través del suelo depende de los cambios en las propiedades geotécnicas, por lo cual diversos investigadores han trabajado con contaminantes como lo son los metales pesados (p. ej., cadmio, zinc, plomo, arsenito, cobre y mercurio) para evaluar las propiedades geotécnicas del suelo (Li *et al.*, 2015; Chu *et al.*, 2017; Joshi *et al.*, 2019; Karkush & Ali, 2020; Moghal *et al.*, 2020; Negahdar & Nikghalpour, 2020), debido a que, dentro de los elementos presentes en el ambiente, el arsénico es comúnmente encontrado en suelos contaminados (GWRTAC, 1997; Markiewicz-Patrokwska *et al.*, 2005).

El mecanismo que afecta las propiedades geotécnicas inicia con la disminución del pH del suelo debido a las interacciones del contaminante con las fases sólida y líquida en el suelo (Chu *et al.*, 2018; Moghal *et al.*, 2020) produciendo dos posibles efectos que resultan en la aglomeración de las partículas de suelo (Chu *et al.*, 2018): a) el primero modifica la distribución de las fuerzas de van der Waals causando fuerzas de atracción (Kaya & Fang, 2000), y b) la absorción de iones metálicos en las partículas de arcilla causando la contracción de la doble capa difusa (Negahdar & Nikghalpour, 2020).

Como consecuencia de esta aglomeración/floculación la distribución de tamaño de partícula cambia incrementándose, aparentemente, el contenido de partículas gruesas mientras que se disminuye el contenido de finos (Li *et al.*, 2015; Karkush y Ali, 2020), además de disminuir la superficie específica (Vásquez-Nogal y Hernández-Mendoza, 2022) disminuyendo la absorción de agua en las arcillas y

en consecuencia disminuyendo el límite líquido (Chu *et al.*, 2018; Joshi *et al.*, 2019; Negahdar & Nikghalbpour, 2020).

Estudios previos han hallado que la resistencia al corte de suelos contaminados con zinc, cadmio y plomo decrece al aumentar la concentración del contaminante (Chu *et al.*, 2017). Además, la cohesión de un suelo contaminado ha demostrado incrementarse en presencia del plomo (Li *et al.*, 2015; Chu *et al.*, 2017), zinc (Chu *et al.*, 2017; Joshi *et al.*, 2019) y cadmio (Chu *et al.*, 2017). Sin embargo, otras investigaciones han encontrado que la cohesión decrece en presencia del plomo (Karkush & Ali, 2020; Negahdar & Nikghalbpour, 2020) o zinc (Negahdar & Nikghalbpour, 2020).

Muchos de los resultados proceden de diversos contaminantes como el zinc, cadmio y plomo, sin embargo, pocos estudios se han enfocado en el estudio del arsénico en suelos. Debido a lo anterior, existe una creciente preocupación sobre la integridad estructural de infraestructuras desplantadas sobre suelos contaminados.

Respecto al transporte de solutos en un medio deformable, es conocido que es un problema de interés que ha recibido atención en los últimos años, pero que hasta el momento no ha sido totalmente evaluado. Diversos estudios han evaluado varios aspectos de los procesos de transporte en un suelo arcilloso debido a que la sorción de sustancias químicas en el suelo y sedimentos está determinada por las interacciones de van der Waals (Huffer *et al.*, 2019).

En general hay dos tipos de enfoques para resolver dichas ecuaciones: modelos analíticos y modelos numéricos. El primer enfoque es aplicable cuando las condiciones de frontera y la geometría se simplifican. Mientras que los modelos numéricos pueden ser usados en varios problemas sofisticados e incluyen el método de diferencias finitas, método de volumen finito y el método de elemento frontera, usado para resolver la ecuación que gobierna el flujo de agua subterránea y el transporte de contaminantes (Seyedpour *et al.*, 2019).

Zhang *et al.* (2012) proponen una ecuación advectiva-difusiva para medios porosos casi saturados, con la cual pudieron concluir que un bajo grado de saturación lleva a una mayor velocidad promedio del fluido, lo cual incrementa el flujo de la emisión, además que el análisis no dimensional de las ecuaciones en su aplicación a un revestimiento de un vertedero muestra que la influencia del peso propio y la variación espacial de la porosidad son despreciables en el transporte del contaminante.

Zhang *et al.* (2013) estudiaron el transporte de solutos a partir de un modelo acoplado de consolidación (1D) con un modelo de transporte de solutos en un medio poroso casi saturado, concluyendo que la sorción puede disminuir drásticamente la tasa de transporte de solutos y las formas más efectivas de retardar la migración de contaminantes son reducir la compresibilidad y mejorar los niveles de sorción en la arcilla.

Li *et al.* (2019) también estudiaron el transporte de solutos en un medio poroso saturado acoplando el transporte de contaminantes con el proceso de consolidación del suelo a través de un acuitardo deformado, tomando en consideración diversos parámetros del suelo. Concluyendo que el impacto del retardo en el drenaje del contaminante es afectado por la consolidación y la reducción del espesor del acuitardo, la cual reduce el tiempo de infiltración del contaminante en la capa de arcilla.

La presencia de suelos no saturados es común en el ambiente, por ejemplo, los sedimentos marinos se encuentran regularmente no saturados debido al gas que producen los procesos bioquímicos, otro caso es cuando el nivel de aguas freáticas se localiza a una cierta distancia debajo de la superficie o una geomembrana (Fityus *et al.*, 1999). Sin embargo, la literatura presente hasta la fecha se ha enfocado a analizar el flujo de solutos en el suelo en medios porosos saturados (Alshawabkeh & Rahbar, 2006; Zhang *et al.*, 2012; Li *et al.*, 2019).

La introducción de contaminantes en el suelo presenta dos condiciones: la condición saturada y no saturada. A pesar de la amplia investigación en el campo de flujo de contaminantes, no existen estudios que aborden adecuadamente el comportamiento de los suelos no saturados cuyo comportamiento es diferente, ya que es influenciado por el grado de saturación y fuerzas capilares, que en conjunto afectan el comportamiento de los suelos no saturados (Farouk *et al.*, 2004; Lu & Likos, 2006).

La extensión del análisis de transporte de contaminantes de suelos saturados a suelos no saturados es sencilla, un cambio simple pero importante es el reemplazar la porosidad del suelo por su contenido volumétrico de agua. En condiciones no saturadas tiene el efecto de reducir el área transversal en la cual el contaminante fluye.

El análisis del transporte de contaminantes para suelos parcialmente saturados es influenciado por la dependencia de la difusión, dispersión y el coeficiente de partición (K_d) en el contenido volumétrico de agua del suelo. Además, es generalmente reconocido que la dispersividad de un suelo es función del contenido volumétrico de agua en el suelo (Fityus *et al.*, 1999).

Mazzieri *et al.* (2002) mencionan que los parámetros del transporte de contaminantes en un suelo arcilloso, en principio, dependen de la relación de vacíos y como consecuencia del esfuerzo efectivo.

Los cambios de volumen de un suelo arcilloso ocurren por diferentes razones como es la consolidación primaria, por lo cual se han desarrollado modelos de transporte de contaminantes que consideran el efecto de la consolidación como es el modelo desarrollado por Alshaqabkeh y Rahbar (2006) el cual toma en cuenta que el suelo se encuentra en estado saturado, que las leyes de difusión de Fick y la ley de Darcy de flujo en medios porosos son válidas, además de considerar la conductividad hidráulica constante en el tiempo y el espacio.

Fityus *et al.* (1999) analizaron el transporte de contaminantes a través de un suelo estratificado bajo un vertedero utilizando una solución que considera la dispersión y la advección bajo ciertas limitaciones, es decir, no se considera la variación del perfil de humedad con el tiempo y se considera el coeficiente de difusión constante, así que para analizar el flujo de manera adecuada es necesario considerar los ciclos de humedecimiento y secado en el suelo.

Abbasi Maedeh *et al.* (Abbasi Maedeh *et al.*, 2017) estudió la dispersión de aceites analizando los potenciales en el suelo y la permeabilidad, mostrando que el grado de contaminación en el suelo es 100 veces más grande que el grado de contaminación presente en el suelo saturado, sin embargo, no se consideran los cambios en la permeabilidad con los cambios en el contenido de líquidos en la zona no saturada.

1.2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Se ha establecido que el análisis de la ruta de transporte de contaminantes en suelos finos es importante debido a la existencia de conductividades hidráulicas bajas en este tipo de suelos, además que el pequeño grado de saturación alarga el tiempo que el contaminante permanece en las capas de suelo (Zhang *et al.*, 2013). Sin embargo, la mayoría de los modelos de flujo consideran el suelo como un medio saturado y se basan en la ecuación de flujo de Darcy como base en los análisis de la ruta de transporte, la cuantificación de material contaminado obtenido del análisis de estos métodos y el posterior análisis mecánico para el desarrollo de soluciones a edificaciones y carreteras.

Esta situación ha llevado a obtener resultados erróneos en la determinación de la zona afectada por el contaminante en la presencia de suelos no saturados, debido a que la ecuación de Darcy no es aplicable a este tipo de suelos, en cambio la ecuación de Richards da un comportamiento aproximado del flujo de agua en suelos no saturados (Fityus *et al.*, 1999).

Hasta la fecha no hay un modelo matemático que pueda determinar de manera integral la ruta de transportes en suelos no saturados por medio del uso de la Curva de Retención Agua-Suelo (SWRC por las siglas en ingles de Soil Water Retention Curve) y la Función de Conductividad Hidráulica (FCH), por lo anterior el problema es acoplar el efecto de la succión y la variación de la conductividad hidráulica en un modelo de flujo capaz de tomar en cuenta los efectos de los cambios de las propiedades mecánicas en suelos no saturados tras haber sido contaminados y por consiguiente, a través del análisis de la ruta de transporte de solutos desarrollar soluciones frente a daños estructurales.

1.3 JUSTIFICACIÓN

La interacción del suelo con contaminantes modifica los parámetros del suelo tales como la relación de vacíos, superficie específica, aumento del límite líquido, límite plástico y contracción lineal. En el caso de aguas residuales la disminución del valor del pH, la distribución de tamaño de poros cambia disminuyendo la cantidad de microporos y el cambio en el contenido de partículas del suelo es observado a través del tamaño de grano, los cuales influyen eventualmente en la curva de retención agua-suelo y la permeabilidad, debido a que los suelos contaminados se comportan como mayormente expansivos y requieren de mayor cantidad de energía para poder ser compactados dejan una creciente preocupación sobre la integridad estructural de la infraestructura desplantada sobre suelos contaminados (Cabello, 2015; Gaxiola-Gómez, 2017; Huffer *et al.*, 2019; Mohamed y Paleologos, 2017).

El principal problema de estos suelos son los cambios de volumen causados por las variaciones en su contenido de agua (Puppala *et al.*, 2013) ya que la presencia de contaminantes puede inducir colapsos en el suelo debido a que su estructura depende del contacto entre agregados, la porosimetría, del grado de saturación y del estado de esfuerzos al que esté sometido (Barrera & Garnica, 2004;

Bell, 2005). Además, los suelos potencialmente expansivos dependen de propiedades fisicoquímicas (Ikeagwuani & Nwonu, 2019) que son afectadas por la presencia de contaminantes como los lixiviados, que pueden contener metales pesados y compuestos orgánicos diversos, donde podemos encontrar al arsénico (López Ramírez *et al.*, 2022), razones por las cuales no se sabe si las estructuras cimentadas sobre suelos contaminados se comportarán adecuadamente o se inducirá colapso en la estructura.

Aunado a esto se ha establecido que el cambio en el volumen de un suelo ejerce un impacto en el transporte de material en un medio poroso deformable (Zhang *et al.*, 2013) y los cambios estructurales en el suelo pueden influir crucialmente en las funciones de filtrado que reducen el flujo del soluto al agua subterránea (Alshawabkeh & Rahbar, 2006), por lo que el estudio del transporte de contaminantes en suelos no saturados nos ayuda a obtener una detección del área afectada, a fin de desarrollar soluciones frente a daños perjudiciales de inestabilidad de taludes, procesos de erosión y asentamientos en edificaciones y carreteras afectados por la contaminación del suelo (Barrera & Garnica, 2002; Amin *et al.*, 2016; Mohamed & Paleologos, 2017; Sämann *et al.*, 2019).

1.4 HIPÓTESIS

La implementación de modelos matemáticos de flujo los cuales consideran la modificación en la succión y la conductividad hidráulica por la adición de arsénico en suelos no saturados mejorarán el pronóstico de flujo de contaminantes para distintas condiciones de descarga.

1.5 OBJETIVO GENERAL

Implementar un modelo de flujo de arsénico en un suelo no saturado utilizando una analogía térmica en el Método de Elementos Finitos (MEF) para

determinar la forma en la que se lleva a cabo su transporte en el suelo, considerando condiciones de descarga puntual y continua, que incluye el uso de la curva de retención suelo-agua-arsénico y la función de conductividad hidráulica del suelo contaminado.

1.6 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Evaluar los cambios producidos en las propiedades geotécnicas de un suelo no saturado contaminado con 25 mg/kg y 50 mg/kg de arsénico, en comparación con sus propiedades en estado natural o no contaminado, para determinar la concentración que produce un cambio mayor en dichas propiedades.
2. Obtener las curvas de retención Suelo-Agua-Contaminante (SWRCAs) de un suelo no saturado contaminado con 25 mg/kg y 50 mg/kg de arsénico por estimación mediante el método de Fuentes y colaboradores (2020), y comparándola contra las curvas obtenidas por el método de papel de filtro, para determinar la factibilidad de su aplicación en el modelo de flujo de contaminantes que se empleará en la presente investigación.
3. Implementar un modelo de flujo de arsénico en un suelo no saturado utilizando una analogía térmica en MEF mediante el acoplamiento de los parámetros de conductividad hidráulica y succión del suelo contaminado, para las condiciones de descarga puntual y continua del contaminante.

2. MARCO TEÓRICO

2.1 SUELOS NO SATURADOS

Los suelos son cuerpos naturales compuestos tanto por materiales inorgánicos como orgánicos, líquidos, gases y organismos, y se caracterizan por presentar estratos con espesores variables debido a la adición, pérdida, transferencia y transformación de materia y/o energía a lo largo del tiempo (Sposito, 2008; Volke *et al.*, 2005).

Los suelos son un ambiente crítico en donde las rocas, el aire y el agua interactúan. Son elementos filtrantes, amortiguadores y transformadores, que tienen la capacidad de retener sustancias o fijarlas por adsorción, con lo cual protegen a las aguas subterráneas y superficiales contra la contaminación (Volke *et al.*, 2005).

El suelo es un sistema de interconexiones entre los espacios vacíos producto del contacto entre las partículas sólidas. Los poros están parcial o totalmente llenos de agua (Fredlund & Rahardjo, 1993), y pueden ser:

- Suelos secos (fase sólida y fase Suelos saturados con agua y sin aire en los vacíos (fase líquida y fase sólida).
- gaseosa)
- Suelos no saturados (fase líquida, fase sólida y fase gaseosa)

La principal característica de los suelos no saturados es que se componen de tres fases: sólida, líquida y gaseosa; dentro su clasificación se encuentran los suelos expansivos que frecuentemente contienen minerales como la montmorillonita (Pérez-Rea *et al.*, 2012), capaces de adsorber agua en su estructura interna provocando un aumento de volumen. Este tipo de suelos se encuentran localizados en algunos estados de México como son Querétaro, Guanajuato, Michoacán, Tamaulipas, Morelos, Baja California Norte, Veracruz, Chiapas, Campeche, Sonora y Sinaloa (Zepeda *et al.*, 1992).

Los suelos expansivos son conocidos por causar asentamientos diferenciales provocados por el cambio de volumen al ocurrir un cambio de humedad en las esquinas y el centro de la cimentación (Jahangir *et al.*, 2013). El proceso de humedecimiento-secado produce ciclos de expansión y contracción que someten a las estructuras a esfuerzos repetitivos (Pérez-Rea *et al.*, 2012).

Cabe mencionar que la condición no saturada plantea mayores problemas a comparación de la condición saturada ya que comporta el tratamiento de nuevas variables de esfuerzo, como la succión, que pueden afectar considerablemente a su comportamiento planteando problemas de flujo no lineales y de compleja solución con tres fases: sólida, líquida y gaseosa (Barrera & Garnica, 2002).

El transporte de solutos en un medio deformable es un problema interesante debido a que la deformación del suelo ocurre por la disipación del exceso de presión, considerada como compresión cuando es positivo y considerado como expansión (o succión) cuando se asume negativo. Varios estudios han indicado que el cambio de volumen ejerce un impacto en el transporte de material en un medio poroso deformable (Alshawabkeh & Rahbar, 2006; Li *et al.*, 2019).

2.2 CURVA DE RETENCIÓN AGUA-SUELO (SWRC)

Fredlund y Morgenstern (1977) introdujeron una cuarta fase en los suelos no saturados llamada membrana contráctil que influencia el comportamiento mecánico del suelo atrayendo las partículas de suelo a través de la tensión superficial. La variación del contenido de agua con respecto a la succión es definida por la Curva de Retención Agua-Suelo (SWRC Soil Water Retention Curve) y representa el contenido de agua contra la succión en escala logarítmica (Rahardjo *et al.*, 2019).

La energía necesaria para remover el agua del suelo o succión total (ψ_t) tiene dos componentes, una asociada al efecto de la capilaridad denominada succión matricial (ψ_m) y una componente debida a la presencia de sales disueltas

en el agua, llamada succión osmótica (ψ_o). La mayoría de los problemas que involucran a los suelos no saturados son comúnmente el resultado de cambios ambientales que pueden resultar en la expansión del suelo o en la inestabilidad de un talud, estos cambios afectan al componente mátrico de la succión, donde los cambios en la succión osmótica son menos significantes.

En general, la succión osmótica cobra importancia en el comportamiento del suelo, cuando se presentan problemas que involucren contaminación química (Fredlund & Rahardjo, 1993). Debido a que los cambios en el contenido de agua resultan en cambios en la succión mátrica, el flujo de agua en los suelos no saturados es afectado por los espacios vacíos entre las partículas sólidas, de tal modo que la permeabilidad de los suelos no saturados varía con los cambios en la succión mátrica (Rahardjo *et al.*, 2019).

La importancia del suelo y su interacción con los contaminantes recae en el control del movimiento del contaminante a través del suelo y los subsecuentes cambios en sus propiedades. Esta interacción suelo-agua-contaminante tiene una serie de importantes cambios en varios parámetros fisicoquímicos como son el tipo de suelo, densidad del suelo, cambio en el contenido de partículas del suelo observado a través del tamaño de grano, la distribución de tamaño de poros cambia disminuyendo la cantidad de microporos, relación de vacíos, cambios en la capacidad de retención de agua, superficie específica, la capacidad de intercambio catiónico, textura y el pH que modifica la estructura del suelo (generando variaciones en los vacíos (Nayak *et al.*, 2007), lo cual tiene repercusiones en los el tamaño de partícula y dichos cambios se ven reflejados en los valores de conductividad hidráulica del suelo (Cabello, 2015; Mohamed & Paleologos, 2017; Huffer *et al.*, 2019).

Cabello-Suárez (2015) ha examinado los efectos de los hidrocarburos en la curva de retención del suelo encontrando modificaciones de los valores de succión utilizando el método de papel de filtro, el cual es un método confiable, accesible y frecuentemente usado en laboratorio con buenos resultados, sin embargo, tales

valores no son satisfactorios dado que los hidrocarburos solo fluían por la superficie externa del espécimen y no hacia su centro, además, los valores de succión no corresponden al contaminante, es decir, corresponden a los del suelo con agua adsorbida. Estos resultados permitieron concluir que la metodología para obtener las curvas de retención requería ser modificada y adaptada a otros líquidos, debido a que a altas concentraciones de contaminante las succiones se ven disminuidas con el uso de la ecuación de calibración establecida en la normativa vigente, y no reflejaban las características del suelo contaminado.

2.2.1 MODELO DE VAN GENUCHTEN (1980)

El modelo propuesto por van Genuchten (1980) es uno de los más utilizados para describir la curva de retención, este modelo depende de dos parámetros que se obtienen por medio de un ajuste de mínimos cuadrados (Oh *et al.*, 2015). Esta ecuación representa el contenido de líquidos como una función de la succión en el suelo.

$$\frac{\theta + \theta_r}{\theta_s + \theta_r} = [1 + (\alpha\psi_m)^n]^{-m} \quad (1)$$

Donde θ_r es el contenido volumétrico residual de agua, θ_s es el contenido volumétrico saturado de agua, ψ_m es la succión mátrica, α se calcula como $1/\psi_d$ e indirectamente describe la distribución de tamaño de poros del suelo (DTP), ψ_d es la inversa del valor de entrada de aire, finalmente los parámetros m , n y α son los parámetros de ajuste que afectan la forma y posición de la curva de retención (van Genuchten, 1980); además, el parámetro n describe la dispersión de los poros grandes y los poros pequeños (van Genuchten *et al.*, 1991).

El uso de esta ecuación se limita a un rango entre la succión residual de un suelo y el valor de entrada de aire (ψ_m en la cual el aire ingresa a los vacíos del suelo y empieza a desaturarse) (Ahmadi-adli *et al.*, 2014) como se observa en la Figura 1.

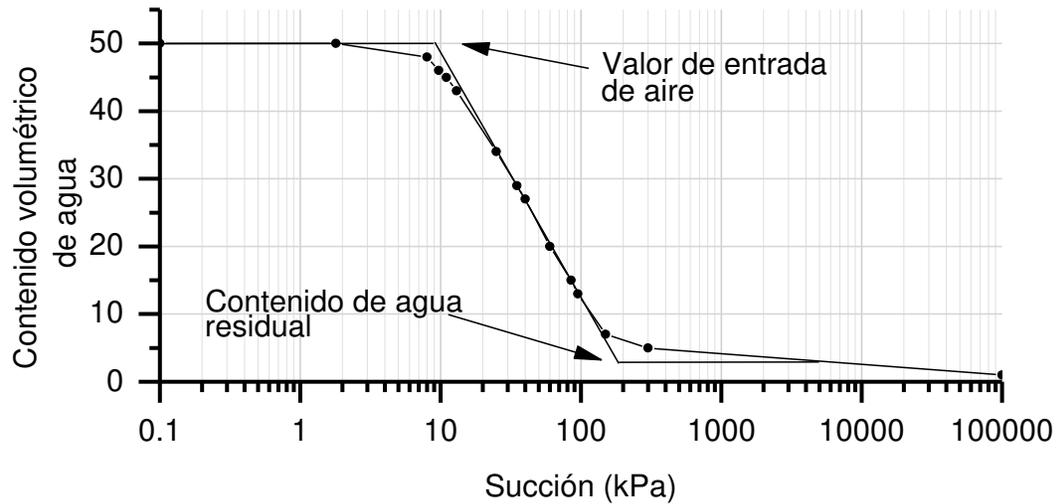


Figura 1. Definición del valor de entrada de aire y contenido de agua residual.

Tradicionalmente, se ha empleado el uso de los parámetros de ajuste por medio de dos modelos probabilísticos. Mualem (1976) considera un radio para evaluar la conductividad hidráulica correspondiente al promedio de dos tubos capilares (Ecuación (2)). Por otra parte, Burdine (1953) considera solamente el radio del poro más grande para describir el flujo de agua (Ecuación (3)) (Zavala *et al.*, 2018).

$$\frac{1}{1-m} = n \quad (2)$$

$$\frac{2}{1-m} = n \quad (3)$$

La obtención de la Función de Conductividad Hidráulica (FCH) está apegada a la ecuación para modelar o ajustar la SWRC y es referida a los parámetros m , n y α de acuerdo con la Ecuación (4):

$$k_r(\psi) = k_s \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{1/2} \left\{ 1 - \left[1 - \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{1/m} \right]^m \right\}^2 \quad (4)$$

Donde k_r es la conductividad hidráulica en función de la succión, k_s es el coeficiente de permeabilidad saturado y $m = 1 - 1/n$ (modelo de Mualem) (van Genuchten, 1980).

2.2.2 MODELOS FRACTALES PARA AJUSTAR LA SWRC

La estructura del suelo se relaciona a procesos físicos (p. ej.: porosidad, densidad), químicos y biológicos que dependen del tamaño de sus componentes o de la resolución del equipo de medición, lo que ha resultado problemático al momento de introducir parámetros medibles en la estructura del suelo. El proceso de transporte de líquidos en suelos ocurre en dos escalas diferentes: una asociada al transporte microporoso (red de interconexiones entre las partículas sólidas) y otro proceso asociado al transporte macroporoso (elementos sólidos que generan poros) (Crawford *et al.*, 2000). Debido a lo anterior, se introduce la dimensión fractal como una herramienta para describir la estructura del suelo cuyas propiedades sean las mismas en diferentes escalas (Rieu & Perrier, 1998).

Fuentes (1992) introdujo las relaciones fractales a los parámetros m , y n asumiendo que la resistencia al flujo es una función del tamaño del tubo capilar. Los modelos resultantes se definen como: poro neutro, el cual corresponde al modelo de Burdine adicionando la porosidad volumétrica como un factor de corrección (Ecuación (5)); media geométrica, que corresponde a una modificación del modelo de Mualem (Ecuación (6)) y poro grande correspondiente al modelo establecido por Zavala *et al.*, 2018) (Ecuación (7)).

$$0 < sm = 1 - \frac{4s}{n} < 1 \quad (5)$$

$$0 < sm = 1 - \frac{2s}{n} < 1 \quad (6)$$

$$0 < 2sm = 1 - \frac{4s}{n} < 1 \quad (7)$$

Donde s es la dimensión relativa, que es la relación entre las dimensiones fractal (D) y Euclidiana ϵ que satisface la Ecuación (8)

$$(1 - \phi)^s + \phi^{2s} = 1 \quad (9)$$

Donde ϕ es la porosidad volumétrica ($0 \leq \phi \leq 1$).

A partir de los modelos fractales es posible obtener la función de conductividad hidráulica tomando como base el modelo de van Genuchten (1980) (Ecuación (4)) para el modelo de poro neutro (Ecuación (10)), media geométrica (Ecuación (11)) y poro grande (Ecuación (12)) (Fuentes *et al.*, 2020):

$$k_r(\psi) = k_s \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^s \left\{ 1 - \left[1 - \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{1/m} \right]^{sm} \right\} \quad (10)$$

$$k_r(\psi) = k_s \left\{ 1 - \left[1 - \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{1/m} \right]^{sm} \right\}^2 \quad (11)$$

$$k_r(\psi) = k_s \left\{ 1 - \left[1 - \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{1/m} \right]^{2sm} \right\} \quad (12)$$

2.2.3 MODELO DE FUENTES (1992) PARA DESCRIBIR LA SWRC

El modelo de Fuentes (1992) establece una relación entre la distribución de tamaño de partícula y la curva porosimétrica. El volumen del suelo se considera como una esfera de un diámetro equivalente, como se indica en la Ecuación (13).

$$F(D) = 1 / \left[1 + \left(D_g / D \right)^n \right]^{-m} \quad (13)$$

Donde D_g es el diámetro geométrico y D es el diámetro de la curva granulométrica. Es posible obtener la SWRC introduciendo los parámetros m , n y α

tal que satisfagan la Ecuación (13) con la curva granulométrica minimizando el error medio cuadrado y posteriormente evaluando con dichos parámetros la Ecuación (1).

2.2.4 MODELO DE D. G. FREDLUND, A. XING, Y S. HUANG (1994)

Este modelo fue propuesto originalmente por Childs y Collis-George (1950) basándose en la aleatoriedad de los tamaños de poro para obtener la FCH. Posteriormente, este modelo fue mejorado por Marshall (1958) y mejorado por Kunze *et al.* (1968). Finalmente, Fredlund *et al.* (1994) lo modificaron para utilizar unidades del sistema internacional y ψ_m en lugar de la carga hidráulica (Ecuación (14)).

$$k(\theta_i) = \frac{k_s}{k_{sc}} \frac{T_s^2 \rho_w g}{2\mu_w} \frac{\theta_s^p}{n^2} \sum_{j=i}^m [(2j + 1 - 2i)\psi_j^{-2}] \quad (14)$$

$$i = 1, 2, \dots, m$$

$$k_{sc} = \frac{T_s^2 \rho_w g}{2\mu_w} \frac{\theta_s^p}{n^2} \sum_{j=i}^m [(2j + 1 - 2i)\psi_j^{-2}] \quad (15)$$

$$i = 1, 2, \dots, m$$

Donde k_s es el coeficiente de permeabilidad obtenido en ensayos de laboratorio (m/s), k_{sc} es el coeficiente de permeabilidad saturado calculado (Ecuación (15)), i es el número de intervalos que divide la SWRC (Figura 2), j una esquina desde i hasta m , T_s es la tensión superficial (N/m), ρ_w es la densidad del agua (kg/m^3), g es la aceleración de la gravedad (m/s^2), μ_w es la viscosidad absoluta del agua, p es una constante que representa la interacción de los poros de varios tamaños, m es el número de intervalos entre el contenido volumétrico de agua saturado (θ_s) y el contenido de agua más bajo (θ_L), n es el número total de intervalos

entre θ_s y un contenido de agua de cero, y ψ es la succión (kPa) correspondiente al punto medio del j -ésimo intervalo (Fredlund *et al.*, 1994).

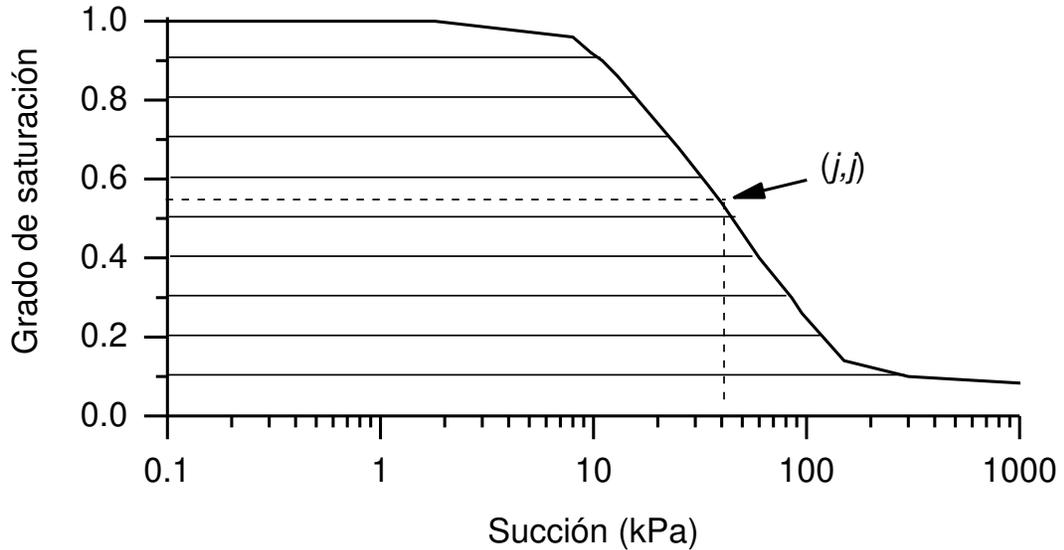


Figura 2. Típica SWRC para la predicción de la FCH en el punto medio del j -ésimo intervalo de contenido de agua

2.3 CONTAMINANTES

Toda materia en una forma u otra puede convertirse en un contaminante cuando se encuentra fuera de su ecosistema o en concentraciones superiores a lo establecido en la normatividad ambiental aplicable. Las sustancias químicas se vuelven contaminantes una vez que sus concentraciones son suficientes para poner en riesgo el ambiente o los organismos vivos. Afortunadamente la mayoría de esas sustancias químicas no son producidas en cantidades lo suficientemente grandes para ser un riesgo potencial, pero hay muchos otros producidos por el hombre o producidos naturalmente que si son riesgosas (Brusseau *et al.*, 2019).

Algunas de las fuentes de contaminación se muestran en la Figura 3, la cual incluye algunos ejemplos de actividades contaminantes y el tipo de contaminante

(Rangel *et al.*, 2015; Khan *et al.*, 2018; Biel-Maeso *et al.*, 2019; Brusseau *et al.*, 2019).

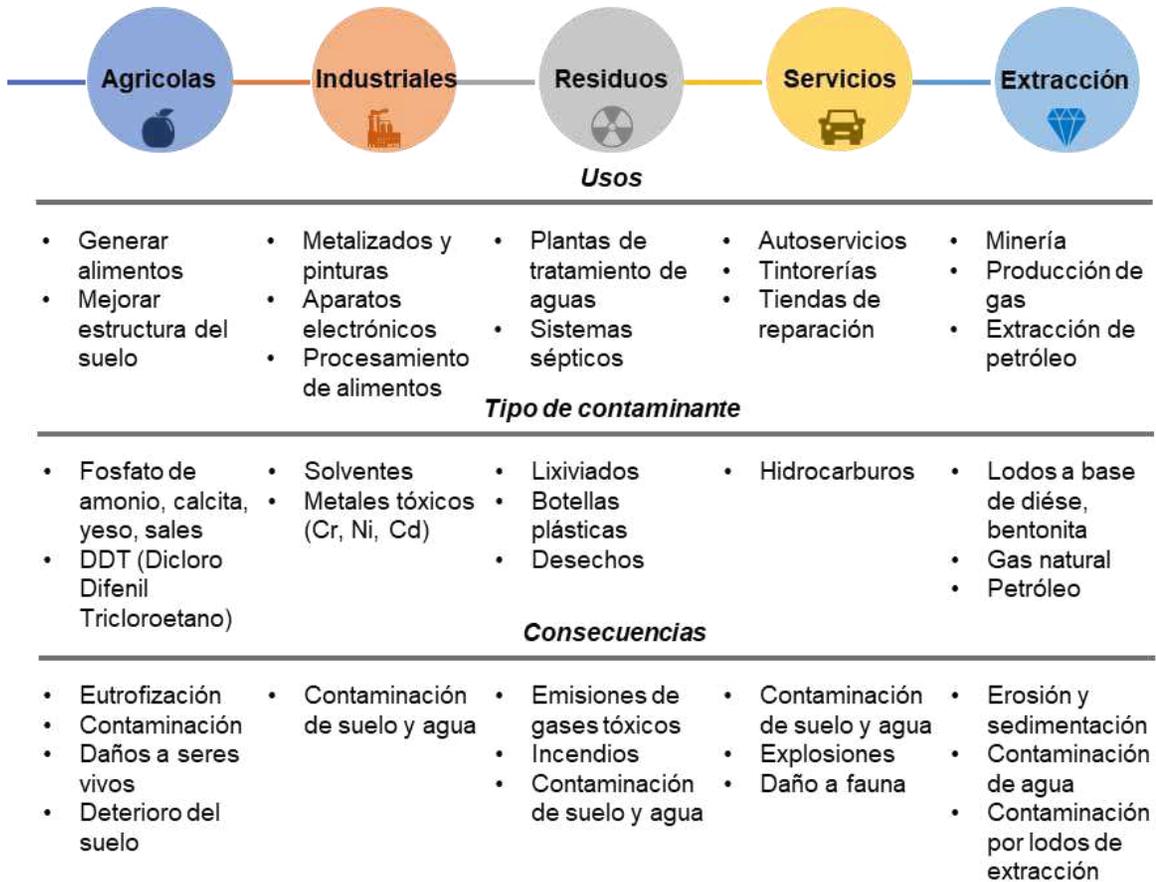


Figura 3. Fuentes contaminantes en suelo y agua.

No solo el tipo de contaminante desempeña un papel importante en el estudio de suelos contaminados, el tiempo en que se desarrolla la contaminación se requiere analizar. De acuerdo al Capítulo II: Programas de Remediación, Sección I: Disposiciones Generales, en el artículo 132 del Reglamento de la Ley General para la Prevención y Gestión Integral de los Residuos, se reconocen dos tipos de sitios contaminados: el primero se conoce como emergencia ambiental cuando la contaminación del sitio se deriva de un evento repentino de una liberación no controlada, incendio o explosión de un material en el medio ambiente, los cuales pueden ser provocados por error humano o por algo que falle al transportar

materiales peligrosos. En segundo lugar, se encuentra el pasivo ambiental, el cual se considera la liberación de residuos peligrosos con efectos a largo plazo con una obligación de remediación (RLGPGIR, 2006).

2.3.1 ARSÉNICO

La contaminación del suelo por metales pesados es un problema que ha causado un impacto ambiental negativo, ya que existe la posibilidad de que el contaminante sea adsorbido por los seres vivos. Algunas de las actividades antropogénicas que introducen metales pesados en el suelo son la actividad minera, fertilizantes, industria textil y la manufactura de baterías (Sdiri & Higashi, 2013). Aunado a esto, los metales pesados frecuentemente encontrados en sitios contaminados son el plomo, cromo, cadmio, cobre, mercurio, níquel, zinc y arsénico (GWRTAC, 1997), siendo este último el que cuenta con el mayor riesgo debido a su toxicidad en organismos y capacidad de bioacumulación en bajos niveles de exposición.

El arsénico se distribuye de manera no uniforme en todo el mundo predominantemente en sus formas inorgánicas: arsenito (As (III)) y arseniato (As (V)) en el suelo y el agua (Twaddle *et al.*, 2019) y se clasifica como uno de los elementos más tóxicos y carcinogénicos asociado a diferentes tipos de desórdenes crónicos (Cebrian *et al.*, 1983; Rosales *et al.*, 2018; Castañeda *et al.*, 2019; Jiménez-Córdova *et al.*, 2019; López-Guzmán *et al.*, 2019). La Figura 4 muestra la distribución de contaminación en suelos y agua subterránea en el mundo por arsénico (Paul & Saha, 2019).

La escala de toxicidad de los compuestos de arsénico decrece en el siguiente orden: arsina (H_3As) > arsenito (As (III)) > arseniato (As (V)) > compuestos arsenicales > arsénico elemental (As (0)) (Rangel *et al.*, 2015), por lo que la ingestión accidental de suelo (por ejemplo, el consumo de polvo o suelo adherido a las manos) es una forma de exposición a este metaloide (Hernández *et al.*, 2013),

de modo que la presencia del As en el suelo y el agua representa un serio problema ambiental en el mundo.

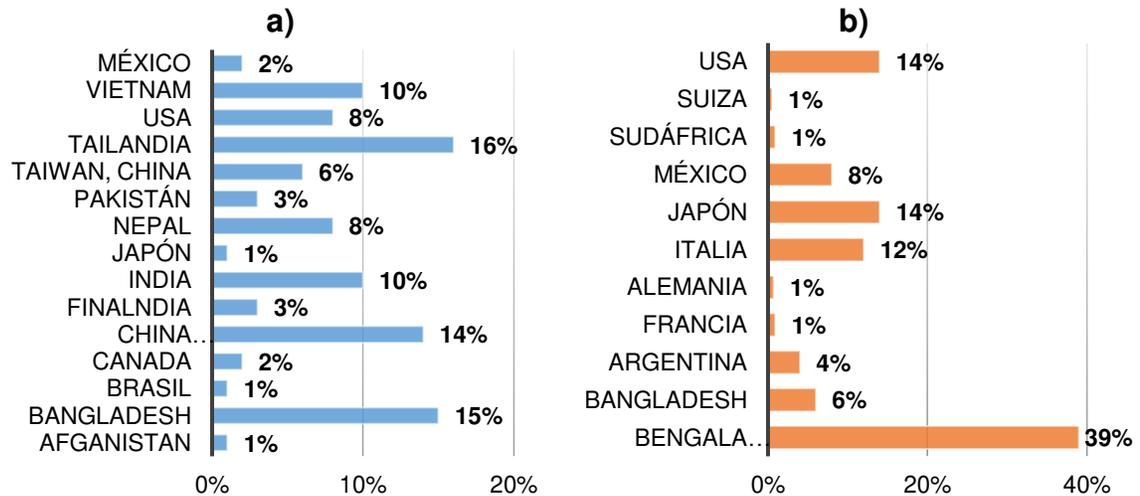


Figura 4. Contaminación de agua subterránea (a) y suelo (b) por arsénico en el mundo.

Fuente: Paul y Saha (2019).

La distribución y contaminación del arsénico se debe a procesos naturales y antropogénicos, y su problemática se debe a su fácil movilización en el ambiente (Rangel *et al.*, 2015). Las erupciones volcánicas, mineralización de rocas e incendios liberan una gran cantidad de arsénico en el ambiente de forma natural. Las actividades industriales son otra fuente de contaminación, por ejemplo, a inicios del siglo XX las industrias vidrieras desechaban residuos ricos en arsénico, además de las actividades mineras y el uso de fertilizantes que históricamente contenían arsénico en altas cantidades (Bakhat *et al.*, 2019). Hoy en día el valor medio de arsénico total de diferentes suelos en el mundo se estima en 6.83 mg/kg (da Silva Júnior *et al.*, 2019), y la concentración en el agua subterránea alcanza niveles mayores a 1,000 µg/L en diferentes partes del mundo (Bakhat *et al.*, 2019).

El ciclo bioquímico del arsénico se ilustra en la Figura 5 en el cual el ambiente ha sido impactado por la minería, fuentes geotérmicas y actividades antropogénicas.

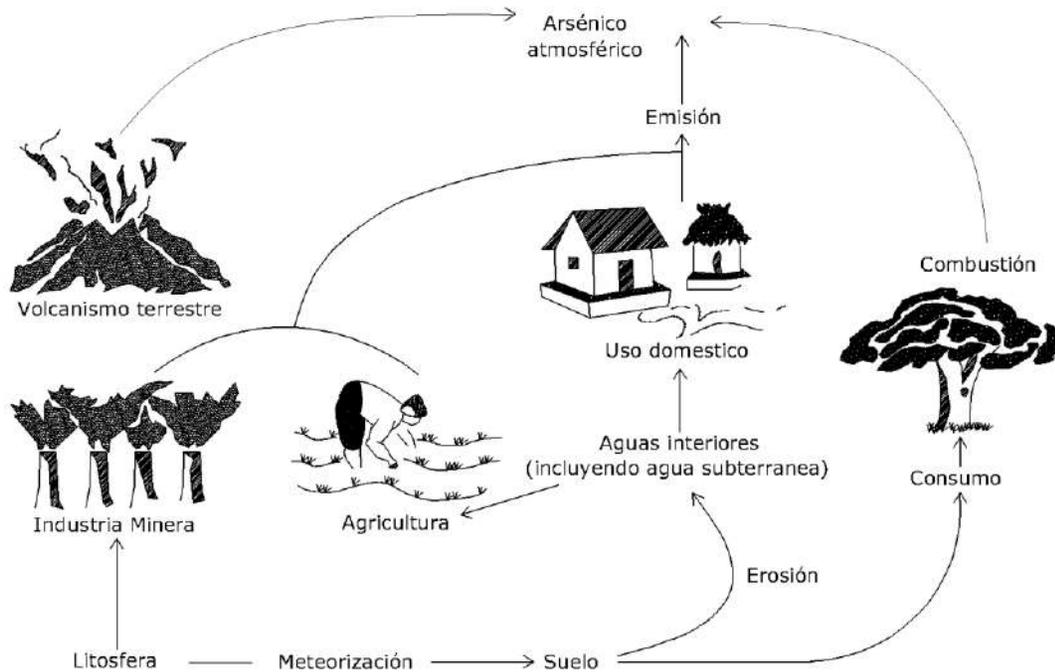


Figura 5. Ciclo bioquímico del arsénico.

Fuente: Paul y Saha (2019).

Suelos arcillosos y con contenidos de óxido de hierro tienen mayor potencial de retención de arsénico en comparación con suelos arenosos (Bakhat *et al.*, 2019). Esto es asociado a que los procesos de adsorción y desorción del arsénico y son afectados por otras propiedades fisicoquímicas del suelo especialmente el pH, ya que es un factor importante que controla la geoquímica del arsénico.

Estudios demuestran que un valor bajo de pH (menor a 5) incrementa la movilidad y solubilidad del arsénico debido a que los cationes metálicos se liberan de minerales y materia orgánica debido a los procesos de sorción dependientes del pH (McBride, 1989) o debido a los cambios de la solubilidad de algunos minerales.

En contraste, un mayor pH en el suelo mejora la captación de arsénico en el suelo (Bakhat *et al.*, 2019; da Silva Júnior *et al.*, 2019).

Además del pH, las condiciones de reducción-oxidación de otros elementos como el hierro (Fe) y sulfuro (S) o concentraciones de carbón orgánico disuelto, contenido de minerales de arcilla y materia orgánica influencia la movilidad y la biodisponibilidad del arsénico en el ambiente (Han *et al.*, 2019; Raju, 2022).

Estas propiedades, en combinación con la fuente de contaminación y el tiempo, pueden influenciar la distribución de arsénico en suelos (Jeong *et al.*, 2019). La unión de los metales con otros iones depende de los procesos de hidratación y del intercambio de cationes (McBride, 1989) y, dependiendo de la fuerza de los enlaces, estos pueden romperse cuando el pH del medio cambia, y, en consecuencia, afectando la especiación y actividad química de los metales (McBride, 1989; Masscheleyn *et al.*, 1991; Xu *et al.*, 2020; Oburger *et al.*, 2020).

La presencia de oxígeno afecta la solubilidad y movilidad de arsénico en el suelo, el As (V) se comporta como un ácido presente en el agua en las formas: H_2AsO_4^- , HAsO_4^{2-} y AsO_4^{3-} y predomina en ambientes ricos en oxígeno (aerobios) (Raju, 2022), bajo estas condiciones las concentraciones de arsénico permanecen <50 nm (nanómetro) en soluciones de suelos no contaminados, mientras que en suelos contaminados pueden alcanzar hasta 2 μM (micra).

En contraste, el As (III) es dominante en pH menor a 9.2 (Smedley & Kinniburgh, 2002) es biológicamente considerado más tóxico que el As (V) (Raju, 2022) y se encuentra en las formas. Además, la disolución de hidróxidos de hierro es una de las razones de la rápida movilidad del As (III) bajo condiciones reductoras y los procesos microbianos también transforman As (V) hacia As (III) y viceversa como un mecanismo de defensa de algunas especies bacterianas (Rangel *et al.*, 2015; Moran-Martínez, 2016; Bakhat *et al.*, 2019). La Figura 6 muestra el estado de oxidación del arsenito y arseniato que indica la especiación en ambos casos.

De acuerdo con Cobarrubias y Peña Cabrales (2017), los principales metales pesados y metaloides contaminantes en México son el mercurio, el arsénico y el plomo. Aunado a lo anterior, México es una región donde cerca del 75% de la población depende de la extracción del agua subterránea (Armienta & Segovia, 2008; Sandoval *et al.*, 2019), la cual generalmente es considerada más segura que al agua superficial como una fuente de agua potable (López-Guzmán *et al.*, 2019).

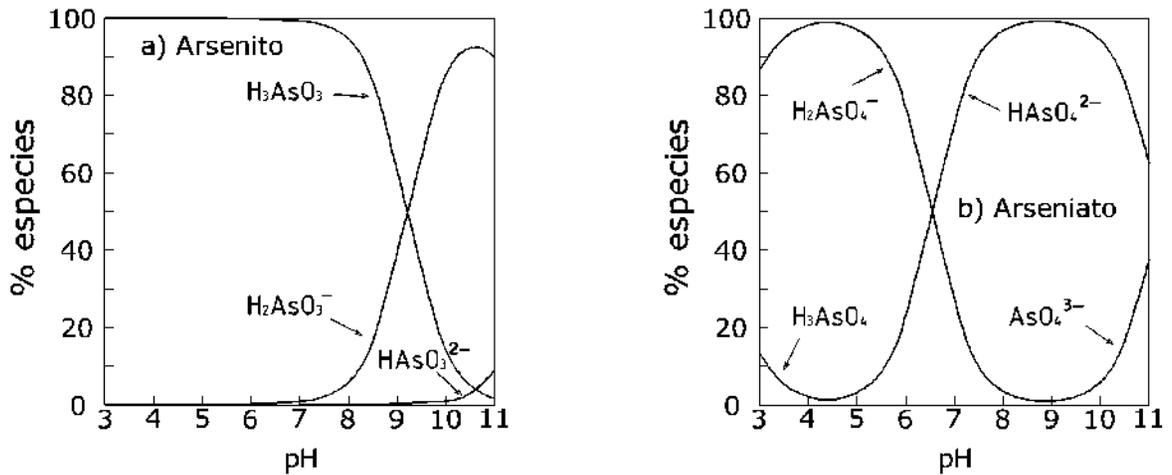


Figura 6. Productos de disociación en función del pH del a) arsenito y b) arseniato

Fuente: Rangel *et al.* (2015)

Sin embargo, su calidad es comprometida por contaminantes, donde la sobre explotación de los acuíferos debido al incremento en los niveles de excavación profunda para extraer agua aumenta el índice de contaminación del líquido con arsénico, sales y otros metales pesados al entrar en contacto con las aguas fósiles altamente contaminadas (Moran-Martínez, 2016). Por otro lado, la contaminación del agua subterránea se debe a la actividad minera, en la cual la extracción y procesamiento de minerales como el cobre, níquel, plomo, zinc y oro ha sido una fuente de contaminación asociada al drenaje ácido, considerado uno de los grandes peligros de la industria minera (Razo *et al.*, 2004; Armienta & Segovia, 2008; Sarkar & Paul, 2016).

Como se puede observar en la Tabla 1, en México la presencia de arsénico se encuentra detectada en 23 de los 32 estados del país, particularmente en la zona del Bajío en el centro de México conformada por Querétaro, Guanajuato, Jalisco, Aguascalientes Hidalgo (Zimapán), Guerrero (Taxco), Zacatecas (Guadalupe), San Luis Potosí, entre otros (Rosales *et al.*, 2018; Jiménez-Córdova *et al.*, 2019).

Tabla 1. Concentraciones de arsénico en suelo y agua reportados en México

Arsénico en agua y suelo en México	Concentración en agua (mg/l)	Concentración en suelo (mg/kg)	Bibliografía
Uso agrícola/residencial/comercial	-	22	NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004
Uso industrial	-	260	NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004
Limite permisible	0.05	-	NOM-127-SSA1-1994
Coahuila y Durango	0.24 a 1.00	-	Cebrian <i>et al.</i> (1983)
Hermosillo, Sonora	0.007 a 0.038	-	Wyatt <i>et al.</i> (1998b)
Comarca Lagunera, Durango y Coahuila	0.007 a 0.740	-	Rosas <i>et al.</i> (1999)
Meoqui, Chihuahua	0.134	-	Piñón-Miramontes <i>et al.</i> (2003)
Villa de la Paz, Matehuala, San Luis Potosí	> 5900	19 a 17384	Razo <i>et al.</i> (2003)
Comarca Lagunera, Durango y Coahuila	0.014 a 0.300	-	Armienta y Segovia (2008)
Hermosillo, Sonora	0.002 a 0.305	-	Armienta y Segovia (2008)
Área minera Zimapán, Hidalgo	1.1	-	Armienta y Segovia (2008)
Chihuahua, Chihuahua	-	35.3	Armienta y Segovia (2008)
Chihuahua, Chihuahua	0.021 a 0.025	1.50 a 540	Reyes-Gómez <i>et al.</i> (2010)
5 de febrero, Durango	157.900	-	Rocha-Amador <i>et al.</i> (2011)
Región Lagunera, Coahuila	0.250	-	Hernández-Ordaz <i>et al.</i> (2013)
El Salitre, Zimapán, Hidalgo	94.600	726.71	Rico-Rodríguez <i>et al.</i> (2013)
Bella Vista, Querétaro	24.600	73.25	Rico-Rodríguez <i>et al.</i> (2013)
Querétaro, Querétaro	7.200	12.67	Rico-Rodríguez <i>et al.</i> (2013)
Región del Bajío, Guanajuato	43	-	Guzmán <i>et al.</i> (2015)

Comarca Lagunera, Durango y Coahuila	7 a 740	30000	Rangel-Montoya <i>et al.</i> (2015)
Región del Bajío	40 a 134	-	Rosales <i>et al.</i> (2018)
Guanajuato	23	-	Castañeda <i>et al.</i> (2019)
Guadalupe Victoria, Chihuahua	0.01 a 54.3	-	Jiménez-Córdoba <i>et al.</i> (2019)
Valle de Guadiana, Durango	24.480	-	López-Guzmán <i>et al.</i> (2019)
Promedio mundial	-	6.83	da Silva Júnior <i>et al.</i> (2019)

De acuerdo a la Norma Oficial Mexicana NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004, la concentración máxima permitida de arsénico en el suelo varía de 22 mg/kg a 260 mg/kg dependiendo del uso del suelo, de 0.1 mg/l en aguas tratadas para reúso en servicios al público y de 0.05 mg/l en el agua para uso y consumo humano (NOM-124-SSA1-1994). Algunas de las concentraciones de arsénico se enlistan en la Tabla 1, la cual incluye concentraciones en suelo y agua, teniendo como referencia los límites permisibles de la Norma Oficial Mexicana.

2.4 POROSIMETRÍA

Los poros se clasifican de acuerdo a su tamaño como:

- Microporos: poros con diámetros menores a 2 nm
- Mesoporos: Poros con diámetros mayores a 2 nm y menores a 50 nm
- Macroporos: Poros con diámetro mayor a 50 nm

La adsorción es definida como la acumulación de moléculas sobre una interfase, y ocurre en la región externa (superficie) del sólido. El material adsorbido por el sólido se conoce como adsorbato, mientras que el adsorbente suele referirse al sólido (Thommes *et al.*, 2015).

La adsorción de gas a 77 K es una herramienta bien establecida para la caracterización de sólidos porosos y finos (Thommes *et al.*, 2015). La obtención de

la distribución de tamaño de poro (DTP) asume que la forma del poro es un tubo cilíndrico. Con la medición del volumen de gas condensado bajo diferentes presiones la isoterma de adsorción/desorción se grafica para obtener el volumen de poro y la DTP utilizando varios modelos teóricos (Xiangzeng , 2017).

Este método se basa en la condensación capilar, y en el modelo capilar usado, dentro del cual diferentes poros son tratados como capilares con diferentes tamaños y el cuerpo del capilar es el cuerpo combinado de esos capilares (Liu & Chen, 2014).

La adsorción de gas puede dividirse en dos métodos, la primera es la de adsorción de nitrógeno (N_2), la cual mide mesoporos y macroporos menores a 100 nm, mientras que la segunda, utiliza CO_2 y se utiliza para medir microporos (Xiangzeng , 2017).

De acuerdo a las recomendaciones de la IUPAC (Unión Internacional de Química Pura y Aplicada) las isotermas pueden ser clasificados en 6 tipos (Figura 7):

- Tipo I: Corresponde a isotermas que se caracterizan por tener sólidos microporosos con relativamente pequeña superficie específica (como el caso de carbones activados, óxidos porosos, etc.). Son cóncavos en el eje de la presión relativa. El alto volumen adsorbido (llenado de los poros) en bajas presiones relativas se asocia a las interacciones débiles entre el adsorbato y el adsorbente en la zona de microporos, generando que se presenten valores casi constantes una vez estos poros se han llenado (Thommes *et al.*, 2015). El tipo I(a) corresponde a materiales microporosos menores a 1 nm, mientras que el I(b) se obtiene con materiales mesoporosos (< 2.5 nm).

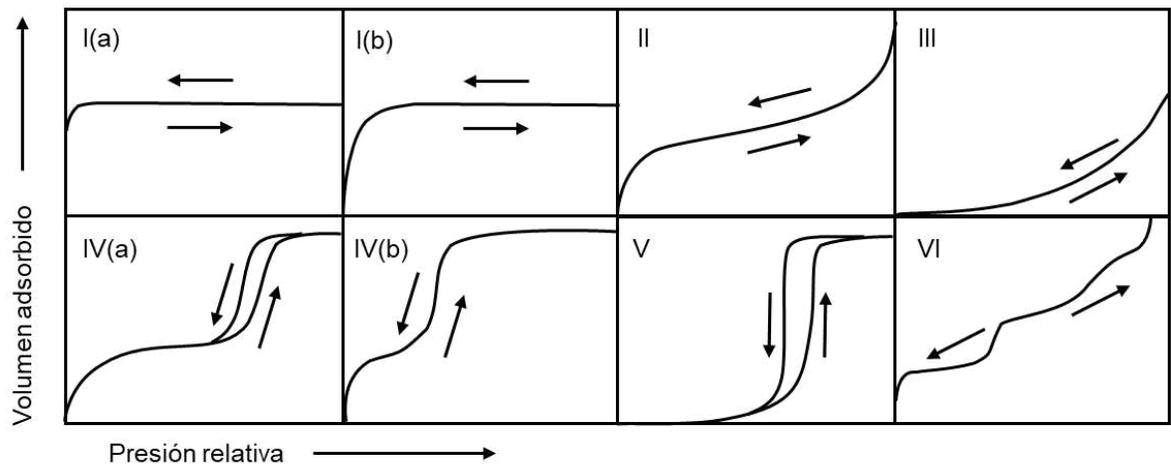


Figura 7. Clasificación de los Isotermas

- Tipo II: Corresponde a isotermas de la mayoría de los gases y de adsorbentes macroporosos. La ausencia del lazo de histéresis se cumple en este tipo de isoterma. El espesor de la capa adsorbida aumenta con la presión.
- Tipo III: Las interacciones entre el adsorbente y adsorbato son relativamente bajas.
- Tipo IV: Isotermas típicos de adsorbentes mesoporosos (óxidos de gel, adsorbentes industriales y materiales mesoporosos). Este tipo de isotermas son acompañados por histéresis, la cual ocurre cuando el poro excede cierto diámetro, además corresponden a mesoporos con forma cónica y cilíndrica. El isoterma tipo IV(a) se obtiene en poros menores a 4 nm, mientras que el tipo IV(b) se obtiene con mesoporos cónicos y cilíndricos cerrados en uno de sus extremos.
- Tipo V: su forma es parecida al isoterma III, además cuenta con una afinidad baja entre el adsorbente y el adsorbato. Esta isoterma se observa en la adsorción de vapor de agua en adsorbentes mesoporosos y microporosos.
- Tipo VI: también conocido como isoterma escalonada, este tipo de isoterma es representativo de adsorción en capas en una superficie uniforme no porosa, los escalones representan la capacidad de adsorción de cada capa,

es decir, se contribuye a la formación de la siguiente capa. Dentro de los ejemplos característicos encontramos al argón o kriptón en bajas temperaturas (Thommes *et al.*, 2015).

El primer paso es la saturación de los poros, en la cual el gas se adsorbe en las paredes de los poros al aumentar la presión del gas. La evaporación del líquido condensado se realiza desde los poros de mayor tamaño a los de menor tamaño (Liu & Chen, 2014).

El origen de la histéresis es asociado a la condensación capilar, definida como un fenómeno donde la fase de baja densidad (gas) cambia a una fase densa (condensación) en el espacio poroso (Barsotti *et al.*, 2016). El término condensación capilar no debe ser usado para describir el llenado de microporos porque no involucra esa transición. Existe una presión relativa menor al cual no se presenta la histéresis, siendo 0.42 para la adsorción de nitrógeno (Condon, 2006). Existen diferentes formas de histéresis reportadas, los cuales reflejan características particulares de la estructura de los poros (Figura 8).

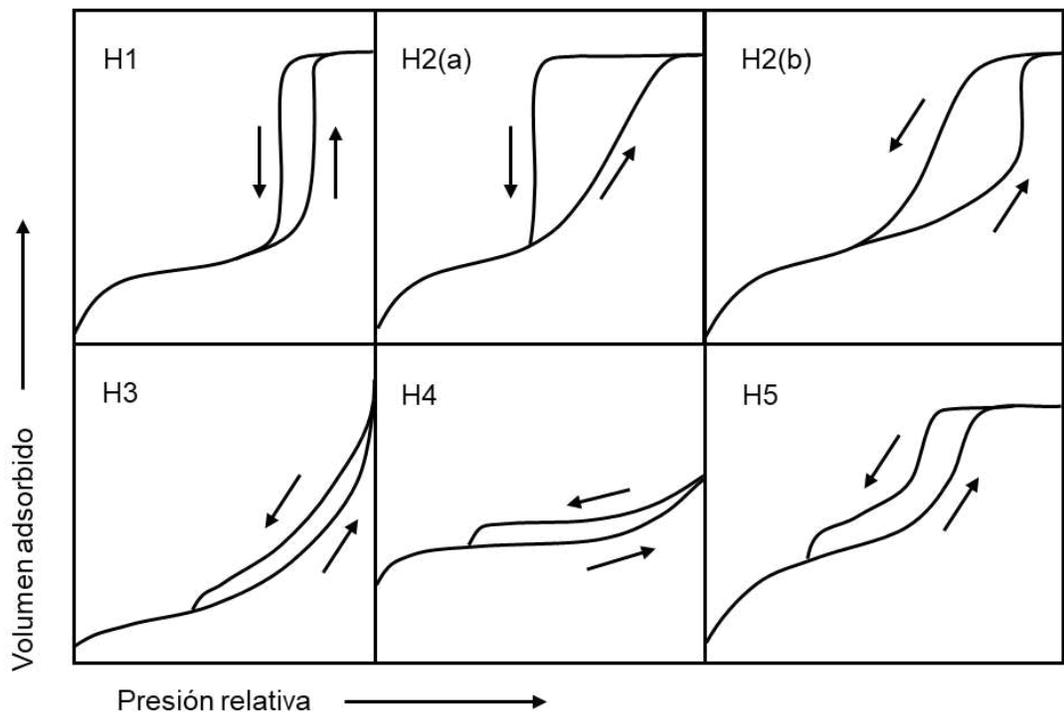


Figura 8. Clasificación de los tipos de histéresis.

- H1: es usualmente encontrado en materiales mesoporosos angostos de tamaño uniforme como las películas de sílice, carbonos mesoporosos, etc. Además, este tipo de histéresis está presente en materiales con poros con forma de botella (Thommes *et al.*, 2015).
- H2: se presenta en poros estrechos y anchos con canales interconectados (Condon, 2006). Como ejemplos están algunos geles de sílice, algunos vidrios porosos (vycor) y algunos materiales ordenados mesoporosos, además el tipo H2(b) se asocia al bloqueo de poro en materiales como espumas de sílice mesocelular y algunas sílices ordenadas mesoporosos.
- H3: se presenta en agregados no rígidos de placas paralelas como son las arcillas, pero también en redes con macroporos que no han sido completamente llenos en la condensación de poro.
- H4: es asociado al llenado de microporos, y son usualmente encontrados en cristales de zeolitas y carbonos microporosos y mesoporosos.

- H5: histéresis inusual, su forma es asociada a ciertas estructuras porosas que contienen mesoporos abiertos y parcialmente bloqueados (Thommes *et al.*, 2015).

Para analizar los datos de adsorción y desorción, existen dos métodos, el primero de ellos se conoce como Brunauer-Emmet-Teller (BET), el cual es el método más utilizado para representar las adsorciones de gas y obtener el área específica en materiales mesoporosos en presiones relativas entre 0.05 y 0.35, mientras que el modelo de Langmuir es utilizado para obtener el área específica de materiales microporosos (Wolfson, 2012).

La obtención de la distribución de tamaño de poros en la adsorción de N₂ se realiza comúnmente por el modelo Barrett-Joyner-Halenda (BJH), que utiliza la ecuación de Kelvin para establecer la relación entre la presión relativa y el tamaño de poro. Asumiendo que los poros son cilíndricos, el radio del poro puede ser expresado por medio de la ecuación de Kelvin (16):

$$r_K = -\frac{2\sigma V_m}{RT \ln(p/p_0)} \quad (16)$$

Donde σ es la tensión superficial del adsorbato en el punto de ebullición (N/m), R es la constante de los gases ideales, V_m es el volumen molar del adsorbato líquido (3.7×10^{-5} m³/mol para el nitrógeno líquido), T es la temperatura de ebullición del líquido (77 K para el nitrógeno líquido), p es la presión de equilibrio del gas en sorción y desorción (Pa), y p_0 es la presión de vapor del líquido adsorbato. El radio de Kelvin de los poros, con nitrógeno como el medio adsorbente, puede ser obtenido sustituyendo los parámetros como (17):

$$r_K = -\frac{0.0415}{\log(p/p_0)} \quad (17)$$

Donde r_K es el radio de poro con condensación del adsorbato en la presión relativa.

La presión incrementa desde 0.01 atm (atmósfera) a 1 atm gradualmente a una temperatura constante, y la cantidad adsorbida es medida. Finalmente, la isoterma de adsorción se obtiene para la muestra porosa. De modo análogo, la isoterma de desorción se obtiene midiendo la cantidad de gas mediante la reducción gradual de la presión desde 1 atm a 0.01 atm. El volumen de poro puede ser calculado mediante la cantidad adsorbida del adsorbato en la temperatura de ebullición, a esta temperatura, los microporos y mesoporos son llenados por el líquido (Liu & Chen, 2014).

La ecuación de Kelvin no es aplicable para medir DTP utilizando CO₂ (Dióxido de carbono), debido a que el adsorbato que llena los microporos no se encuentra en forma líquida cuando el poro es menor a 2 nm, sin embargo, la teoría de densidad funcional no local (NLDFT por sus siglas en inglés) puede ser utilizada para analizar el tamaño de poros en las isotermas de adsorción utilizando CO₂, el cual produce un volumen de microporos que es un análisis cuantitativo para microporos (Xiangzeng , 2017).

2.5 MODELOS DE TRANSPORTE DE SOLUTOS

En los últimos años ha habido un interés creciente en el modelado del transporte de masas (solutos o productos químicos) en suelos finos debido a las aplicaciones geoambientales que podemos obtener de dicho análisis, como lo son el diseño de revestimientos de arcilla, barreras protectoras para excavaciones o la remediación de sitios contaminados (Alshawabkeh & Rahbar, 2006).

Debido a lo anterior varios investigadores del área de recursos hídricos y de suelos han desarrollado modelos para entender el comportamiento del contaminante al fluir en la estructura del suelo, la cual ocurre en dos condiciones: en condiciones saturadas y parcialmente saturadas. La condición saturada se ha estudiado mediante el uso de modelos numéricos como el método de diferencias finitas, método de elementos de frontera y método de volumen finito que consideran

la dispersión, advección, sorción, reacción y degradación (Fityus *et al.*, 1999; Seyedpour *et al.*, 2019) y acoplan el fenómeno de consolidación en su análisis para estudiar las sobrecargas de estructuras (Alshawabkeh & Rahbar, 2006; Li *et al.*, 2019). Además, los modelos enfocados en la zona saturada del suelo se basan en la ecuación de Darcy como base de los análisis. El transporte de sustancias es controlado por la conductividad hidráulica en el medio poroso y por las propiedades del suelo (distribución de tamaño de poros, anisotropía y porosidad) (Francisca *et al.*, 2012).

No obstante, la primera zona del suelo en ser contaminada es la no saturada, la cual experimenta presiones negativas conocidas como succión (Brusseu *et al.*, 2019), por lo que cambios en la saturación del suelo afectan la resistencia mecánica, y el cambio de líquido en los poros afecta el flujo, resultando en cambios de succión (Fredlund & Morgenstern, 1977). El transporte en la zona no saturada ha sido evaluado por Fityus *et al.* (1999) quienes realizaron el análisis sin considerar la variación de la humedad en el tiempo y mantuvieron constante la difusión en el suelo, resultando en un modelado no del todo realista. Abbasi Maedeh *et al.* (2017) también estudiaron el transporte enfatizando la permeabilidad y la succión mátrica en su análisis; sin embargo, ambos valores se consideran que no cambian durante el análisis.

Sin embargo, la contaminación del suelo genera modificaciones en los parámetros de la conductividad hidráulica (Nayak *et al.*, 2007; Vásquez-Nogal & Hernández-Mendoza, 2022), distribución de tamaño de poro, tamaño de grano, que en conjunto influyen el potencial de retención en el suelo afectando el comportamiento hidromecánico (Vásquez-Nogal & Hernández-Mendoza, 2022).

En general la mayoría de los modelos permiten la variación de parámetros como el coeficiente de consolidación, compresibilidad y relación de vacíos, sin embargo, no consideran los cambios en la conductividad hidráulica, puesto que se basan en las ecuaciones de Darcy para suelos saturados. Algunos modelos matemáticos disponibles en la literatura son el de Fityus *et al.* (1999), Alshawabkeh

y Rahbar (2006), Zhang *et al.* (2012) y Li *et al.* (2019), los cuales se explican a continuación.

2.5.1 MODELO DE ALSHAWABKEH Y RAHBAR (2006)

Basado en las suposiciones de Terzaghi en 1925 sobre la teoría de la consolidación, el cambio transitorio uni-dimensional (1D) del exceso de la presión de poro se puede obtener como:

$$\frac{\partial h_e}{\partial t} = c_v \frac{\partial^2 h_e}{\partial z^2} \quad (18)$$

Donde h_e es el exceso de carga hidráulica [L]; c_v es el coeficiente de consolidación [L^2T^{-1}]; z es la distancia [L]; y t es tiempo [T].

El vector de flujo de masas J [$M T^{-1}L^{-2}$] por unidad transversal del área de suelo es expresado por la adición de transporte advectivo y difusivo como:

$$J = -nD^*\nabla c + c_v \quad (19)$$

Donde D^* es el coeficiente de difusión [L^2T^{-1}]; n es la porosidad; c es la concentración de sustancia química; v es el vector de advección [LT^{-1}] del soluto. Aplicando conservación de masas en un volumen de control de acuerdo con la siguiente expresión:

$$\nabla \cdot J + \frac{\partial(cn)}{\partial t} = 0 \quad (20)$$

Tenemos que:

$$\frac{\partial(cn)}{\partial t} - D^*\nabla \cdot (n \nabla c) + \nabla \cdot (c v) = 0 \quad (21)$$

Bajo las condiciones de que la carga hidráulica puede separarse en dos componentes que incluyen la carga en estado estable (no cambia con el tiempo) (h_s) y el exceso de carga hidráulica (h_e), entonces la carga hidráulica total h es:

$$h = h_s + h_e \quad (22)$$

Sustituyendo la velocidad de advección de Darcy en 1D en:

$$v = -k_h \frac{\partial h}{\partial z} \quad (23)$$

La ecuación de conservación de masas con la velocidad de Darcy tenemos que:

$$\frac{\partial(cn)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(nD^* \frac{\partial c}{\partial z} \right) + k_h \frac{\partial}{\partial z} \left(c \frac{\partial h}{\partial z} \right) \quad (24)$$

La ecuación de conservación de fluidos describe los cambios en la porosidad del suelo como:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = k_h \frac{\partial^2 h_e}{\partial z^2} \quad (25)$$

$$\frac{\partial n}{\partial z} = \gamma_w m_v \frac{\partial h_e}{\partial z} \quad (26)$$

Donde m_v es el coeficiente de cambio de volumen [L^2F^{-1}]; γ_w es el peso específico del fluido [FL^{-3}]. Sustituyendo las ecuaciones anteriores con la ecuación de conservación de masas (27).

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + c \frac{k_h}{n} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 h_e}{\partial z^2} \right) + \frac{k_h}{n} \frac{\partial c}{\partial z} \left(\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{D^*}{c_v} \frac{\partial h_e}{\partial z} \right) \quad (27)$$

Sustituyendo la carga total h en la ecuación anterior

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + \frac{k_h}{n} \frac{\partial c}{\partial z} \left[\frac{\partial h_s}{\partial z} + \left(1 + \frac{D^*}{c_v} \right) \frac{\partial h_e}{\partial z} \right] \quad (28)$$

Para normalizar el sistema con respecto a h , c , z y t se definen los siguientes parámetros:

$$H_s = \frac{h_s}{L}, \quad H_e = \frac{h_e}{L}, \quad Z = \frac{z}{L}, \quad C = \frac{c}{c_0}$$

$$T = \frac{c_v t}{L^2}, \quad T_c = \frac{D^* t}{L^2}, \quad P^* = \frac{k_h L}{n D^*}, \quad P_c = \frac{k_h L}{n c_v}$$

Donde H_s , H_e , Z y C son carga estable normalizada, exceso de carga, y concentración, respectivamente; c_0 es la concentración inicial de contaminante; T es el factor de tiempo, P^* es el número modificado de Peclét, P_c es el número de consolidación advectiva, L es el espesor de la capa de arcilla. El número modificado de Peclét es el número típico de Peclét (vL/D^*) por unidad de carga hidráulica. La relación entre T y T_c y entre P^* y P_c son controladas por la relación D^*/c_v como:

$$\alpha = \frac{D^*}{c_v} = \frac{T_c}{T} = \frac{P_c}{P^*} \quad (29)$$

Substituyendo los parámetros anteriores en las ecuaciones de transporte tenemos que:

$$\frac{\partial H_e}{\partial T} = \frac{\partial^2 H_e}{\partial Z^2} \quad (30)$$

$$\frac{\partial C}{\partial T_c} = \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} + P^* \frac{\partial C}{\partial Z} \left[\frac{\partial H_s}{\partial Z} + (1 + \alpha) \frac{\partial H_e}{\partial Z} \right] \quad (31)$$

Para resolver las ecuaciones diferenciales parciales simultáneamente es necesario usar un factor de tiempo constante (T o T_c) en ambas ecuaciones. Ya que se evalúa el impacto de la consolidación se usa el factor T , por lo tanto, tenemos que:

$$\frac{\partial C}{\partial T} = \alpha \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} + P_c \frac{\partial C}{\partial Z} \left[\frac{\partial H_s}{\partial Z} + (1 + \alpha) \frac{\partial H_e}{\partial Z} \right] \quad (32)$$

Este modelo presenta cuatro casos de aplicación:

Caso 1: estrato de arcilla con doble drenaje y con contaminante aplicado en la superficie, no se aplica gradiente hidráulico y el esfuerzo total (BY_wL) es aplicado en la superficie.

Caso 2: difusión a través de una capa de arcilla con drenaje (la superficie se considera impermeable) pasando por consolidación debido a la aplicación de una carga externa.

Caso 3: doble drenaje con contaminantes aplicados en la superficie a una concentración constante, carga hidráulica aplicada en la superficie sin incremento de esfuerzo total.

Caso 4: mismo que el Caso 3 con consolidación bajo carga (BY_wZ) y expansión bajo aplicación de carga hidráulica.

2.5.2 MODELO DE H. J. ZHANG, D. S. JENG, D. A. BARRY; B. R. SEYMOUR, Y L. LI, (2012)

2.5.2.1 Sistema de coordenadas

Cuando se estudia una masa de control se analiza una porción de ese material y se le da seguimiento a su movimiento, en este caso, el enfoque Lagrangiano nos permite enfocarnos en el estudio de dichas masas. En contraste, cuando el estudio se centra en los volúmenes de control, se emplea el enfoque Euleriano ya que permite estudiar lo que atraviesa en una sección del espacio (Zhang *et al.*, 2012).

El sistema de descripción Lagrangiana (z,t) es empleado para derivar las ecuaciones de flujo y transporte. Se define $\xi(z,t)$ como el desplazamiento de

partículas con $\xi(z,0)=z$. La relación entre especificación Lagrangiano y Euleriano (ξ,t) en el sistema de coordenadas implica que para cada variación de $F(z,t) = f(\xi(z,t),t)$:

$$\frac{\partial F}{\partial z} = \frac{\partial f}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z}, \quad \frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial \xi} v_s + \frac{\partial f}{\partial t} \quad (33)$$

Donde $v_s = \partial \xi / \partial t$ es la velocidad del sólido.

2.5.2.2 Ecuaciones de consolidación

Las ecuaciones que describen los cambios en la relación de vacíos, $e(z,t)$, son derivadas de las ecuaciones de continuidad de las fases de un sólido y fluido junto con la ley de Darcy. La ecuación de balance de masas de una fase de sólido en forma diferencial es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho_s (1 - n) \frac{\partial \xi}{\partial z} \right] = 0 \quad (34)$$

Donde ρ_s es la densidad de sólidos, $n=e/(1+e)$ es la porosidad, y $n_0=n(z, 0)$ es la porosidad inicial. Para una densidad constante el Jacobiano M para la transformación de coordenadas es:

$$M = \frac{\partial \xi}{\partial z} = \frac{1 - n_0}{1 - n} = \frac{1 + e}{1 + e_0} \quad (35)$$

Donde e_0 es la relación de vacíos inicial.

La ecuación de continuidad para una fase de fluidos es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(n S_r \rho_f \frac{\partial \xi}{\partial z} \right) = - \frac{\partial}{\partial z} (\rho_f q) \quad (36)$$

Donde ρ_f es la densidad del fluido.

Acude a la ley de Darcy, el flujo del fluido esta dado por:

$$q = \frac{k_v}{\rho_f g} \frac{\partial p}{\partial \xi} \quad (37)$$

Donde k_v es la conductividad hidráulica y p es el exceso de presión de poro.

Asumiendo que la densidad del fluido varía con la presión de poro como $\beta \rho_f = \partial \rho_f / \partial p$, substituyendo (36) en la ecuación (37) tenemos que (Zhang *et al.*, 2013):

$$n S_r \beta \frac{\partial \xi}{\partial z} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \left(S_r \frac{\partial \xi}{\partial z} \right) = \frac{1}{\rho_f g} \frac{\partial}{\partial z} \left(k_v \frac{\partial p}{\partial z} \frac{\partial \xi}{\partial z} \right) \quad (38)$$

Donde la compresibilidad del fluido de poro β se estima como:

$$\beta = \frac{S_r}{K_{w0}} + \frac{1 - S_r + r_h S_r}{P_a + P_0} \quad (39)$$

Donde K_{w0} es el módulo volumétrico del agua de poro, r_h es la fracción volumétrica de aire, P_a es la presión de aire del manómetro y P_0 es la presión atmosférica. En un suelo casi saturado $r_h = 0.02$, $S_r = 0.8-1.0$, β cae en el rango de 2×10^{-6} y -2×10^{-7} Pa^{-1} .

Debido a que n y n_0 aparecen simultáneamente, y n es incógnita, la ecuación (38) no se puede resolver en términos de p . Cuando la relación entre la derivada de p y la derivada de e es conocida, la ecuación (38) queda en términos de e . Asumiendo el peso propio como despreciable, la fuerza vertical de equilibrio es:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial z} = 0 \quad (40)$$

Donde σ es el esfuerzo normal del suelo y la coordenada z es vertical hacia arriba. Asumiendo que el esfuerzo normal es positivo ($\sigma = \sigma' + p$), la ecuación (40) lleva a:

$$\frac{\partial p}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial z} (-\sigma' + \sigma) \frac{\partial z}{\partial \xi} = \frac{1 - e_0}{1 - e} \frac{1}{\alpha_v} \frac{\partial e}{\partial z} \quad (41)$$

Donde α_v es el coeficiente de compresibilidad del suelo.

La tasa de cambio de la presión en exceso de poro en el tiempo es:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\sigma - \sigma') = \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{1}{\alpha_v} \frac{\partial e}{\partial t} \quad (42)$$

Substituyendo las ecuaciones (35), (41) y (42) en (16):

$$\left(\frac{e S_r \beta}{(1 + e_0) \alpha_v} + \frac{S_r}{1 + e_0} \right) \frac{\partial e}{\partial t} - \frac{1 + e_0}{\rho_f g} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k_v}{\alpha_v (1 + e)} \frac{\partial e}{\partial z} \right) = - \frac{e S_r \beta}{1 + e_0} \frac{\partial Q}{\partial t} \quad (43)$$

En el caso de saturación $\beta = 0$.

2.5.2.3 Ecuación de Transporte

El transporte de solutos ocurre en la fase sólida y líquida. Para un suelo casi saturado, la mezcla de agua de poro y el aire atrapado es considerada como un fluido homogéneo. Debido a las burbujas de aire los compuestos orgánicos volátiles (DOV) transportados por la difusión de gas pueden ser despreciados en un suelo casi saturado. Así la ecuación de conservación de masa para un soluto en la fase sólida es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[(1 - n) \rho_s S \frac{\partial \xi}{\partial z} \right] = f'_{a \rightarrow s} \quad (44)$$

Donde S es la masa de soluto absorbido o dentro de la fase sólida por unidad de masa, $f'_{a \rightarrow s}$ es la tasa de pérdida de soluto en la fase líquida por medio de la sorción.

La ecuación de conservación de masa para un soluto en fase líquida es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(nS_r c_f \frac{\partial \xi}{\partial z} \right) = - \frac{\partial J_f}{\partial z} - f'_{a \rightarrow s} \quad (45)$$

Donde c_f es la concentración de soluto en el poro. En la ecuación (45) el término $\delta \xi / \delta z$ representa el cambio volumétrico y J_f representa el flujo de soluto en la fase líquida:

$$J_f(z, t) = nS_r (v_f - v_s) c_f - \frac{nS_r D}{M} \frac{\partial c_f}{\partial z} \quad (46)$$

Donde D es el coeficiente de dispersión hidrodinámica y es la suma del coeficiente de difusión (D_e) y el coeficiente de dispersión mecánica (D_m):

$$D_m = \alpha_L (v_f - v_s) \quad (47)$$

Donde α_L es el coeficiente de dispersión, v_f es la velocidad de fluido en el poro y $v_f - v_s$ es la velocidad relativa del fluido en el poro.

Con base en las ecuaciones (45) y (46), además de la ecuación de Darcy y las ecuaciones de balance es posible expresar (Zhang *et al.*, 2013):

$$\begin{aligned} & \left(S_r \frac{e}{1 + e_0} + \frac{\rho_s K_d}{1 + e_0} \right) \frac{\partial c_f}{\partial t} \\ &= S_r \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{e(1 + e_0)}{(1 + e)^2} D \frac{\partial c_f}{\partial z} \right) + \frac{k_v}{\rho_f g} \frac{1 + e_0}{\alpha_v (1 + e)} \frac{\partial e}{\partial z} \frac{\partial c_f}{\partial z} \\ &+ \beta \left[S_r \frac{e}{1 + e_0} \left(\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{1}{\alpha_v} \frac{\partial e}{\partial t} \right) - \frac{k_v}{\rho_f g \alpha_v^2} \frac{1 + e_0}{1 + e} \left(\frac{\partial e}{\partial z} \right)^2 \right] c_f \end{aligned} \quad (48)$$

Donde K_d corresponde al coeficiente de partición.

Este modelo presenta tres casos especiales:

Caso 1: Suelo saturado con deformaciones finitas, permite la consideración de los efectos en las variaciones del coeficiente de consolidación y el coeficiente de

transporte (coeficiente de compresibilidad, α_v , conductividad hidráulica y dispersión hidrodinámica).

Caso 2: Modelo de deformaciones pequeñas, considera porosidad constante.

Caso 3: Suelo casi saturado con no deformación, considera $e = e_0$.

2.5.3 MODELO DE Z. LI, Z. ZHOU, Y. DAI, Y B. DAI, (2019)

2.5.3.1 Sistema de coordenadas

La teoría de consolidación con pequeñas deformaciones usa el sistema de coordenadas Euleriano, donde la ecuación involucra la integración de un dominio que varía con el tiempo.

$$\frac{\partial \xi}{\partial z} = \frac{1 - n_0}{1 - n} = \frac{1 + e}{1 + e_0} \quad (49)$$

2.5.3.2 Ecuación de consolidación

El agua en un acuífero fluye en dirección vertical, atravesando los estratos de menor resistencia, por lo que para describir el proceso de consolidación unidimensional de una arcilla saturada (deformaciones más grandes que el espesor del estrato compresible) se asume que las partículas de suelo y el agua de los poros son incompresibles, por lo cual, la ecuación de equilibrio vertical de la masa de suelo es: (Gibson *et al.*, 1981):

$$\frac{\partial \sigma}{\partial \alpha} = \frac{(G_s + e)\gamma_w}{1 + e_0} \quad (50)$$

Donde σ es el esfuerzo vertical total; G_s es la gravedad específica de las partículas de suelo y γ_w es el peso específico del agua.

Ecuación de equilibrio vertical del agua del poro:

$$\frac{\partial u}{\partial \alpha} = \frac{\partial(u_{hs} + u_h + p)}{\partial \alpha} \quad (51)$$

Donde u es la presión total de poro, u_{hs} es la presión hidrostática de agua de poro, u_h es la salida a largo plazo en la presión del poro, y p es el exceso de presión de agua.

Equilibrio en la fase líquida y principio de esfuerzo efectivo:

$$\frac{\partial u_{hs}}{\partial \alpha} = \frac{(1+e)\gamma_w}{1+e_0}, \quad \sigma = \sigma' + u \quad (52)$$

Ley de Darcy:

$$\begin{aligned} \frac{e}{1+e}(v_w - v_s) &= -\frac{k_v(1+e_0)}{\gamma_w(1+e)} \left(\frac{\partial u}{\partial \alpha} - \frac{(1+e)\gamma_w}{(1+e_0)} \right) \\ &= -\frac{k_v(1+e_0)}{\gamma_w(1+e)} \left(\frac{\partial u_h}{\partial \alpha} + \frac{\partial p}{\partial \alpha} \right) \end{aligned} \quad (53)$$

Donde v_w y v_s son las velocidades del agua de poro y la de la partícula de suelo, k_v es el coeficiente de permeabilidad vertical de la arcilla.

Ecuación de continuidad de flujo del agua en el poro:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{e}{1+e}(v_w - v_s) \right] = -\frac{1}{1+e_0} \frac{\partial e}{\partial t} \quad (54)$$

Ecuación de consolidación:

$$\frac{1}{\gamma_w} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{k_v(1+e_0)}{1+e} \frac{\partial p}{\partial \alpha} \right] = -\frac{1}{1+e_0} \frac{\partial e}{\partial t} \quad (55)$$

$$m_{v1} = -\frac{1}{1+e} \frac{\partial e}{\partial \alpha'} = \frac{1+e}{1+e_0} m_v = \text{constante} \quad (56)$$

$$k_v = k_{v0} \left(\frac{1+e}{1+e_0} \right)^2 \quad (57)$$

Donde $c_{v0} = k_{v0}/(m_{v1} \gamma_w)$ es el coeficiente de consolidación, k_{v0} es la conductividad hidráulica inicial y m_v y m_{v1} son los coeficientes de compresibilidad volumétrica de deformaciones pequeñas (deformación menor al 10% del espesor del estrato del acuitardo) y de grandes deformaciones (mayores al 10% del espesor del acuitardo), respectivamente (Li *et al.*, 2019).

La relación entre la relación de vacíos e y la presión de poro es:

$$\frac{1+e}{1+e_0} = \exp(-m_{v1}(\sigma - u - \sigma'_0)) \quad (58)$$

Donde σ'_0 es el esfuerzo efectivo inicial.

Sustituyendo las ecuaciones anteriores tenemos que:

$$c_{v0} \left[\frac{\partial^2 s}{\partial \alpha^2} - S_s \left(\frac{\partial s}{\partial \alpha} \right)^2 \right] = \frac{\partial s}{\partial t} \quad (59)$$

Esta ecuación describe la variación de la reducción en un acuitardo deformable. Esta ecuación usa un sistema de coordenadas Lagrangianas que se mueve con la fase sólida, lo que equivale a una frontera movible para ser modelada apropiadamente.

2.5.3.3 Ecuación de transporte

La ecuación para transporte de solutos a través de una capa de suelo con consolidación unidimensional y deformaciones grandes se ha derivado en términos de coordenadas Lagrangianas (α , t) como:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(D \frac{e(1+e_0)}{(1+e)^2} \frac{\partial C}{\partial \alpha} \right) - v_d \frac{\partial C}{\partial \alpha} = \frac{e}{1+e_0} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{e}{1+e_0} \frac{\partial C_s}{\partial t} \quad (60)$$

Donde D es el coeficiente de dispersión hidrodinámica, C_s es la concentración del contaminante en la fase sólida, C es la concentración del contaminante en la fase líquida, v_d es la velocidad de flujo del Darcy en el acuitardo, v_w es la velocidad del fluido en el poro.

Para resolver la ecuación anterior se requiere una relación constitutiva entre la masa del contaminante absorbido en la fase de sólidos y la concentración del contaminante en el agua de los poros. La sorción se asume que varía linealmente como:

$$C_s = \rho_s K_d C \quad (61)$$

Donde ρ_s es la densidad de sólidos, K_d es el coeficiente de partición del contaminante. Esta consideración de sorción lineal es válida en la condición de baja concentración.

Asumiendo pequeñas deformaciones ($e \approx e_0$) y propiedades del material constantes (k_v, S_s) tenemos que:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \left(D \frac{\partial C}{\partial \alpha} \right) - \frac{v_d}{n} \frac{\partial C}{\partial \alpha} = \left(1 + \frac{(1-n)\rho_s K_d}{n} \right) \frac{\partial C}{\partial t} \quad (62)$$

2.5.4 MODELO DE S. G. FITYUS, D. W. SMITH, Y J. R. BOOKER, (1999)

2.5.4.1 Contenido de agua en un suelo no saturado

Existen diferentes mecanismos para describir el movimiento del agua en el suelo: por medio de la fuerza de gravedad, succión (fuerzas capilares), movimiento de vapor de agua y difusión (Lemon, 1956), por lo cual existen varios enfoques para

modelar el flujo de humedad en suelos no saturados. Fityus y Smith (1994) emplearon la ecuación de Richard para modelar el movimiento del agua en el suelo:

$$D_m(\vartheta) \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial z^2} - \alpha D_m(\vartheta) \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (63)$$

Donde z es la posición vertical, t es el tiempo, ϑ es el contenido volumétrico de agua del suelo, $D_m(\vartheta)$ es la función de humedad difusiva, α es un parámetro de textura y estructura que expresa la importancia de las fuerzas de gravedad y capilaridad en el movimiento del agua en suelos no saturados (Fityus *et al.*, 1999) y θ es una variable de conveniencia matemática obtenida de la aplicación de la transformación de Kirchhoff al contenido volumétrico de agua ϑ .

$$\theta = \int_{\vartheta_*}^{\vartheta} D_m(\vartheta) d\vartheta \quad (64)$$

Donde θ es un valor de referencia, en suelos secos ($\vartheta = 0$). En varios casos, una buena aproximación al comportamiento real del suelo se encuentra adoptando una expresión exponencial para la difusividad de humedad.

$$D_m(\vartheta) = D_{mo} e^{\gamma \vartheta} \quad (65)$$

Donde D_{mo} es la difusividad limitante (a medida que el contenido de agua se aproxima a cero), y γ es un exponente empíricamente ajustado. Sustituyendo esta aproximación para la ecuación (63) obtenemos una relación entre los contenidos de agua reales y los de la transformación de Kirchhoff.

$$\theta(\vartheta) = \frac{D_{mo}(e^{\gamma \vartheta} - 1)}{\gamma} \quad (66)$$

Para un solo estrato de suelo, con contenidos de agua ϑ_T y ϑ_B en la superficie y el fondo del estrato respectivamente, la solución de estado estable de la ecuación (63) es:

$$\theta(z) = \frac{\theta_B - \theta_T e^{\alpha H}}{1 - e^{\alpha H}} + \left(\frac{\theta_T - \theta_B}{1 - e^{\alpha H}} \right) e^{\alpha z} \quad (67)$$

Donde H es el espesor del suelo, y la distribución de contenido volumétrico de agua es estimada por:

$$\vartheta(z) = \frac{1}{\gamma} \ln \left\{ \frac{\gamma \left[\frac{\theta_B - \theta_T e^{\alpha H}}{1 - e^{\alpha H}} + \left(\frac{\theta_T - \theta_B}{1 - e^{\alpha H}} \right) e^{\alpha z} \right]}{D_{mo}} + 1 \right\} \quad (68)$$

Y el flujo de Darcy, v_z a través de la capa de suelo es estimada como:

$$v_z = \alpha \frac{\theta_B - \theta_T e^{\alpha H}}{1 - e^{\alpha H}} \quad (69)$$

Para una capa de suelo las ecuaciones (68) y (69) se evalúan directamente. Sin embargo, si se trata de un suelo estratificado horizontalmente, la continuidad del flujo de humedad y la succión son aplicadas al suelo en las interfaces de las capas.

El parámetro de estructura y textura α es obtenido a partir de la siguiente ecuación:

$$K = e^{\alpha \Psi} \quad (70)$$

Donde K es la conductividad hidráulica y Ψ es la presión capilar, presión negativa, carga hidráulica, etc.

Por otra parte, α , es definido por Philip (1969) como el potencial basado en unidades de peso de agua con dimensiones de longitud, un valor alto de α corresponde a una infiltración dominada por la gravedad, mientras que un valor bajo indica infiltración dominada por capilaridad), típicamente α es próximo a 0.01 cm^{-1} , y su rango de valores es de 0.05 a 0.002 cm^{-1} .

2.5.4.2 Ecuación de transporte

La ecuación de dispersión-advención es implementada como la ecuación diferencial gobernante que describe el transporte de contaminantes a través de un suelo parcialmente saturado. La forma uni-dimensional (1D) de la ecuación con equilibrio lineal de sorción controlada es:

$$\vartheta D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + \left(\vartheta \frac{\partial D}{\partial z} + D \frac{\partial \vartheta}{\partial z} - \vartheta v_t \right) \frac{\partial c}{\partial z} = (\vartheta + \rho_d K_d) \frac{\partial c}{\partial t} \quad (71)$$

Donde c es la concentración del contaminante, v_t es la velocidad lineal del fluido de poro en la dirección z , D es el coeficiente de dispersión hidrodinámica, ρ_d es la densidad seca del suelo, K_d es el coeficiente de partición, ϑ es el contenido volumétrico de agua en el suelo.

La ecuación anterior puede ser simplificada introduciendo la transformación de Laplace definida como:

$$\bar{c}(s) = \int_0^{\infty} c(t) e^{-st} dt \quad (72)$$

Donde $\bar{c}(s)$ es la función de concentración transformada en términos del parámetro s .

Asumiendo el suelo como inicialmente libre de contaminante, la ecuación (71) es equivalente a:

$$\vartheta D \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} + \left(\vartheta \frac{\partial D}{\partial z} + D \frac{\partial \vartheta}{\partial z} - \vartheta v_t \right) \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = (\vartheta + \rho_d K_d) s \bar{c} \quad (73)$$

2.6 MODELO DE ANALOGÍA TÉRMICA DE ZHANG (2004)

La existencia de una analogía térmica es útil debido a que la solución de ecuaciones diferenciales puede ser visto desde una perspectiva termodinámica, ya

que cuenta con una amplia variedad de ecuaciones resueltas para distintos problemas. Debido a lo anterior, el fenómeno de expansión y contracción en suelos puede entenderse al relacionarlo a la pérdida (contracción de la masa sólida, es decir, pérdida de agua) y ganancia de calor (expansión de la masa sólida, es decir, ganancia de agua) (Zhang, 2004).

Las relaciones fundamentales entre el análisis mecánico y análisis térmico son (Zhang, 2004):

a) Variable de estado: la masa de agua (kg) en el problema acoplado de consolidación corresponde a la energía (J) en el problema acoplado térmico;

b) Variable de esfuerzo: la succión mátrica (kPa) corresponde a la temperatura en el análisis térmico.

Las propiedades del suelo pueden ser transformadas hacia un problema térmico sustituyendo la variable de estado de un problema a otro como se ilustra en la Tabla 2.

Tabla 2. Comparaciones de símbolos entre la consolidación y termodinámica en problemas acoplados

Teoría de consolidación	Símbolo	Termodinámica	Símbolo
Esfuerzo efectivo	$\sigma - u_a$	Esfuerzo	σ
Deformación	ε	Deformación	ε
Desplazamiento	u, v, w	Desplazamiento	u, v, w
Módulo de Young	E	Módulo de Young	E
Relación de Poisson	μ	Relación de Poisson	μ
Coeficiente de expansión debido a la variación de presión	α	Coeficiente de expansión debido a la variación de temperatura	α
Coeficiente de permeabilidad	k	Coeficiente de conductividad	k

Capacidad específica de agua	C_w	Capacidad específica de calor	C_T
Peso unitario seco	ρ_d	Densidad	ρ
Variación volumétrica del contenido de agua	$-m_v \partial(\sigma_m - u_a) / \partial t$	Generación de calor	S
Tiempo	t	Tiempo	t

El algoritmo para el estudio hidro-mecánico de un suelo no saturado implica diversas etapas como se ilustra en la Figura 9, las cuales se definirán a continuación.



Figura 9. Algoritmo del estudio hidro-mecánico de un suelo no saturado

2.6.1 PROPIEDADES HIDRÁULICAS DE FLUJO

Las propiedades hidráulicas son indicadores para modelar el flujo de energía y materia en la zona no saturada del suelo (Espejo *et al.*, 2014). Además de la función de conductividad hidráulica que varía con los cambios en la ψ_m del suelo (como se definió en el Capítulo 2.2), encontramos la difusividad del agua en el suelo ($D(\theta)$) como otra propiedad de interés, debido a que la transferencia de agua es una propiedad del transporte de especies químicas debido a un gradiente de concentraciones (es decir, de una región de mayor concentración a una región de menor concentración) (Klute & Dirksen, 1986). En ese sentido, la función de difusividad puede ser expresada como se indica en la Ecuación (74):

$$k(\theta) = D(\theta)(d\psi/d\theta) \quad (74)$$

Donde $D(\theta)$ es la función de difusión, $k(\theta)$ es la conductividad hidráulica, y $(d\psi/d\theta)$ es la pendiente de la SWRC.

La formulación básica del modelo de flujo se realiza a través de la aplicación de la ley de Darcy y las ecuaciones de continuidad de flujo. La ecuación de difusión para describir el flujo en la masa no saturada considerando el suelo como un cuerpo homogéneo e isótropo puede ser escrita como la Ecuación (75):

$$\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2 u}{\partial^2 y} + \frac{\partial^2 u}{\partial^2 z} + \frac{f(x, y, z, t)}{p} = \frac{1}{D} \frac{\partial u}{\partial t} \quad (75)$$

Donde u es la succión del suelo, D es el coeficiente de difusión, p es la conductividad hidráulica saturada, t es el tiempo, y el conjunto x, y, z, t representan las coordenadas espaciales.

El coeficiente de difusión D es análogo al coeficiente de consolidación en la teoría clásica y su magnitud define la razón de difusión bajo gradientes de succión (Li, 2006).

Adicionalmente, el flujo de materia (líquidos) requiere la comprensión de los cambios volumétricos (expansión y contracción) debido a las variaciones en el contenido de líquidos (influenciadas por factores climáticos como la precipitación, temperatura, entre otros) presentes en un espesor de terreno conocido como zona activa (López Lara, 2002). Por lo cual, se requiere conocer tanto la naturaleza del suelo como la zona susceptible a cambios de humedad en un tiempo dado (Nelson *et al.*, 2001).

2.6.2 ANÁLISIS DE FLUJO

2.6.2.1 MODELO DE THORNTHWAITE PARA ESTIMAR LA EVAPOTRANSPIRACIÓN

El proceso de evapotranspiración requiere la precipitación mensual, temperatura media mensual, valores máximos e iniciales de almacenamiento de agua, número de días al mes y duración del día. Los valores de precipitación y temperatura son obtenidos de estaciones climáticas. El almacenamiento de agua depende del clima y las condiciones del sitio, debido a lo anterior se desarrolló un modelo relativamente simple comparado con otros modelos en la literatura (en términos de los parámetros involucrados) (Yue & Bulut, 2014).

$$h_i = (0.2t_i)^{1.514} \quad (76)$$

Donde h_i es el índice de calor mensual, t_i es la temperatura promedio mensual en °C, y el índice de calor anual se calcula como:

$$H_y = \sum_{i=1}^{12} h_i \quad (77)$$

Donde H_y es el índice de calor anual.

El potencial de evapotranspiración sin ajuste e_i para un mes de 30 días.

$$e_i = 1.6 \left(\frac{10t_i}{H_y} \right)^a \quad (78)$$

El valor de evapotranspiración por mes en cm es como sigue:

$$a = 6.75 \times 10^{-7} H_y^3 - 7.71 \times 10^{-5} H_y^2 + 0.017921 H_y + 0.49239 \quad (79)$$

Una vez calculado lo anterior se determina el potencial de evapotranspiración ajustado aplicando un factor de corrección y el número de días como:

$$PE_i = \frac{(e_i d_i n_i)}{30} \quad (80)$$

Donde PE es el potencial de evapotranspiración para el mes i , d_i es el factor de corrección para la longitud diaria (propuesto por McKeen y Johnson en 1990), n_i es el número de días.

2.6.2.2 MODELO DE PENMAN-MONTEITH PARA ESTIMAR LA EVAPOTRANSPIRACIÓN

Uno de los métodos empíricos desarrollados para evaluar la evapotranspiración utilizando diferentes variables climáticas es la de Penman, la cual se basa en la combinación del balance de energía y una formula aerodinámica como:

$$ET = \frac{0.408 \Delta (R_n - G) + \gamma \frac{900}{t+273} u_2 (e_s - e_a)}{\Delta + \gamma (1 + 0.34 u_2)} \quad (81)$$

Donde ET es la tasa de evapotranspiración (mm/d), t es la temperatura media (°C) a 2 m de altura, u_2 es la velocidad del viento (m/s) a 2 m de altura, R_n es la radiación neta en la superficie del cultivo (MJ/m^2d), G es la densidad de flujo de calor del

suelo, $(e_s - e_a)$ es el déficit de presión de vapor de saturación, Δ es la pendiente de la curva de presión de vapor ($kPa/^\circ C$), y γ es la constante psicométrica ($kPa/^\circ C$) (Zotarelli *et al.*, 2010).

2.6.3 GEOMETRÍA Y MALLADO

La geometría del problema de estudio está definida a partir de un elemento finito cuadrangular que resuelve problemas térmicos (PLANE55) en lenguaje de diseño paramétrico Ansys (APDL por sus siglas en inglés). Este elemento finito se compone de un material ortotrópico de cuatro nodos con un solo grado de libertad y es aplicable en un análisis estacionario o transitorio. Además, si el modelo es sujeto a un análisis estructural, el elemento 2-D se sustituye por un elemento finito estructural equivalente (PLANE182) (Ansys Mechanical, 2017).

2.6.3.1 FUNDAMENTOS DE FLUJO DE CALOR

Los fundamentos del flujo de calor incluyen la convección y conducción, los cuales siguen la primera ley de la termodinámica como:

$$\rho c \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \{v\}^T \{L\} T \right) + \{L\}^T \{q\} = q \quad (82)$$

$$\{L\} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{Bmatrix} \quad (83)$$

$$\{v\} = \begin{Bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{Bmatrix} \quad (84)$$

Donde ρ es la densidad, c es el calor específico, T es temperatura, t es tiempo, $\{L\}$ es el vector operador, $\{v\}$ es el vector de velocidad del transporte de calor (para elementos PLANE55 y SOLID70), $\{q\}$ es el vector de flujo de calor y q es la tasa de generación de calor.

Los términos $\{L\}T$ y $\{L\}^T\{q\}$ se pueden interpretar como ∇T y $\nabla^*\{q\}$, respectivamente, donde ∇ es un gradiente y ∇^* es el operador divergencia.

Por medio de la ley de Fourier se relaciona el flujo de calor a los gradientes térmicos:

$$\{q\} = -[D]\{L\}T \quad (85)$$

Donde D es la matriz de conductividad con la forma:

$$[D] = \begin{bmatrix} K_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & K_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & K_{zz} \end{bmatrix} \quad (86)$$

Donde K_{xx} , K_{yy} y K_{zz} = conductividad en el elemento en direcciones x , y , y z , respectivamente.

Combinando la Ecuación (82) y Ecuación (85):

$$\begin{aligned} & \rho c \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial t} + v_y \frac{\partial T}{\partial t} + v_z \frac{\partial T}{\partial t} \right) \\ & = q + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (87)$$

Tres tipos de condiciones de frontera son consideradas en el análisis:

1. La temperatura específica que actúa en la superficie S_1 :

$$T = T_{s^*} \quad (88)$$

Donde T^* es la temperatura especificada.

2. El flujo de calor actuando en la superficie S_2 :

$$\{q\}^T \{n\} = -q^* \quad (89)$$

Donde $\{n\}$ es un vector normal a la superficie del elemento y q^* es el flujo de calor, Figura 10a.

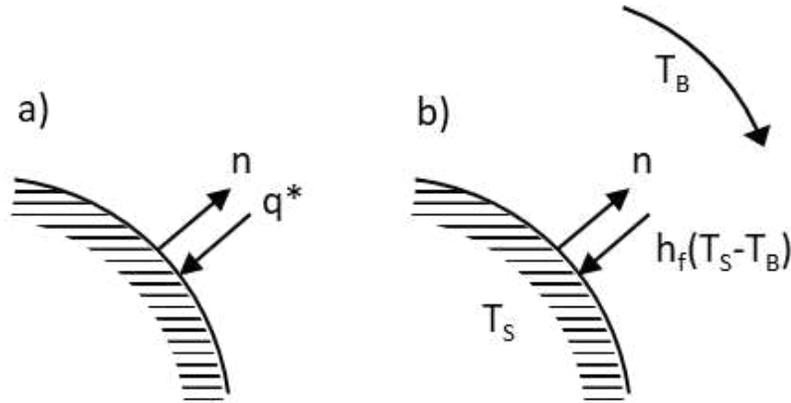


Figura 10. A) Flujo de calor y b) Superficies de convección

3. La superficie de convección actuando en la superficie S_3 :

$$\{q\}^T \{n\} = h_f(T_s - T_B) \quad (90)$$

Donde h_f es el coeficiente de transferencia de calor, T_B es la temperatura interna del fluido adyacente y T_s es la temperatura en la superficie del modelo, Figura 10b.

2.6.3.2 ACOPLAMIENTO TERMO-MECÁNICO

El acoplamiento es realizado conociendo que para cada nodo existen dos grados de libertad para los desplazamientos (UX, UY), mientras que la presión de poro se considera igual en todos los sentidos, de tal manera que el acoplamiento de deformación presión considera tres grados de libertad (Figura 11).

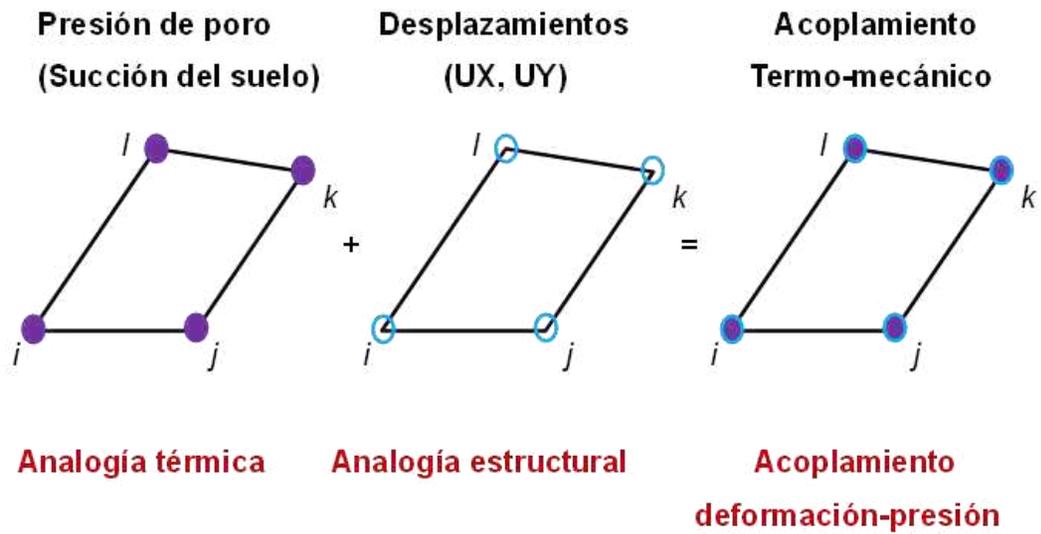


Figura 11. Características de los elementos cuadrangulares finitos del acoplamiento termo-mecánico

2.6.3.3 ANÁLISIS DE ESFUERZOS DE SUCCIÓN EN EL MEDIO

La siguiente fase de esta etapa es la determinación de la succión para cada periodo de tiempo de estudio. El algoritmo obtiene los esfuerzos internos en el suelo debido a las succiones resultantes del periodo de estudio por medio del cálculo de esfuerzos de succión como se indica en el procedimiento de la Figura 12.

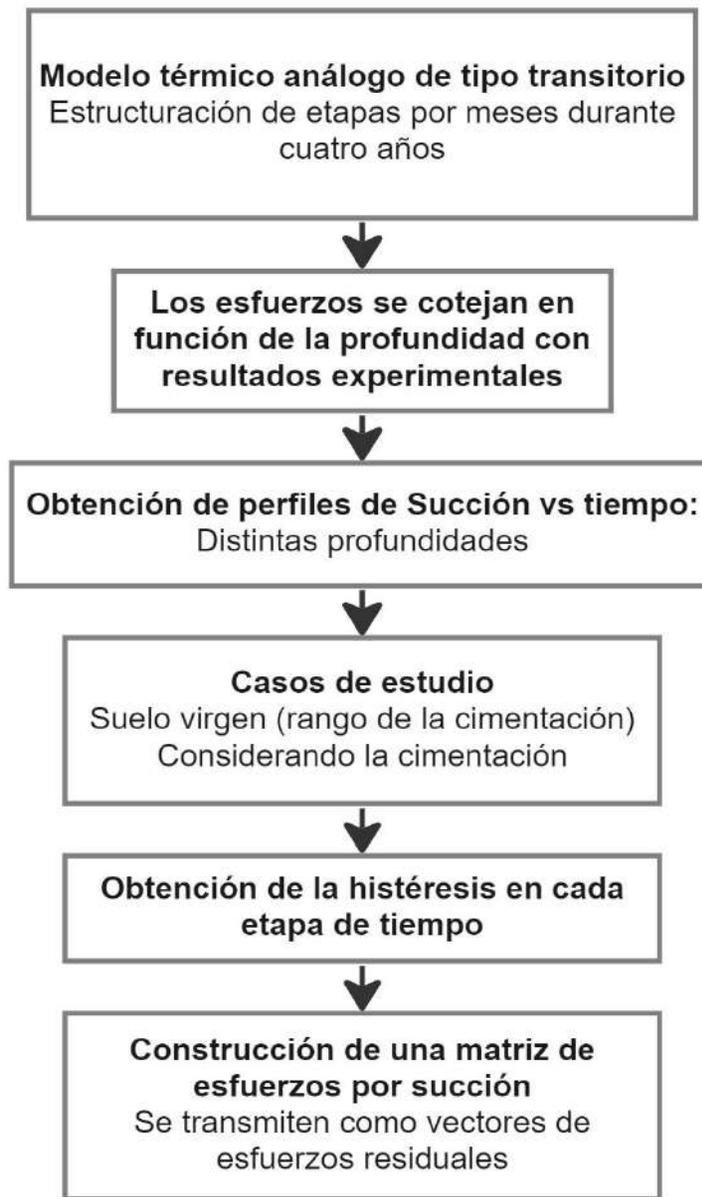


Figura 12. Algoritmo del análisis de flujo

La SWRC y el esfuerzo de succión son las características más importantes de un suelo no saturado, debido a que influyen su comportamiento mecánico (Feng & Zhang, 2021). El comportamiento de las fuerzas capilares es función de las propiedades del suelo (tamaño de partícula y tamaño de poro), grado de saturación, succión mátrica y las propiedades del fluido (ángulo de contacto, tensión superficial)

(Farouk *et al.*, 2004), de modo que la manifestación de fuerzas capilares en el comportamiento mecánico de los suelos no saturados a nivel macroscópico se asocia aparentemente a la resistencia al corte (Rahardjo *et al.*, 2019) y los cambios de volumen observados bajo cambios en el contenido de líquidos (colapso) (Lu & Likos, 2006).

El enfoque utilizado para describir el estado de esfuerzos en la zona no saturada es el esfuerzo modificado de Bishop (1959), el cual incluye una modificación del esfuerzo clásico en la ecuación de Terzaghi como se indica en la Ecuación (91):

$$\sigma' = \sigma - u_a + \sigma'_s \quad (91)$$

Donde $\sigma'_s = \chi(u_a - u_w)$ el cual corresponde al esfuerzo de succión, $\sigma - u_a$ es el esfuerzo neto menos la presión de agua (esfuerzo efectivo) y $u_a - u_w$ es ψ_m . Para $\chi=0$ (condición seca) y para $\chi=1$ (condiciones saturadas) la Ecuación (91) se reduce al esfuerzo efectivo de Terzaghi (Lu & Likos, 2006).

El esfuerzo de succión es una función del sistema agua-suelo expresada como se indica en la Ecuación (92):

$$\sigma'_s = f(u_a - u_w) = \chi(u_a - u_w) \quad (92)$$

Donde χ es considerado como función del grado de saturación. Esta ecuación bajo condiciones saturadas es igual a la ecuación de Terzaghi para esfuerzos efectivos (Lu & Likos, 2006; Song, 2014).

2.6.4 ANÁLISIS MECÁNICO

Los cambios en la presión de poro del análisis de flujo se utilizan como un dato de entrada en el análisis de deformación del modelo mecánico. El estado de fluencia es revisado en los elementos en función de la teoría del estado crítico.

El punto de fluencia del suelo se encuentra en los ejes de esfuerzo desviador ($q=\sigma_1-\sigma_3$) y esfuerzo efectivo medio ($p'=\frac{1}{3}(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3)$). Con el incremento de la carga axial, el suelo debajo de la superficie de falla (en el espacio $p'-q$) *estará* en estado elástico, mientras que al sobrepasar esta superficie (en el punto $p'_c/2$) se entrará en una región plástica aproximándose a la falla (Chen *et al.*, 2021), la cual ocurrirá en la intersección entre la línea de estado crítico ($M=q/p'$) y la línea de tensiones totales ($q=3p'$) (Graham *et al.*, 2001) cómo se observa en la Figura 13.

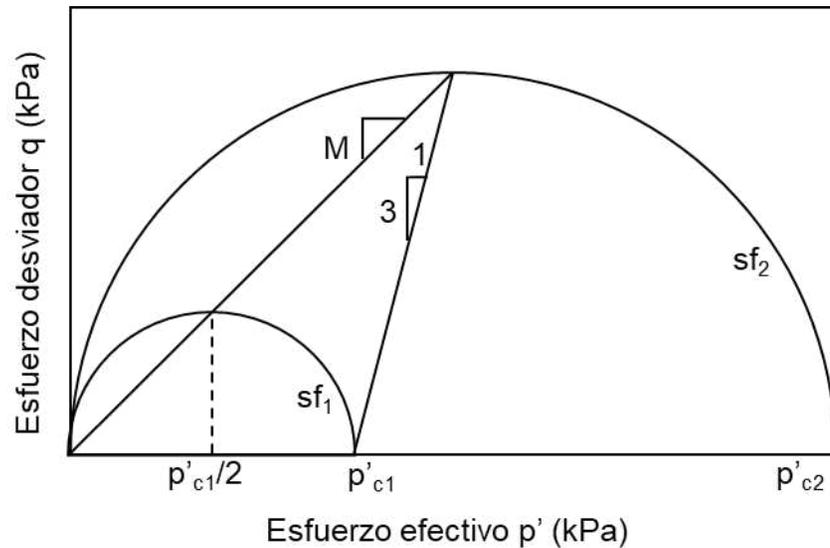


Figura 13. Diagrama del Modelo de estado crítico en suelos, q vs p' , superficie de falla (sf_1) y esfuerzo de preconsolidación p'_c

Esta superficie de falla (comportamiento elastoplástico) es modelado de acuerdo a la Ecuación (93):

$$f = q^2 - M^2 p' (p'_c - p') \quad (93)$$

Donde $M = 6 \sin \varphi / (3 - \sin \varphi)$ (pendiente de la línea de estado crítico), φ es el ángulo de fricción interna, p'_c es la carga de preconsolidación, q es el esfuerzo desviador, p' es el esfuerzo efectivo medio (Cao *et al.*, 2001).

Los componentes de esfuerzo efectivo: σ'_r , σ'_θ y σ'_z permanecen sin cambio en la zona plástica, y el esfuerzo de corte $\tau_{rz,p}$ en el instante en que el suelo se hace plástico puede ser determinado por la Ecuación (94):

$$\tau_{rz,p} = p'_0 \sqrt{\frac{(R-1)(M^2 + \eta_0^2)}{3}} \quad (94)$$

Donde $\eta_0 = q_0/p'_0$ es la relación de esfuerzo inicial, $R = p'_{c0}/p'_0$ es el grado de sobreconsolidación, p'_{c0} es el máximo esfuerzo de preconsolidación y p'_0 es el esfuerzo promedio *in-situ*.

3. METODOLOGÍA

La metodología empleada para lograr el objetivo de esta investigación se dividió en 4 etapas: 1) extracción de un suelo fino de la región de Jurica, Qro., el cual se disgregó, tamizó por la malla No. 4 y separó en 3 porciones de 10 kg para su análisis. La caracterización geotécnica del suelo, de una de estas partes sin contaminar, se realizó de acuerdo a la normativa oficial vigente, la cual incluyó: ensayos de granulometría, potencial de hidrógeno, límites de Atterberg, permeabilidad, isothermas de adsorción, corte directo, difracción de rayos X y consolidación para conocer el estado y clasificación del suelo antes de ser contaminado, 2) contaminación con método manual de las dos porciones de suelo alterado restante por medio de la aplicación de una solución de arsénico en dos grados de contaminación (25 mg/kg y 50 mg/kg) y caracterización de los suelo contaminados pasado un tiempo de curado de 6 semanas con las pruebas realizadas en el paso anterior, a fin de conocer los cambios en las propiedades hidromecánicas y químicas de la contaminación con arsénico, ya que estas propiedades influyen en el flujo del contaminante en la masa de suelo, 3) obtención de las curvas de retención agua-suelo-arsénico por medio de la modificación del método de papel de filtro para ambas concentraciones de arsénico, las cuales resultaron en dos ecuaciones de calibración para obtener la succión mátrica y succión total de suelos contaminados con arsénico, una vez realizado lo anterior, las curvas de retención se cotejaron con el modelo de Fuentes que utiliza los datos de granulometría, y la ecuación de van Genuchten, lo que permitió validar las ecuaciones propuestas en la calibración del método de papel de filtro, y 4) evaluación del modelo de flujo por medio de una analogía térmica utilizando el método de elemento finito (MEF) en el software Mechanical APLD, el cual utilizó como datos de entrada las curvas de retención del suelo contaminado en la concentración crítica de arsénico (25 mg/kg) y las funciones de conductividad hidráulica obtenidas en la etapa 3, ésta última etapa incluyó analizar dos tipos de

descarga: puntual y transitoria, a fin de obtener el perfil de concentraciones en la masa de suelo.

El diagrama de flujo ilustra el diseño experimental que considera dos variables independientes y se definen a continuación en la Figura 14.

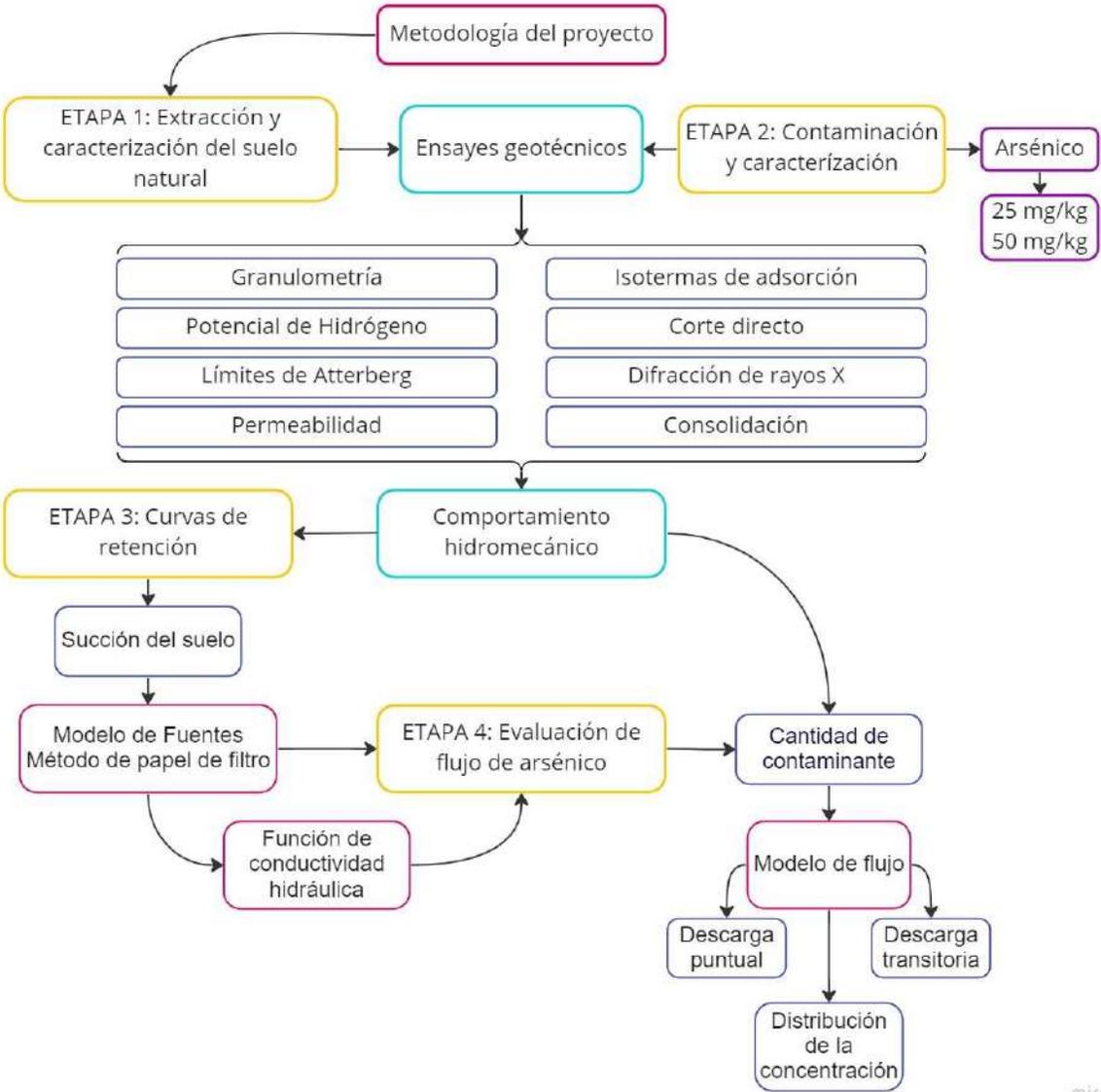


Figura 14. Diseño experimental del proyecto en sus 4 etapas

3.1 LOCALIZACIÓN DEL SUELO A ESTUDIAR

Debido a la presencia de suelos expansivos en la ciudad de Querétaro, causante de severos daños y objeto de estudio en diversas investigaciones se seleccionó el fraccionamiento de Jurica, ubicado entre los 20°38'49.3" de latitud norte y 100°26'09.2" latitud oeste (Figura 15).

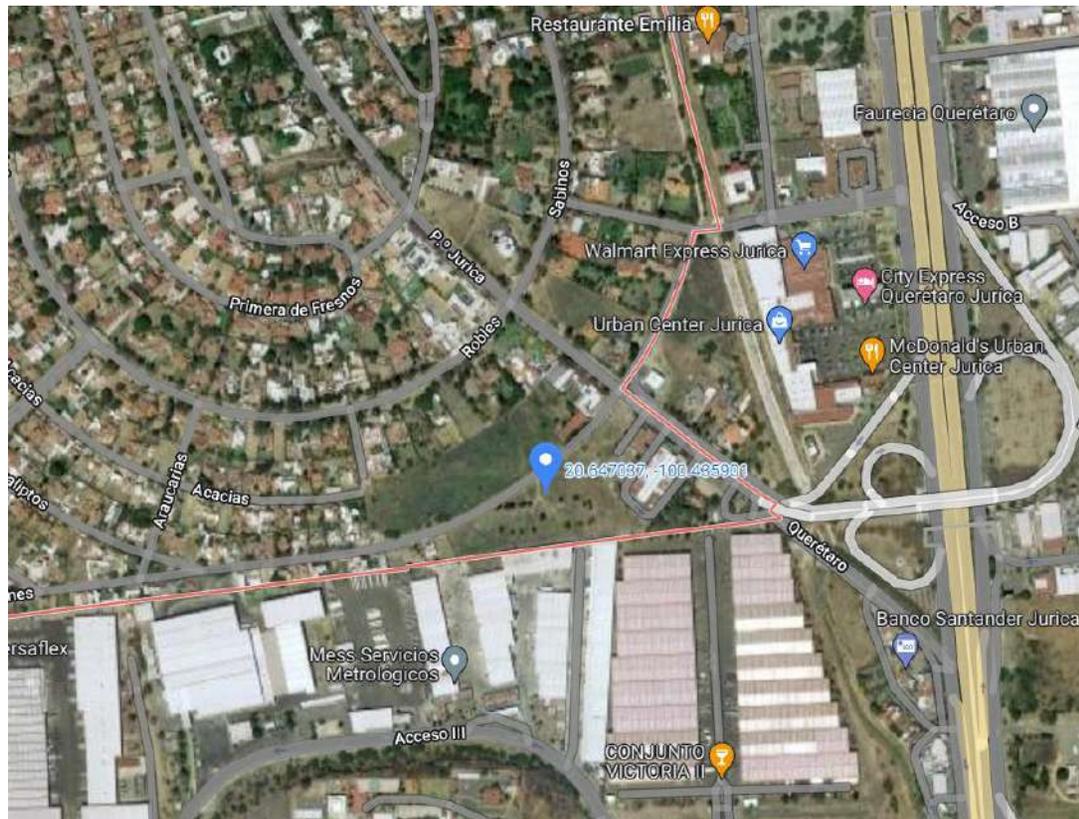


Figura 15. Localización del pozo a cielo abierto donde se extrajo la muestra de suelo natural.

Se excavó un pozo a cielo abierto (PCA) y se obtuvieron muestras inalteradas y alteradas a una profundidad máxima de 2.50 m. Las muestras obtenidas se identificaron y se transportaron al Laboratorio de Geotecnia Ambiental, donde se mantuvieron en un ambiente de $20^{\circ} \text{C} \pm 1^{\circ} \text{C}$ en un cuarto de temperatura controlada.

Una vez identificadas las muestras se determinó su contenido de líquidos y su peso específico de acuerdo a los estándares ASTM D2216 y ASTM D7263-09, respectivamente.

3.2 GRADO DE COMPACTACIÓN

El grado de compactación modifica los vacíos del suelo y por consiguiente los valores de conductividad hidráulica, es decir, la velocidad de infiltración cambia. Por lo cual, para simular las características del suelo con una fuente de contaminantes constante se utilizaron las características del sitio de muestreo.

3.3 CONTENIDO DE LÍQUIDO (AGUA Y/O CONTAMINANTE)

Diferentes contenidos de líquido afectan el valor de la succión en el suelo, por lo cual, en este caso, el contenido de líquido del suelo se obtuvo empleando el estándar ASTM D-2216 y la prueba de succión se realizó mediante el procedimiento descrito en el estándar ASTM D5298-10.

3.4 CONTAMINANTE UTILIZADO EN EL SUELO

Debido a que la presencia de oxígeno afecta la solubilidad y movilidad de arsénico en el suelo, el trabajar en la zona no saturada del suelo se traduce en que el suelo se encuentra en una condición aerobia, y el tipo de arsénico que se presenta en ambientes aerobios es el As (V). Debido a lo anterior, se utilizó una solución estándar trazable a NIST (Instituto Nacional de Estándares y Tecnología) de arsénico en la forma As (V) (1000 mg/L H_3AsO_4 en HNO_3 , Merck Millipore).

3.4.1 CONCENTRACIÓN DEL CONTAMINANTE

De acuerdo a la Norma Oficial Mexicana NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004, que establece criterios para determinar las concentraciones de remediación de suelos contaminados por arsénico, bario, berilio, cadmio, cromo hexavalente, mercurio, níquel, plata, plomo, selenio, talio y/o vanadio, se indica que la concentración límite de arsénico para suelo de uso agrícola/residencial/comercial, es de 22 mg/kg, por lo cual un valor superior indica que el suelo ya se encuentra contaminado y se utilizó esta concentración para generar la solución de arsénico con la cual se contaminó el suelo en las diferentes etapas del estudio. Debido a lo anterior las concentraciones elegidas para trabajar en el proyecto fueron de 25 mg/kg y 50 mg/kg.

3.5 PREPARACIÓN DE LAS MUESTRAS CONTAMINADAS CON ARSÉNICO

En la literatura se reportan dos métodos de contaminación del suelo: a) por goteo y b) por mezclado manual. Ambos métodos de contaminación se han empleado de manera indistinta, por lo que en este estudio se consideraron ambos métodos de contaminación del suelo con la finalidad de determinar cuál de ellos proporcionaba una muestra contaminada de manera homogénea.

La metodología empleada para la contaminación del suelo por goteo fue la siguiente.

1. Se utilizaron 8 especímenes de suelo en estado remoldeado con las características del sitio de referencia, es decir, $\gamma_m=1,746.09 \pm 6.60 \text{ kg/m}^3$, y $\omega=27 \pm 0.03 \%$ ($s_r=80\%$), por medio de un molde que tiene un diámetro interior de 3.75 cm y utilizando una altura de 4 cm (la Figura 16 muestra el espécimen recién fabricado antes de someterse a la contaminación por goteo). Dichos especímenes de suelo se colocaron en recipientes herméticos de vidrio y se colocaron en un cuarto de temperatura constante ($20 \text{ }^\circ\text{C} \pm 1 \text{ }^\circ\text{C}$) para evitar la pérdida de agua al momento de agregar la solución de arsénico.



Figura 16. Muestras de suelo recién fabricadas para ser utilizadas por el método de contaminación por goteo

2. Se realizaron dos soluciones de arsénico para contaminar los especímenes adicionando 2.5 ml de arsénico a 97.5 ml de agua destilada para la concentración de 25 mg/l y 5 ml de arsénico en 95 ml de agua destilada para la concentración de 50 mg/l.
3. 4 muestras de suelo remoldeadas con las características del punto 1 se utilizaron para la concentración de 25 mg/l y 4 para la de 50 mg/l, los cuales se llevaron a la saturación adicionando 6 ml de solución de arsénico para la primera descarga.
4. Cada 24 h se agregó 1 ml de la solución de arsénico a la muestra de suelo saturado con la ayuda de un gotero. Este proceso se realizó en un periodo de 7 días, 14 días, 28 días y 56 días para ambas concentraciones de arsénico.
5. Una vez que se terminó el periodo de tiempo anteriormente definido, las muestras de suelo se analizaron para obtener el contenido de líquidos en la zona superior, zona intermedia y zona inferior del espécimen de suelo,

además del pH de la muestra de suelo. Para controlar los cambios de temperatura, las mediciones se llevaron a cabo en un cuarto de temperatura constante ($20\text{ }^{\circ}\text{C} \pm 1\text{ }^{\circ}\text{C}$).

El segundo método de contaminación se realizó como se indica a continuación:

1. Antes de ser contaminada, el suelo resultante fue secado al sol para evitar incrementar el contenido de líquido y dividida en dos partes de 10 kg cada una, estas se separaron y colocaron en recipientes para ser contaminadas. Una vez obtenida la muestra de suelo inalterada, esta fue disgregada y tamizada a través de la malla no. 4 (4.75 mm) para ser utilizada en el diseño experimental planteado en la Figura 14.
2. La contaminación del suelo se realizó de manera manual con una solución de agua destilada mezclada con arsénico (ácido arsénico). Para lograr la concentración de 25 mg/kg se adicionaron 250 ml de solución de arsénico en 2.7 L de agua destilada, dicha solución se ajustó al pH natural del suelo antes de su aplicación por medio de hidróxido de sodio (hojuelas), debido a que el pH de la solución de arsénico es de 1.50 ± 0.03 y podría acidificar el suelo. De manera análoga, la concentración de 50 mg/kg se realizó con 500 ml de solución de arsénico y 2.7 L de agua destilada.
3. La solución de arsénico se colocó con un atomizador y se mezcló de manera manual.
4. Una vez que se terminó de contaminar, el suelo resultante fue colocado en recipientes herméticos en un cuarto de temperatura controlada ($20^{\circ}\text{C} \pm 1^{\circ}\text{C}$) durante un periodo de seis semanas, esto para simular el efecto de la contaminación a largo plazo.
5. Una vez cumplido este periodo, el suelo contaminado se mezcló y se separó en recipientes individuales para realizar el diseño experimental.

3.6 DETERMINACIÓN DEL POTENCIAL DE HIDRÓGENO

El procedimiento utilizado para obtener el potencial de hidrógeno en el suelo se indica en la norma NOM-021-SEMARNAT-2000, la cual se basa en determinar los iones H^+ presentes en una mezcla de relación suelo: agua de 2:1 mediante un electrodo. La prueba consiste en colocar 10 g de suelo seco en un frasco de vidrio y adicionar 20 ml de agua destilada, esta mezcla se agitó manualmente en intervalos de 5 minutos, durante un periodo de 30 minutos, y finalmente se dejó reposar 15 minutos antes de registrar la medición de pH.

La lectura se tomó por medio de un potenciómetro previamente calibrado con 3 soluciones búfer y se introdujo el electrodo del equipo en la suspensión para registrar la lectura, este procedimiento se repitió 3 veces para verificar los datos obtenidos.

3.7 DETERMINACIÓN DE LA CAPACIDAD DE INTERCAMBIO CATIONICO

La capacidad de intercambio catiónico (CIC) en el suelo se obtuvo mediante el procedimiento de la norma NOM-021-SEMARNAT-2000. Este método utiliza una solución de acetato de amonio (1N, pH 7, Meyer) que reemplaza cationes adsorbidos en el suelo (Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ y K^+).

El procedimiento consistió en secar un suelo y tamizarlo por la malla No. 10 (2 mm), después, se agregó una solución de acetato de amonio. El procedimiento continúa reemplazando el cloruro de sodio (NaCl, Merck). Una vez realizado lo anterior, la capacidad de intercambio catiónico se determinó por el método Kjendahl.

3.8 CARACTERIZACIÓN GEOTÉCNICA

La caracterización geotécnica se basó en normas vigentes, siendo las siguientes pruebas:

Análisis granulométrico del suelo a través de las mallas. Límites de Consistencia (Atterberg). Clasificación del suelo de acuerdo con el Sistema Unificado de Clasificación de Suelos (S.U.C.S.). Peso específico de la masa del suelo (γ_m). Coeficiente de permeabilidad saturada (k_s). Resistencia del suelo al corte directo.

3.8.1 ANÁLISIS GRANULOMÉTRICO POR MALLAS

De una muestra representativa de suelo, se procedió a pasar el material por una serie de mallas, el material retenido en cada malla se pesó y anotó, todo lo anterior se realiza hasta llegar a la malla No.200, se realizaron los cálculos de % retenido parcial, % retenido acumulado, % que pasa y se dibuja la curva granulométrica (ASTM D 2487, 2006).

3.8.2 LÍMITES DE CONSISTENCIA

Los límites de consistencia se realizaron de acuerdo a los procedimientos basados en la norma ASTM D 4318 (2010). Una muestra de suelo tamizado por la malla No. 40 (0.425 mm) se vació en un recipiente hasta lograr un peso aproximado de 300 g y se humedeció por un periodo de 24 h antes de realizar la prueba para lograr su homogenización. Los ensayos realizados fueron los siguientes:

Límite Líquido: el suelo se mezcló con una espátula para lograr su homogenización y se colocó en la copa de Casagrande hasta lograr un espesor de 10 mm en la zona central de la copa, después, con un ranurador se hizo una abertura en la parte central y se acciona la copa dejándola caer desde una altura de 10 mm, se registra el número de golpes hasta que en la parte central se cierra el talud de suelo 13 mm, y una vez que se logró esto, se obtienen 10 g de suelo de la parte central de la copa y se determina su humedad. La prueba continúa agregando

agua y repitiendo el procedimiento hasta lograr que el talud de suelo se cierre por debajo de 25 golpes.

Contracción lineal: una vez que se terminó la prueba de límite líquido, una porción de suelo se colocó en un recipiente rectangular de 100 mm de largo por 21 mm de ancho y se dejó a temperatura ambiente antes de ser colocado en un horno de secado a 105 ± 5 °C, la prueba terminó en el momento el suelo ya no sufrió un cambio de volumen.

Límite plástico: el suelo homogenizado anteriormente se colocó sobre una placa de vidrio y se tomó una porción que permitiera formar una esfera de aproximadamente 12 mm de diámetro para ser moldeada en un cilindro de aproximadamente 3 mm, la prueba termina una vez que el suelo se rompió al lograr el diámetro de 3 mm, una vez logrado esto, se obtiene la humedad de la muestra.

3.8.3 DETERMINACIÓN DEL PESO ESPECÍFICO DE LA MASA DEL SUELO

Una muestra de suelo seco de 10 kg de suelo para cada concentración de arsénico fue adicionada inicialmente con 3%, y se llenó en un molde Proctor de $10.16 \text{ cm} \pm 0.01 \text{ cm}$ y $11.62 \text{ cm} \pm 0.005 \text{ cm}$ en tres capas con 25 golpes cada una. El molde una vez lleno de suelo se enrasa y se pesa para obtener su peso específico, de la capa central se tomó una muestra para conocer su humedad y obtener su peso específico seco.

El procedimiento se repitió para incrementos de 3% de agua, es decir, para 6%, 9%, 12% y 15% de agua. Los valores obtenidos se graficaron y se calculó el punto más alto de la parábola para obtener el valor del peso específico seco y su humedad óptima.

3.8.4 RESISTENCIA DEL SUELO AL CORTE DIRECTO

Una muestra de suelo remoldeado con un $\gamma_m = 1,746.09 \pm 6.60 \text{ kg/m}^3$, y $\omega = 27 \pm 0.03 \%$ ($s_r = 80\%$) para cada concentración de arsénico, se colocó en una caja de corte de 100 mm x 100 mm aplicando una velocidad de deformación de 1 mm/min en esfuerzos normales de 50 kPa, 100 kPa y 200 kPa. Dichas muestras se ensayaron en condiciones secas para permitir que las muestras de suelo conservaran su contenido de agua/líquidos y prevenir el transporte del contaminante fuera de la muestra de suelo.

3.8.5 ENSAYE DE CONSOLIDACIÓN

Los ensayos de consolidación se realizaron de acuerdo con la norma ASTM D2435. Los especímenes de suelo se remoldearon tomando en cuenta las características del suelo de referencia. Las muestras se colocaron dentro del anillo de consolidación (50 mm de diámetro y 25 mm de altura) con un papel filtro colocado en ambos extremos de la muestra para evitar la migración de finos.

El oedómetro se colocó en posición y se colocó un peso para simular la carga de sitio durante 24 h, y después se inundó la muestra antes de empezar el ensayo. Se colocaron 5 incrementos de carga por 24 h cada uno (1 T/m², 1 T/m², 2 T/m², 4 T/m² y 8 T/m²) hasta llegar a una carga total correspondiente de 16 T/m². Después, las cargas fueron removidas hasta quedar con la carga de sitio.

3.8.6 COEFICIENTE DE PERMEABILIDAD SATURADA

3.8.6.1 Mediante la prueba de consolidación

Para comparar las mediciones del coeficiente de permeabilidad saturada se hizo uso del método de los ensayos de consolidación bajo cierta carga aplicada, de acuerdo con la siguiente ecuación.

$$\theta k = \frac{C_v \gamma_m}{E_m} \quad (95)$$

Donde k es el coeficiente de permeabilidad, C_v es el coeficiente de consolidación, γ_m es el peso específico de la muestra, E_m es el módulo eodométrico equivalente a $1/m_v$, y m_v es el coeficiente de compresibilidad volumétrica.

Para evaluar el coeficiente de permeabilidad con la expresión anterior, es necesario calcular γ_m debido a que el líquido que interacciona con la masa de suelo es una mezcla de agua y arsénico, de acuerdo con la ecuación (96):

$$\gamma_m = \frac{M_1 + M_2}{V_1 + V_2} g \quad (96)$$

Donde γ_m es el peso específico de la mezcla líquida, M_1 y M_2 son la masa del agua y arsénico respectivamente, V_1 y V_2 son los volúmenes del agua y el arsénico respectivamente, y g es la aceleración de la gravedad.

3.8.6.2 *Permeámetro de carga variable*

La prueba de permeabilidad con el permeámetro de carga variable se empleó en especímenes de suelo con 0 mg/kg, 25 mg/kg y 50 mg/kg de arsénico considerando un $\gamma_m = 1,746.09 \pm 6.60 \text{ kg/m}^3$, y $\omega = 27 \pm 0.03\%$ ($s_r = 80\%$), dichas muestras fueron sumergidas en contenedores de agua para que se saturaran antes de realizar las mediciones del valor de permeabilidad utilizando el procedimiento de la norma ASTM D5084 en un cuarto de temperatura controlada ($20^\circ\text{C} \pm 1^\circ\text{C}$).

Antes de comenzar con las mediciones un papel filtro se colocó en el fondo del espécimen de suelo para prevenir la migración de finos hacia los discos porosos. El permeámetro fue conectado a una bureta y se cubrió con plástico transparente para evitar la evaporación. Los valores de permeabilidad se calcularon por medio de la ecuación (97):

$$k = \frac{aL}{A\Delta_t} \ln\left(\frac{h_1}{h_2}\right) \quad (97)$$

Donde k es el coeficiente de permeabilidad, a es el área de la bureta, L es la longitud del espécimen de suelo, Δ_t es la diferencia de tiempo entre lecturas, h_1 es la carga hidráulica en cm al inicio de la medición, mientras que h_2 es la carga hidráulica en cm al término de la prueba.

3.9 SUCCIÓN

La prueba de succión se realizó por medio del procedimiento establecido en la norma ASTM D 5298-10 utilizando el papel filtro Whatman no. 42. La succión del suelo se relaciona con la cantidad de agua retenida en el papel filtro midiendo la cantidad de agua transferida por el suelo a un papel inicialmente seco. El método se basa en la suposición de que el papel filtro alcanzará un equilibrio con la humedad del suelo por medio de un intercambio de líquido o vapor de agua entre el suelo y el papel filtro sellando la muestra con el papel filtro en un contenedor en un periodo de siete días. El éxito de este método radica en realizar las mediciones de peso para obtener la humedad en el papel filtro en un periodo de cinco a diez segundos (para minimizar la pérdida de agua debido a la evaporación).

Las mediciones de succión se realizaron en 22 muestras de suelo remoldeadas de 4 cm de altura con un $\gamma_m = 1,746.09 \pm 6.60 \text{ kg/m}^3$, y $\omega = 27 \pm 0.03\%$ ($s_r = 80\%$), por medio de un molde que tiene un diámetro interior de 3.75 cm, de las cuales 11 especímenes fueron utilizados en la rama de secado y 11 especímenes en la rama de humedecimiento, ambas ramas en grados de saturación de 0% a 100% en pasos de saturación 10% en 10%, este proceso se repitió tres veces para validar dichos resultados.

3.9.1 EVALUACIÓN DE LA SUCCIÓN DE UN SUELO CONTAMINADO POR MEDIO DE LA CALIBRACIÓN DEL PAPEL FILTRO WHATMAN NO. 42

La calibración del papel filtro para la obtención de la succión se basa en la relación que existe entre la succión total y la humedad relativa (HR) de una concentración específica de sales disueltas en agua destilada. Para poder obtener los puntos de calibración y evaluar un valor de succión total conocido, se utilizaron diferentes concentraciones de sal como se muestra en la Tabla 3.

Tabla 3. Concentraciones de NaCl para la calibración del papel filtro Whatman no. 42.

Succión				HR	NaCl
kPa	Log kPa	pF	atm	(%)	(g/l)
-98	1.99	3.00	-0.97	0.99927	1.3
-268	2.43	3.44	-2.64	0.9980	3.3
-310	2.49	3.50	-3.02	0.99774	3.8
-585	2.77	3.77	-5.77	0.9960	7.2
-980	2.99	4.00	-9.68	0.99278	13.1
-3099	3.49	4.50	-30.19	0.97764	39.0
-9800	3.99	5.00	-96.77	0.93008	122.5

HR = Humedad relativa

Papeles filtro fueron colocados en recipientes sobre soluciones de sal (NaCl) por un periodo de dos semanas para su estabilización. El contenido de arsénico utilizado fue de 25 mg/kg, es decir, 25 ml/l, el cual fue añadido a la solución de sal y agua destilada para obtener la calibración del papel filtro Whatman no. 42 de acuerdo al siguiente procedimiento:

Soluciones de sal con agua destilada fueron preparadas con valores de succión conocidos desde 98 kPa hasta 9800 kPa.

1. En un recipiente de 250 ml se añadió 100 ml de la solución salina, es decir, 97.5 ml de solución salina y 2.5 ml de arsénico, dicho recipiente contaba con un tubo de PVC para evitar el contacto del papel filtro con la solución de

arsénico como se muestra en la Figura 17. Después, los papeles filtro fueron colocados en el recipiente sin entrar en contacto con la solución y fueron puestos en un cuarto de temperatura controlada para evitar gradientes de temperatura.

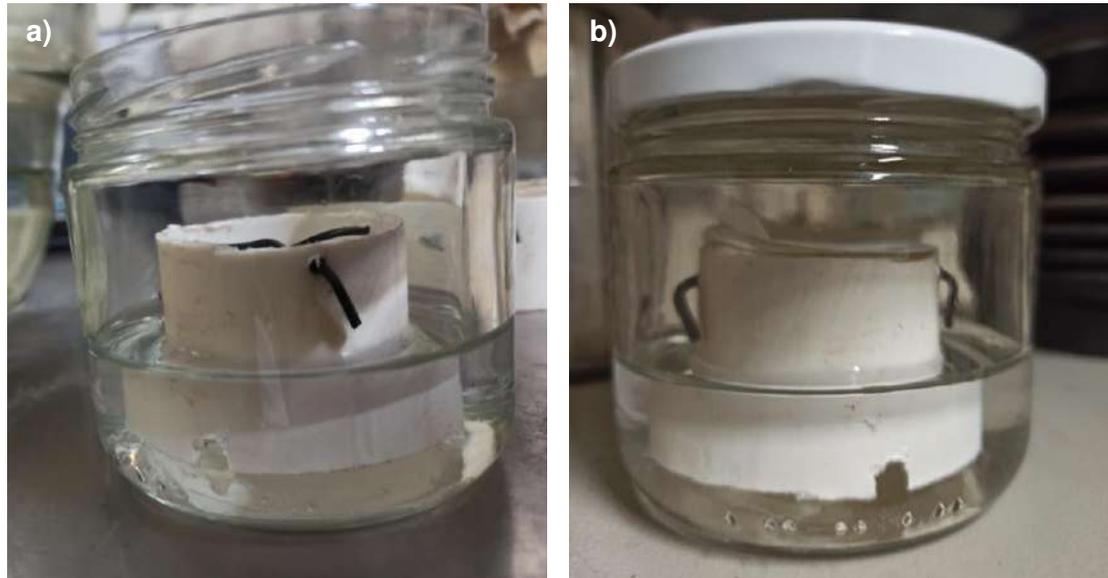


Figura 17. Preparación muestras para calibración de papel filtro Whatman no. 42

2. El paso anterior se repite para cada una de las diferentes concentraciones de sal.
3. Después de dos semanas de equilibrio, el recipiente es abierto y el papel filtro se pesa en una balanza analítica al 0.0001 g más cercano.

3.10 DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Para evaluar la composición del suelo contaminado en diferentes concentraciones de arsénico (0 mg/kg, 25 mg/kg y 50 mg/kg) se realizó por medio de la técnica de difracción de rayos X (XRD por sus siglas en inglés), la cual es considerada como un método no destructivo para el análisis cualitativo de compuestos cristalinos que se basa en la Ley de Bragg, que evalúa los espacios interplanares como se indica en la ecuación (98):

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (98)$$

Donde n indica el orden de reflexión (difracción), λ es la longitud de onda de los rayos X, d es la distancia entre los planos de la red cristalina y, θ es el ángulo entre los rayos incidentes y los planos de dispersión (Ali *et al.*, 2022).

Para el análisis de XRD, se utilizó suelo seco contaminado que pasó el tamiz no. 200 y se colocaron en un portaobjetos para su análisis. Las características del equipo de XRD utilizado son: modelo D8 Advance Bruker con una radiación Cu-K α de 1.5406 Å, voltaje de 20 kV y una intensidad de difracción de 5° a 80° con un intervalo de paso de 0.02° y un paso de tiempo de 5 s por punto. Los difractogramas resultantes del análisis fueron utilizados para obtener la identificación de la fase y su cuantificación, además del tamaño de cristalito.

Además, para evaluar la mineralogía de las muestras se hizo uso del software FullProf utilizando los archivos de difracción (PDF por sus siglas en inglés) 00-058-2038 para el material de montmorillonita, 03-065-0466 para el material de cuarzo, 00-011-0582 para el magnesio, 00-001-235 para el Levyne-Ca y el 03-0754 para el arsénico.

3.11 MORFOLOGÍA DEL SUELO

Para evaluar y cotejar la morfología y la microestructura del suelo contaminado con arsénico se hizo uso de micrografías obtenidas del análisis de Microscopio Electrónico de Barrido (MEB) (JSM-6060LV, Jeol, USA). Por medio de este análisis se analizaron dos muestras de suelo: una en estado natural (no contaminado) y otra contaminada con arsénico (50 mg/kg).

Las muestras se prepararon de la siguiente manera: sobre un portamuestras de aluminio de 10 mm de altura y 10 mm de diámetro se colocó cinta doble cara para asegurar la adhesión de las partículas de suelo al momento de ingresarlas a la cámara de vacío. Una porción de suelo se colocó sobre dicho

portamuestras previamente preparado e identificado, el posterior análisis se efectuó utilizando un voltaje de aceleración de electrones de 3 kV en aumentos desde 1 nm hasta 500 nm.

3.12 POROSIMETRÍA DEL SUELO

Las propiedades texturales del suelo fueron obtenidas mediante especímenes de suelo de 15.6 mm³, es decir, 2.5 mm por lado en cada una de sus concentraciones de arsénico. Dichas muestras se evaluaron en un equipo Autosorb iQ2 (Quantachrome, Anton Para, Ashland, Va, USA) a través de los isothermas de desorción y adsorción. Antes del análisis, las muestras fueron desgasificadas a 200 °C por 12 h a 1×10^{-2} Pa.

La superficie específica fue calculada por el método de Brunauer-Emmet-Teller (BET) usando los isothermas de desorción y adsorción de nitrógeno, mientras que la distribución de tamaño de poro (DTP) se obtuvo por el método de Barret-Joyner-Halenda (BJH) usando la rama de desorción de las isothermas resultantes.

3.13 ANÁLISIS DE FLUORESCENCIA DE RAYOS X POR REFLEXIÓN TOTAL

El análisis químico se realizó en un equipo S2 PICOFOX TXRF, Bruker Nano que identifica muestras líquidas, suspensiones y sólidos. Previo al análisis con las muestras de suelo, se revisó la calibración del equipo de acuerdo a las instrucciones del fabricante por medio de discos de calibración de sustancias (1 µg As), mientras que la resolución espectroscópica se realizó con un disco de 1 µg Mn y el análisis de sensibilidad con 1 µg Ni.

Las muestras de suelo se prepararon moliendo una muestra de 20 mg de suelo en un mortero de Ágata y se tamizó con una Malla No. 230 (63 µm), después, se colocó 1 mL de una solución dispersante (RBSTM 50), seguido de la colocación

de una solución de 10 µg de galio (1000 mg/L, Sigma Aldrich, St. Louis, MO, USA) como estándar interno. La suspensión fue colocada en un baño sónico por 15 min, y homogenizada en un mezclador de vórtice.

Una vez realizado lo anterior, una muestra de 10 µL de la solución se transfirió a un disco de cuarzo y se secaron en una placa caliente a 50 °C para ser analizados en el equipo por un tiempo de 1000 s, mientras que la evaluación de los elementos químicos se realizó por medio del software Spectra 7.8 (Bruker Nano GmbH, Berlin, Alemania).

Tabla 4. Composición química del suelo natural

Elemento	Concentración (%)
Si	59.16 ± 1.15
Al	17.28 ± 0.45
Fe	12.71 ± 1.06
Ca	4.97 ± 0.37
K	2.84 ± 0.08
Ti	1.55 ± 0.08
Mg	1.08 ± 0.03
Mn	0.22 ± 0.03
Zn	0.19 ± 0.02

El suelo natural cuenta con la composición química mostrada en la Tabla 4, la cual muestra el elemento y su concentración en %.

3.14 ANALOGÍA TÉRMICA

3.14.1 DATOS DE ENTRADA

Para evaluar la analogía térmica, se hizo uso de MEF y se identificaron diversas etapas, la primera de ellas se denominó como **GRAFICA_SUCSAT** e incluye:

- a) Propiedades del suelo: permeabilidad saturada, densidad seca, relación de vacíos (parámetro **RELVAC**), contenido volumétrico de agua y número de puntos de la SWRC (en ambas trayectorias), los cuales se introdujeron en lenguaje de diseño paramétrico Ansys Mechanical APLD por medio de un cuadro de diálogo utilizando el comando **MULTIPRO**.
- b) Datos de la SWRC: Utilizando el comando **MULTIPRO** se introdujeron los datos de succión y grado de saturación en ambas trayectorias, los cuales se almacenaron en un arreglo tipo tabla con el comando ***DIM** (Tabla **CCAR** para la trayectoria de secado y la tabla **CCARH** para la trayectoria de humedecimiento).

3.14.2 ANÁLISIS HIDRÁULICO

La segunda etapa se denominó como **GRAFICA_SUCTHETA**, el cual generó la SWRC en función del contenido volumétrico de agua (arreglo tipo tabla ***DIM CCAR**), para posteriormente obtener las funciones de conductividad hidráulica, considerando:

- a) No se realiza un ajuste de las SWRC como si lo hace el modelo de van Genuchten (1980) para obtener las funciones de conductividad hidráulica.
- b) Utilizando el parámetro **RELVAC** se transformó el grado de saturación a contenido volumétrico de agua como:

$$\theta = s_r(e/(1 + e)) \quad (99)$$

Donde θ es el contenido volumétrico de agua, e es la relación de vacíos y s_r el grado de saturación.

La siguiente etapa se denominó **CURVA_PERMEAB** la cual utiliza el procedimiento de Fredlund et al. (1994) y consideró:

- a) División de las SWRC: se utilizaron 20 intervalos para dividir la SWRC (en cada trayectoria), de acuerdo al procedimiento del Capítulo 2.2.4.
- b) La relación k_s/k_{sc} se consideró igual a la unidad para evaluar la FCH.
- c) La evaluación del método se guarda en el arreglo tipo tabla denominado **KSUC**.

La siguiente etapa evaluó el coeficiente de difusión (Ecuación (74)) y se denominó como **CURVA_DIFUSION** e incluye:

- a) Considerar que este análisis requiere determinar la pendiente en un punto i asociado a un análisis temporal. Por lo tanto, si se desea obtener la humedad en el punto i se ingresa al arreglo tipo tabla (***DIM CCAR**).
- b) La pendiente requirió evaluar un punto delante del punto i (es decir, la pendiente hacia abajo) denominado $i+1$, el cual cuenta con una distancia x (succión) de 1% de la succión i , la diferencia entre humedades se obtuvo de los datos del arreglo tipo tabla **CCAR**.
- c) El coeficiente de difusión en cada punto se evaluó a través de la conductividad hidráulica generada en la tabla **KSUC** y la pendiente evaluada anteriormente para cada punto i .

Para evaluar el perfil de succión se hizo uso de la etapa denominada **SUC_PROF** el cual establece una condición inicial de succión respecto a la profundidad. Utilizando el comando **MULTIPRO** se introdujeron los datos de succión (***DIM SUCP**), profundidad (***DIM PROF**) y el mes en que se realiza el estudio (para este caso es enero, es decir, el mes 1).

La siguiente etapa se denominó **LLUVIAS**, y para evaluarla se hizo uso de una función de precipitación, que comúnmente utiliza diversos parámetros, como lo son: la evapotranspiración, índices de calor, temperatura media, velocidad del viento, entre otros. Tradicionalmente, se han utilizado modelos como el de Penman-Monteith y Thornthwaite. Sin embargo, el enfoque de investigación adoptado para

este estudio es el de los suelos contaminados con arsénico, por lo cual se ha optado por la utilización de una función que no requiera de parámetros como la humedad relativa, radiación solar y la evapotranspiración, debido a que concentraciones altas de elementos minerales en el suelo pueden inhibir el crecimiento de las plantas. En particular, las concentraciones de arsénico utilizadas en este proyecto (25 mg/kg y 50 mg/kg) exceden el límite de concentración de 0.002 mg/kg correspondiente al límite de fitotoxicidad del arsénico (White & Brown, 2010).

Debido a lo anterior se ha propuesto una función de precipitación cosinusoidal (100) para los valores positivos de precipitación, la cual requirió el uso de dos parámetros de entrada: la precipitación máxima y el inicio de las lluvias, mientras los resultados negativos al evaluar la función se consideraron como cero, a fin de coincidir con los datos de precipitación de la región de Querétaro. Ambos datos se presentan en la Figura 18, la cual muestra la temperatura promedio en °C (línea roja), y la precipitación mensual promedio en mm (en el eje horizontal de la Figura 18) en la ciudad de Querétaro.

De los datos de precipitación podemos observar que el ciclo de lluvias inicia en el mes de mayo (50 mm de precipitación), en cuanto a la precipitación mínima, se presenta en el mes de diciembre (5 mm), mientras que la precipitación máxima se tiene en el mes de julio con 143 mm (Climate, 2022).

$$P = 143 \cos\left(\frac{\pi}{6}r - \frac{\pi}{p_y}\right) \quad (100)$$

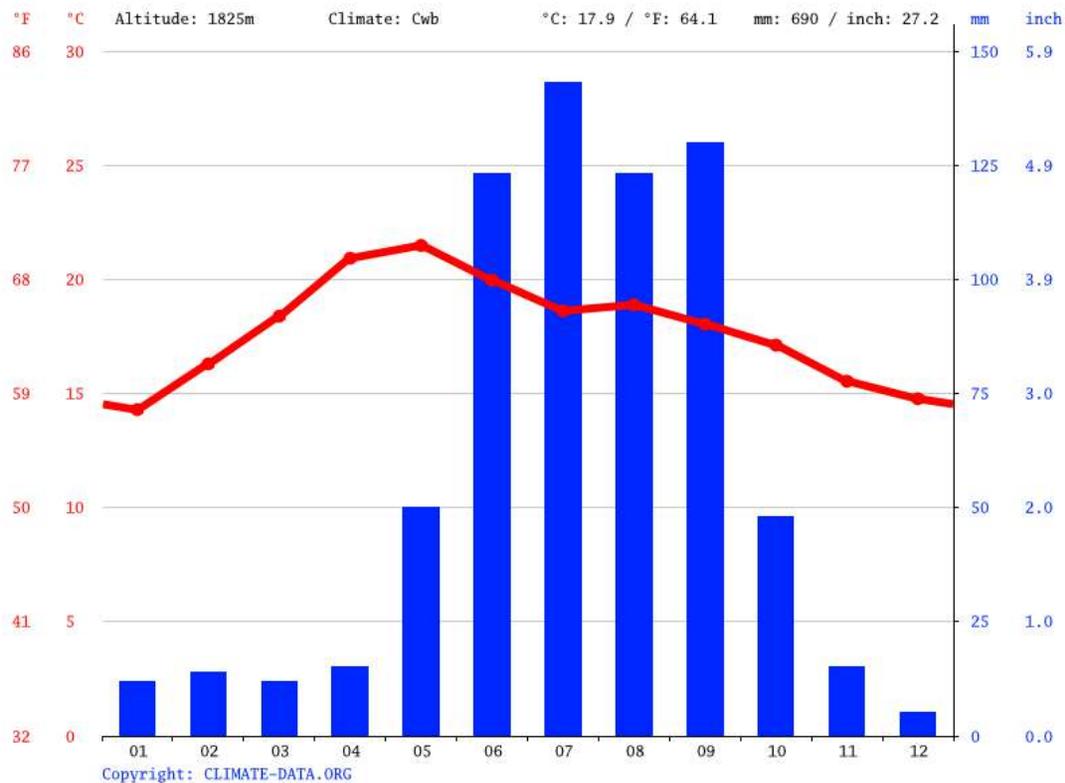


Figura 18. Precipitación mensual en el municipio de Santiago de Querétaro

Los datos proporcionados por una estación meteorológica automática (EMA) de la ciudad de Querétaro (ID: EMA-OMUAQ) de los años 2018, 2020 y 2021 fueron: la temperatura, humedad relativa, precipitación mensual, radiación solar, entre otros, los cuales fueron tomados en un paso de tiempo de 10 minutos.

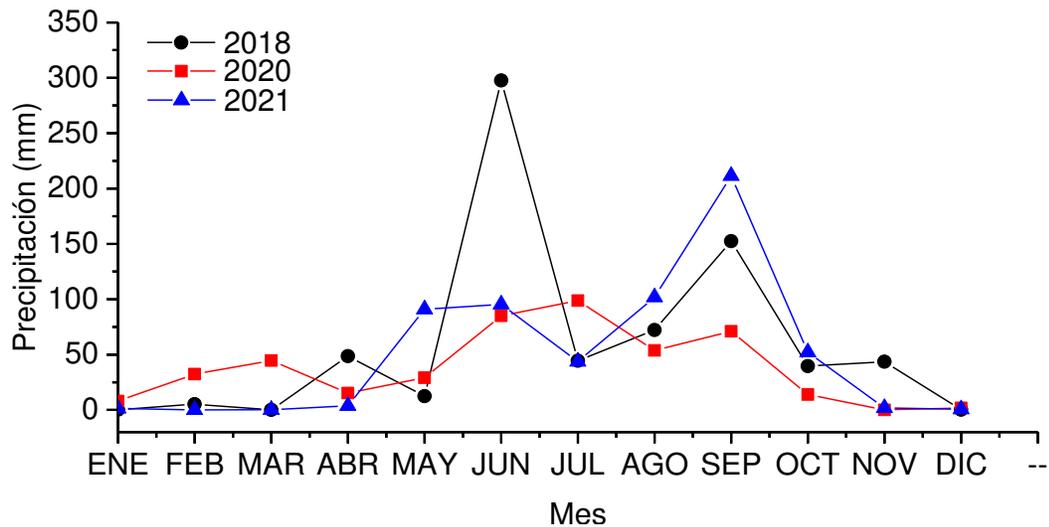


Figura 19. Datos de precipitación de la EMA-OMUAQ

De estos datos, solo se consideró la precipitación mensual para comparar los resultados de la función de precipitación propuesta, la cual se presenta en la Figura 19 proporcionando una visión general de la precipitación en la ciudad de Querétaro.

3.14.3 GEOMETRÍA Y MALLADO

El primer paso una vez obtenido todos los datos requeridos para utilizar la analogía térmica fue el uso de las etapas denominadas **GEOMETRIA** y **MALLADO** que incluyen:

- a) Generación del perfil estratigráfico: por medio del comando **MULTIPRO** se introdujeron la longitud del estrato (**LEST**), espesor de la capa de suelo (**H1**) y separación de malla (**SEPM**)
- b) Elemento del análisis térmico (Capítulo 2.6.3): se utilizó el elemento **PLANE 55** para el análisis térmico transitorio como: **ET, 1, 55** (Elemento tipo 1, PLANE55).

- c) Equivalencias del modelo térmico: la capacidad específica es equivalente al coeficiente de difusión (siguiendo las equivalencias mencionadas en el Capítulo 0), la permeabilidad equivale al calor específico como variable de la succión.

En cada nodo de la frontera superior se consideró la introducción de un vector flujo en un arreglo tipo tabla denominado **LLUVFM**. La siguiente etapa se denominó **CASOPREC** (para fines del esfuerzo de preconsolidación) e incluyó asociar la condición de descarga (aplicación de carga) de flujo en cada nodo.

- a) El análisis hizo uso de los comandos **NSEL, S, LOC, Y, 0** (NSEL=seleccionar nodos por coordenadas; S=seleccionar nodos que cumplan con ciertas condiciones; LOC=nodos por coordenadas; Y,0=selección de la coordenada Y=0) y **SF, ALL, HFLUX** (SF= colocar cargas en los nodos; ALL=todos los nodos y HFLUX=carga tipo térmica) obtenidas del arreglo **LLUVFM**.
- b) Fuentes puntuales: se consideró que la fuente puntual se encuentra a **LEST/2** en la coordenada **H1-H1** (superficie) y que contaba con un valor de densidad cambiante del suelo en el tiempo (flujo de agua constante).

Finalmente, el análisis finaliza con las etapas **ANALISIS** la cual utiliza el comando **ANTYPE, TRANS** (TRANS=análisis transitorio) en conjunto con **NROPT** (NROPT=opción de solución asimétrica) y **VISU**, que graficó las succiones a diversas profundidades.

4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

4.1 EVALUACIÓN DE LA CONTAMINACIÓN DE LA MUESTRA DE SUELO POR EL MÉTODO DE GOTEO

Los resultados del contenido de líquido en las muestras contaminadas se presentan en la Figura 20, los cuales muestran que se alcanzó el valor máximo de contenido de líquido en la zona superficial en la mayoría de los especímenes en cada periodo de tiempo, y al analizar las probetas de suelo, se observa que sufrieron erosión en la superficie del espécimen independientemente de la concentración de arsénico (como se observa en la Figura 21a) y Figura 22a) para la concentración de 25 mg/kg y 50 mg/kg respectivamente), lo cual no es quizás tan sorprendente que se presente, puesto que la contaminación se llevó a cabo desde la superficie.

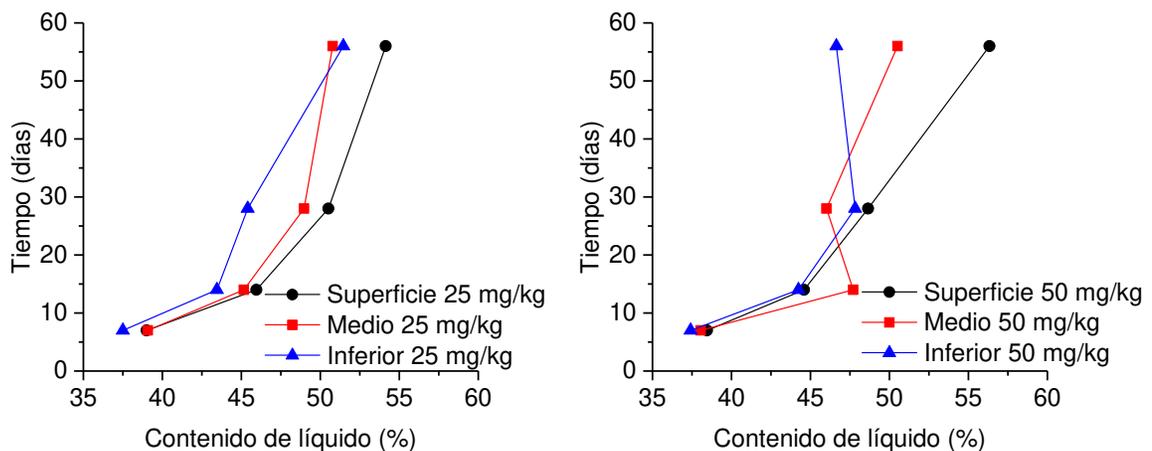


Figura 20. Contenido de líquidos en distintas zonas de suelo en contaminación por goteo

También se observó que, en periodos mayores a 56 días en la concentración de 25 mg/kg, y de 28 días en la concentración de 50 mg/kg la zona inferior de las probetas presentaba un contenido de líquidos mayor que la parte central, dicho aumento podría explicarse por el hecho que la muestra de suelo al alcanzar la saturación, dejaba fluir la solución de arsénico por las paredes de la muestra y se acumuló en la zona inferior del recipiente (como se observa en la

Figura 21b) y Figura 22b) para la concentración de 25 mg/kg y 50 mg/kg respectivamente), estando en contacto con la zona inferior de la muestra de suelo y subiendo por capilaridad.

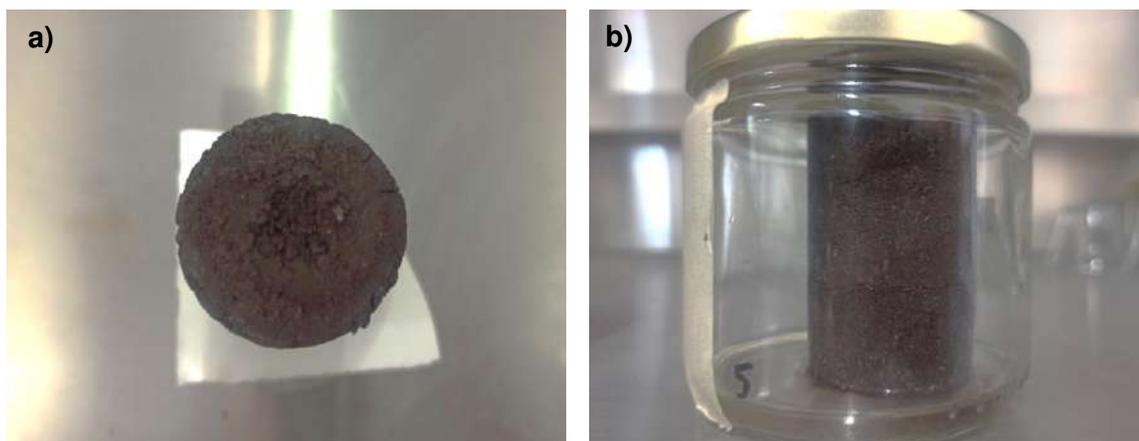


Figura 21. Muestra de suelo para contaminación por goteo a 25 mg/kg a 28 días:
a) erosión de la superficie de la muestra, y b) muestra con acumulación de contaminante en el fondo del recipiente

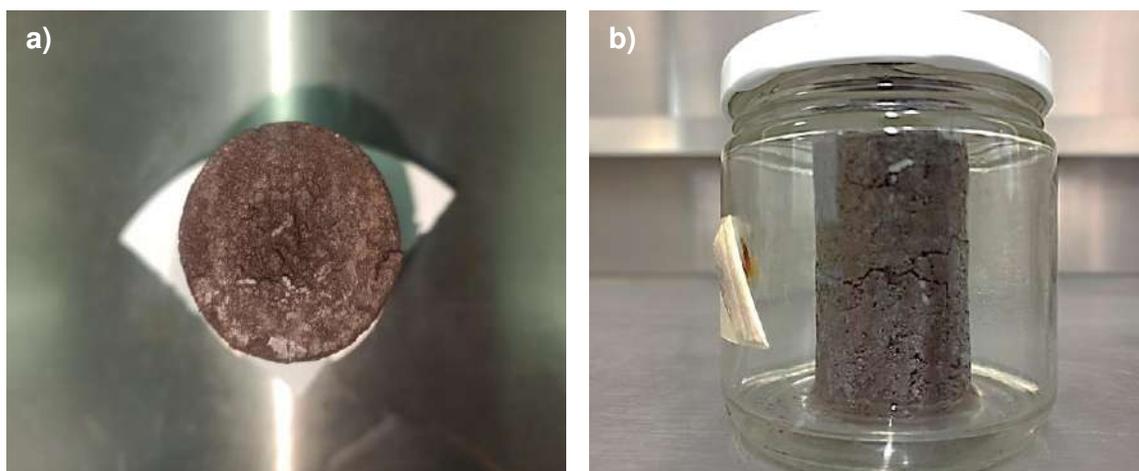


Figura 22. Muestra de suelo para contaminación por goteo a 50 mg/kg a 28 días:
a) erosión de la superficie de la muestra, y b) muestra con acumulación de contaminante en el fondo del recipiente

Finalmente, la Figura 23a) y Figura 24a) presentan las probetas de suelo al final del tiempo de análisis para la concentración de 25 mg/kg y 50 mg/kg respectivamente, mientras que la Figura 23b) y Figura 24b) para la concentración de 25 mg/kg y 50 mg/kg respectivamente, muestran el corte longitudinal de la muestra donde es posible observar la erosión de la superficie en el corte transversal. A simple vista no fue posible determinar una distinción en la zona de saturación de la muestra puesto que se presentan saturaciones similares entre las 3 zonas de análisis: superficie, medio e inferior, además de que las muestra se volvieron frágiles al momento de realizar el corte debido al contenido de líquido presente.

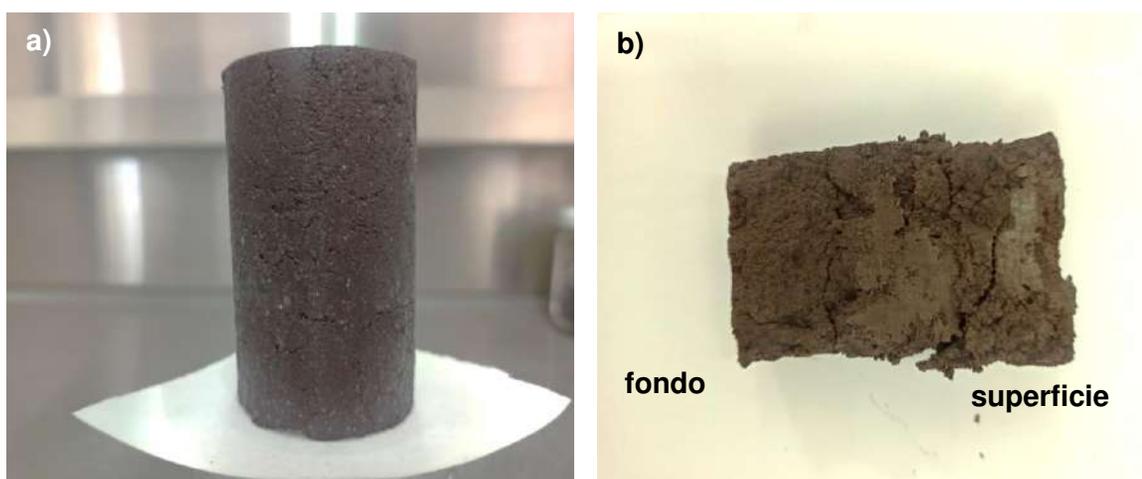


Figura 23. Muestra de suelo para contaminación por goteo a 25 mg/kg a 28 días:
a) muestra completa, y b) corte transversal de la muestra contaminada

Adicionalmente, se analizó el pH de la muestra en los distintos tiempos de contaminación por goteo para cada una de las muestras. La elección de que zona utilizar para obtener el pH se determinó comparando el pH en una de las muestras de suelo contaminado utilizando la zona superficial y la zona media, concluyendo que la profundidad no afecta el valor del pH en más de un 0.17% (al realizar el análisis de varianza en los valores de pH del suelo contaminado en ambas concentraciones de arsénico mostrado en la Tabla 6 se muestra que el valor F de 1.169 es menor que el valor crítico para F de 4.600, indica que los resultados de las muestras no son significativos).

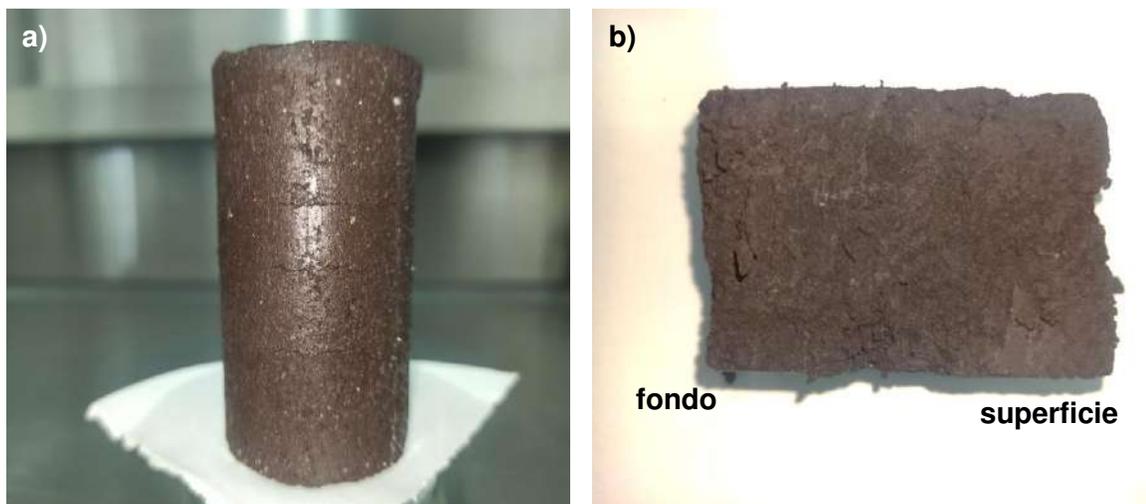


Figura 24. Muestra de suelo para contaminación por goteo a 50 mg/kg a 28 días:
a) muestra completa, y b) corte transversal de la muestra contaminada

Se puede observar en la Tabla 5 que para la concentración de 25 mg/kg existe una reducción de 0.81% y 3.05% en los periodos de tiempo de 28 días y 56 días respectivamente. Para la concentración de 50 mg/kg de arsénico, el pH mostró un aumento de 2.41% y una disminución de 0.79% en el periodo de 28 días y 56 días respectivamente. A pesar de los cambios en el pH en las dos concentraciones el suelo permaneció clasificado de acuerdo con la norma NOM-021-SEMARNAT-2000 como un suelo medianamente alcalino en todos los periodos de tiempo.

Tabla 5. pH en contaminación por goteo a 14 días, 28 días y 56 días

Concentración mg/kg	pH		
	14 días	28 días	56 días
25	8.102 ± 0.011	8.036 ± 0.005	7.855 ± 0.110
50	7.879 ± 0.008	8.069 ± 0.003	7.817 ± 0.089

De acuerdo a los presentes resultados, anteriores estudios de Gaxiola (2017), Cabello-Suárez (2015) y Hernández-Mendoza *et al.* (2021) han demostrado que el pH de un suelo contaminado tiende a disminuir debido al efecto acidificante

del contaminante en el suelo (*i.e.*, aguas residuales, vinazas tequileras y sulfuro presente en el diésel), que, aunque dicha disminución del pH es distinta en las dos concentraciones parece ser consistente con las investigaciones anteriormente mencionadas.

Tabla 6. Análisis de varianza de pH de muestras contaminadas con arsénico

Origen de las variaciones	Σ cuadrados	Grados de Libertad	Promedio cuadrados	F	Prob.	Valor crítico F
Entre grupos	0.01097	1	0.01097	1.16900	0.29788	4.60011
Dentro grupos	0.13141	14	0.00939			
Total	0.14238	15				

Para la realización de este estudio, se optó por la aplicación del método de contaminación manual, ya que esta metodología presenta una serie de ventajas: en primer lugar se está asegurando que tanto el contenido de líquido como el pH se mantengan uniformes, en segundo lugar, el contenido de líquido y pH se manejarán como propiedades en lugar de ser variables adicionales en el proyecto de investigación (profundidad de contaminación, contenido de líquido y pH), y finalmente, el tiempo de aplicación de la solución de arsénico es menor con la contaminación manual, ya que una vez que se contamina el suelo, la muestra se deja homogenizar por un periodo de tiempo.

4.2 DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Con el objetivo de evaluar los cambios mineralógicos que tienen lugar una vez que se contamina el suelo se utilizó la técnica de difracción de Rayos X (XRD).

La Figura 25a) muestra el equipo utilizado y la Figura 25b) el montaje de las muestras para las muestras contaminadas con arsénico. Además, la Figura 26

presenta el difractograma del suelo en condiciones naturales y contaminadas con arsénico. De esta figura se desprende que las muestras de suelo contienen el mineral montmorillonita [PDF 00-058-2038: montmorillonita, $(\text{Ca},\text{Na})_{0.3}\text{Al}_2(\text{Si},\text{Al})_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$] como la fase principal, cuarzo [PDF 03-065-0466: óxido de silicio: SiO_2], así como óxido de magnesio [PDF 00-001-1235] y Levyne-Ca [PDF 00-011-0582: aluminosilicatos de calcio, Levyne: $\text{Ca}(\text{Al}_2\text{Si}_4\text{O}_{12}) \cdot 6\text{H}_2\text{O}$] como fases secundarias.



Figura 25. Difracción de Rayos X: a) Equipo de Difracción de Rayos X, y b) montaje de muestras para análisis.

La presencia del arsénico en las muestras de suelo genera un cambio en las intensidades de las especies minerales, siendo considerablemente diferentes a $2(\theta)$ menores a 20° . El primer cambio observado se presenta en un ángulo $2(\theta) = 5.717^\circ$ en el plano cristalográfico (001) donde se muestra una reducción de la intensidad a medida que se incrementa la concentración de arsénico debido a las reacciones entre los minerales de arcilla y el contaminante.

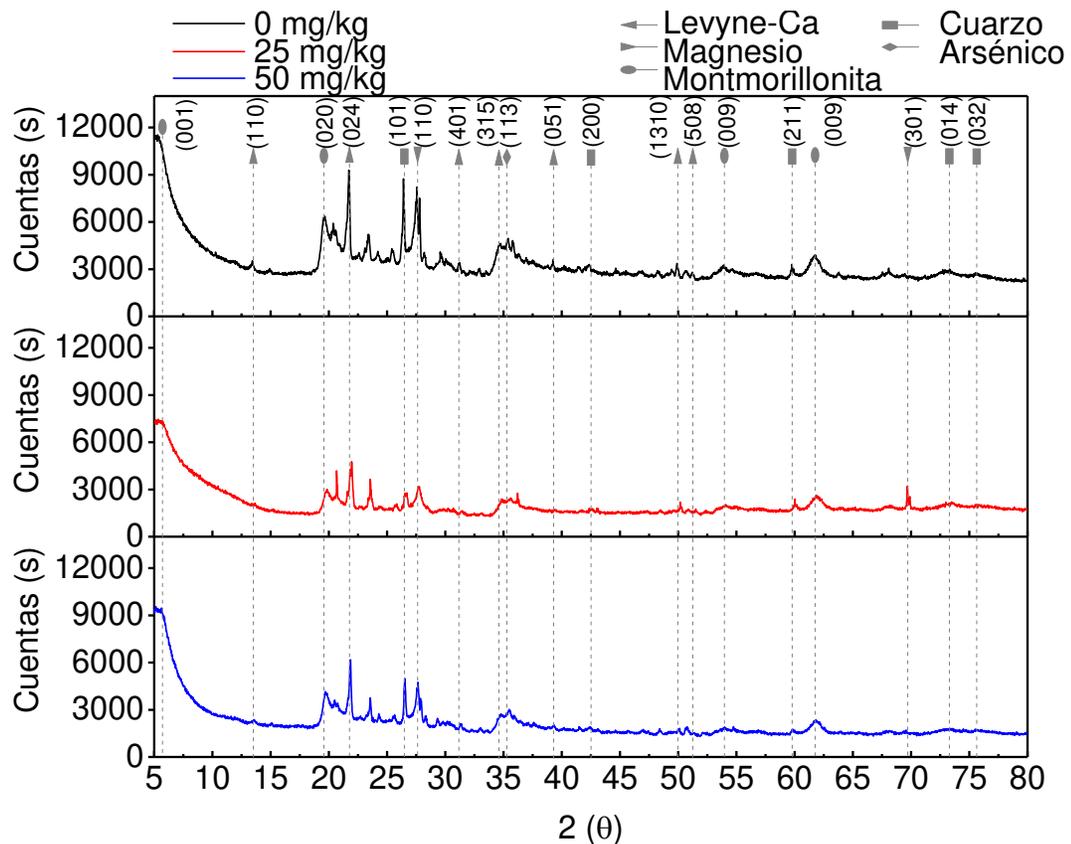


Figura 26. Difracción de Rayos X, muestras contaminadas con arsénico.

Los espacios interplanares de la montmorillonita incrementaron de $d_{001} = 16.873 \text{ \AA}$ hasta $d_{001} = 16.999 \text{ \AA}$ y $d_{001} = 17.257 \text{ \AA}$ para 0 mg/kg, 25 mg/kg y 50 mg/kg, respectivamente. Por lo cual es posible asumir que la modificación de este valor promueve un efecto de expansión en el suelo a medida que se incrementa la concentración de arsénico. Estudios previos de Baghabra Al-Amoudi (2018) encontraron que el ácido sulfúrico en suelos incremento su comportamiento expansivo como resultado de la orientación de las partículas y la disolución de la estructura mineral resultando en cambios mineralógicos.

Como se puede observar en la Tabla 7 se presenta la fase elemental, el tamaño de cristalito y la muestra del mineral para cada concentración de arsénico en el suelo. La reducción de la fase de montmorillonita refuerza los cambios estructurales observados en el suelo contaminado, es decir, la cohesión y la fricción.

Es sabido que la cohesión aumenta con el contenido de arcilla (Seguel & Orellana, 2008), y en nuestro caso, en ambas concentraciones, el cambio en la fase de montmorillonita provoca un decremento en este parámetro.

Tabla 7. Resultados del análisis de difracción de rayos x.

Muestra	Especie	% de fase	Tamaño de cristalito (nm)
0 mg/kg	Montmorillonita	38	24
	MgO	12	23
	As	-	-
	Levyne-Ca	28	42
	Cuarzo	22	38
25 mg/kg	Montmorillonita	33	27
	MgO	7	19
	As	13	26
	Levyne	24	22
	Cuarzo	23	17
50 mg/kg	Montmorillonita	34	32
	MgO	8	16
	As	16	21
	Levyne	24	28
	Cuarzo	18	32

Las reflexiones de Bragg para las muestras contaminadas indicaron el aumento en la fase elemental del arsénico a medida que el contenido de arsénico aumenta en la muestra de suelo. Una vez contaminada la muestra de suelo, el compuesto elemental para las dos concentraciones de arsénico se modificó, por lo cual, los cambios estructurales demostraron una modificación de las fases elementales asociados con la interacción suelo-contaminante.

4.3 pH

El suelo no contaminado presentó un valor de pH de 8.0, que de acuerdo con la NOM-021-SEMARNAT-2000 corresponde a un suelo medianamente alcalino. El valor del pH se muestra en la Figura 27 e indica que disminuyó a 7.93 ± 0.02 y

7.80 ± 0.02 conforme se incrementó la concentración de As en el suelo a 25 mg/kg y 50 mg/kg, respectivamente. Esto indica que la adición de arsénico en la masa de suelo tiene un efecto acidificante. Empero, la NOM-021-SEMARNAT-2000 continúa clasificando al suelo como medianamente alcalino.

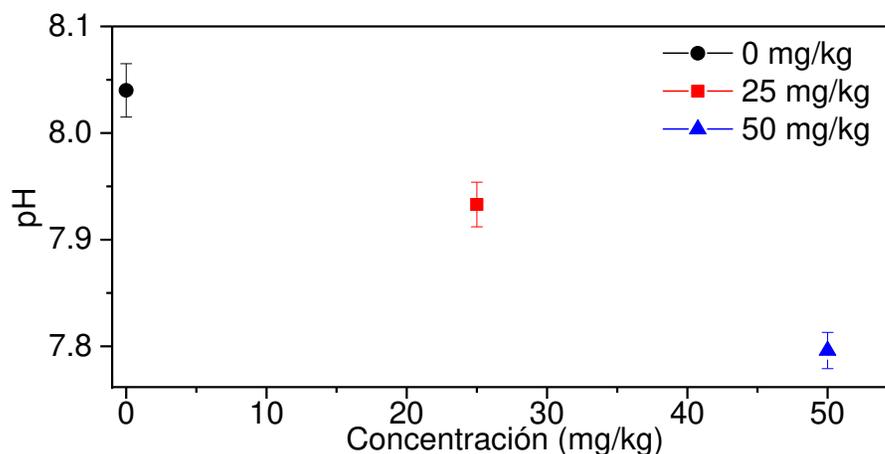


Figura 27. pH en suelo contaminado con arsénico.

Este hallazgo sugiere que, inicialmente, la contaminación del suelo con hasta 50 mg/kg de arsénico no presentaría limitaciones para su remediación por procesos biológicos, ya que el rango de pH del suelo para llevar a cabo los procesos de biotransformación varía de 5.7 a 8.4, y la tasa de degradación óptima se encuentra en un rango de pH de 7.7 a 8.4 (Supreeth & Raju, 2017).

Además, la acumulación de arsénico en la fitorremediación se mejora en pH neutros y alcalinos (*p. vittata* o *p. calomelanos*) (Anh *et al.*, 2018). Sin embargo, es necesario evaluar la capacidad de los microorganismos capaces de degradar al arsénico bajo las condiciones experimentales aquí expuestas para definir si pudiera existir alguna condición que limitara su desarrollo y por ende su eficiencia de remoción del As en la masa de suelo.

De igual forma, la reducción del pH del suelo sugiere una disminución de su capacidad de amortiguamiento o capacidad búfer. Así, en caso de requerir una remoción del arsénico contenido en la masa de suelo por fitorremediación, deberán

revisarse los posibles efectos que esto puede tener sobre el crecimiento de las plantas, y la eficiencia del proceso de remediación, ya que el arsénico es un elemento fitotóxico.

4.4 ESPECIACIÓN QUÍMICA DEL ARSÉNICO

La geoquímica del arsénico se determinada a partir de las propiedades fisicoquímicas del suelo, y en especial con el pH, además, las condiciones REDOX, el contenido de minerales de arcilla y la materia orgánica influyen la movilidad y biodisponibilidad del arsénico (Bakhat *et al.*, 2019; da Silva Júnior *et al.*, 2019). Con el fin de identificar la especiación del arsénico en las muestras de suelo una vez contaminadas, y sabiendo que dicha especiación depende del valor de pH en el medio se realizaron pruebas de potencial REDOX (Eh). La Figura 28 muestra el diagrama de Pourbaix de las especies del arsénico en ambientes acuosos. El arsénico utilizado para contaminar las muestras de suelo fue arseniato (As^{+5}) en su forma de ácido arsénico, la cual corresponde a la fórmula H_3AsO_4 .

Lo interesante de estos datos es que el ácido arsénico no cambió su especie (As^{+5}) en ninguna de las dos concentraciones (25 mg/kg y 50 mg/kg), sino que se transformó en un producto de disociación $HasO_4^{2-}$ predominante en ambientes alcalinos ($pH > 6.9$) y aeróbicos (Smedley & Kinniburgh, 2002). Esto es muy interesante porque el pH por definición es la medición de la concentración de iones de hidrógeno en el medio (Ecuación (101)) y esta transformación liberó dos iones de hidrógeno, lo cual resultó en la disminución de pH como se observó en los resultados presentados en la sección 4.4.



$$pH = -\log_{10}[H^+] \quad (102)$$

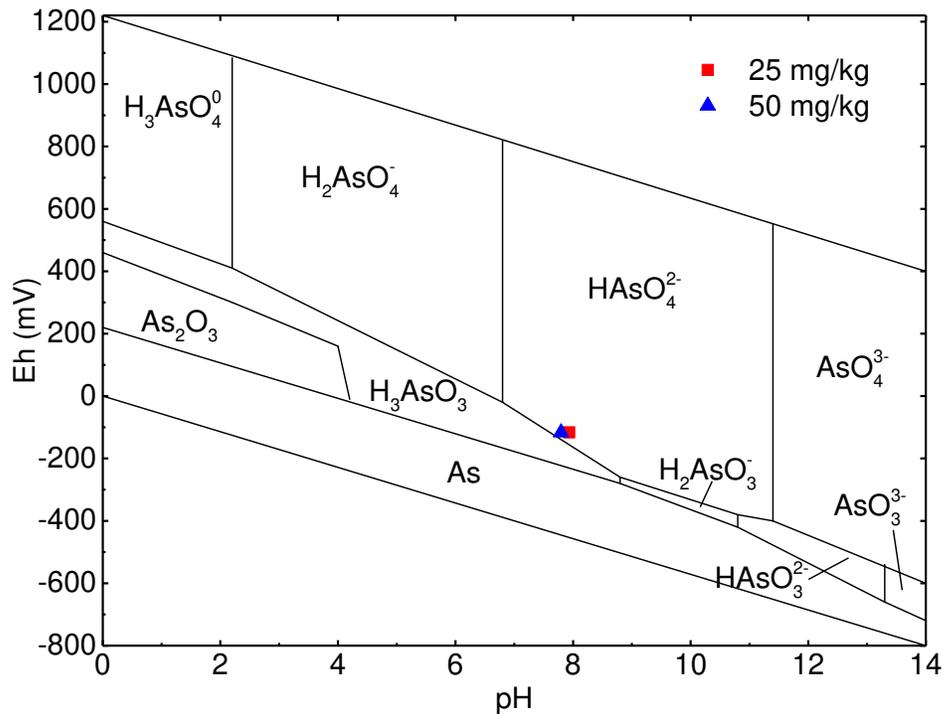


Figura 28. Diagrama Eh-pH de especies acuosas de arsénico en el sistema As-O₂-H₂O a 25 °C y 1 bar de presión total en muestras de suelo arcilloso

4.5 CAPACIDAD DE INTERCAMBIO CATIONICO

La Capacidad de Intercambio Cationico (CIC) se lleva a cabo en las raíces de las plantas, la materia orgánica y los minerales de arcilla. En estado natural la CIC fue de 50.98 cmol₊/kg, mientras que para la concentración de 25 mg/kg la CIC disminuyó a 47.08 cmol₊/kg (reducción de 7.65% respecto al estado natural), y para la concentración de 50 mg/kg disminuyó a 50.43 cmol₊/kg (reducción de 1.08% respecto al estado natural). Esta disminución es atribuida al cambio en el contenido de montmorillonita en la muestra de suelo contaminado, debido a que la CIC se incrementa con el contenido de arcilla en el suelo. Además, la reducción de la CIC indica una reducción de la capacidad buffer de los suelos contaminados permitiendo disminuir el pH de un suelo contaminado.

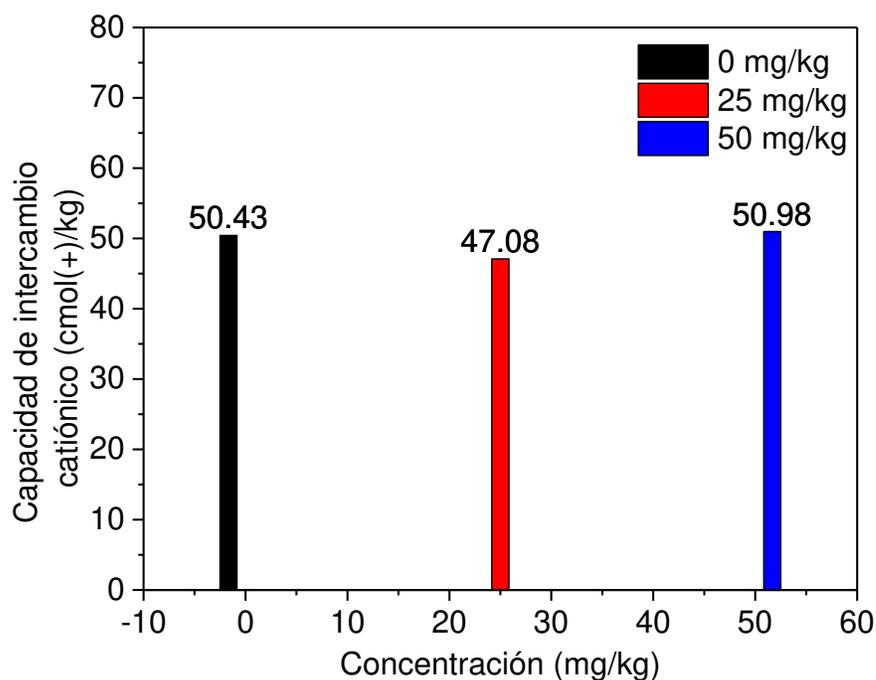


Figura 29. Capacidad de intercambio catiónico en muestras contaminadas

4.6 DISTRIBUCIÓN DEL TAMAÑO DE LOS GRÁNULOS DEL SUELO

Las pruebas de granulometría del suelo contaminado muestran que la adición de As en el suelo incrementa el tamaño de partícula, aumentando el contenido de gránulos con diámetros equivalentes a las arenas y gravas, a la vez que disminuyó el contenido de finos. Los resultados obtenidos demuestran que el suelo presenta cambios físicos debido a su grado de contaminación, particularmente notable en su clasificación visual (Figura 30), es decir, el suelo se vuelve más grueso conforme aumenta la concentración de As.

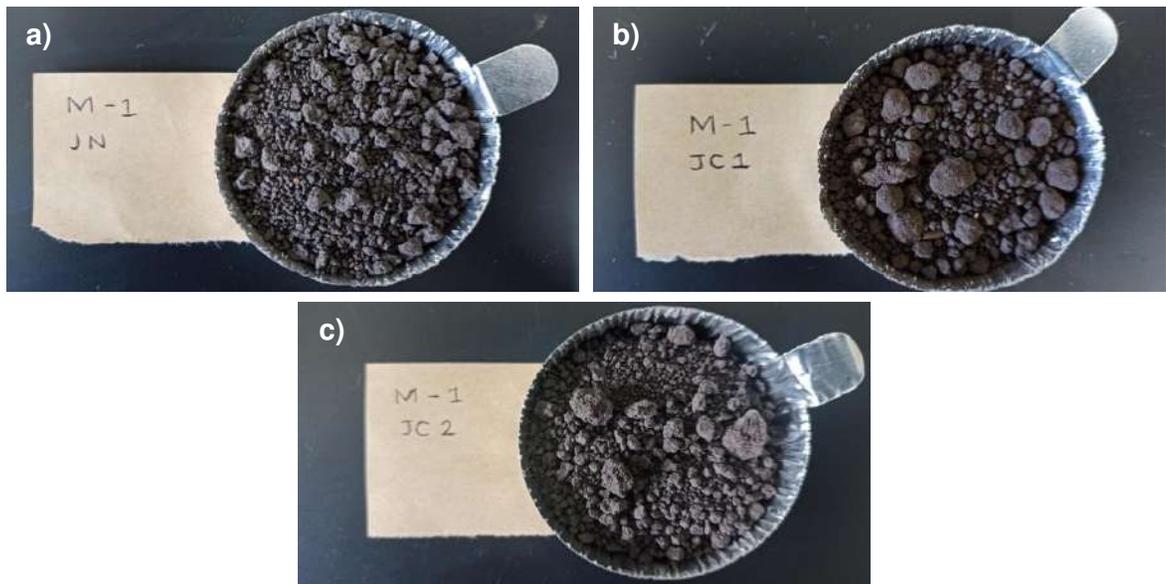


Figura 30. Muestras de suelo contaminado con a) 0 mg/kg As, b) 25 mg/kg As y c) 50 mg/kg As.

La Tabla 8 y la Figura 31 presentan los cambios en el tamaño de los gránulos del suelo bajo las distintas concentraciones de contaminante empleado, demostrando un incremento aparente en el contenido de partículas gruesas y la correspondiente reducción del contenido de partículas finas del suelo, dichos cambios pueden explicarse a través del fenómeno de coagulación de las partículas sólidas.

Tabla 8. Contenido de gravas, arenas y finos bajo distintas concentraciones de arsénico.

Concentración As (mg/kg)	Contenido de grava (G)	Contenido de arena (S)	Contenido de finos (F)
0.0	0.00%	92.412% ± 1.059%	7.588% ± 1.059%
25.0	13.633% ± 2.727%	77.200% ± 3.203%	9.167% ± 2.340%
50.0	3.869% ± 0.220%	93.452% ± 1.382%	2.678% ± 1.372%

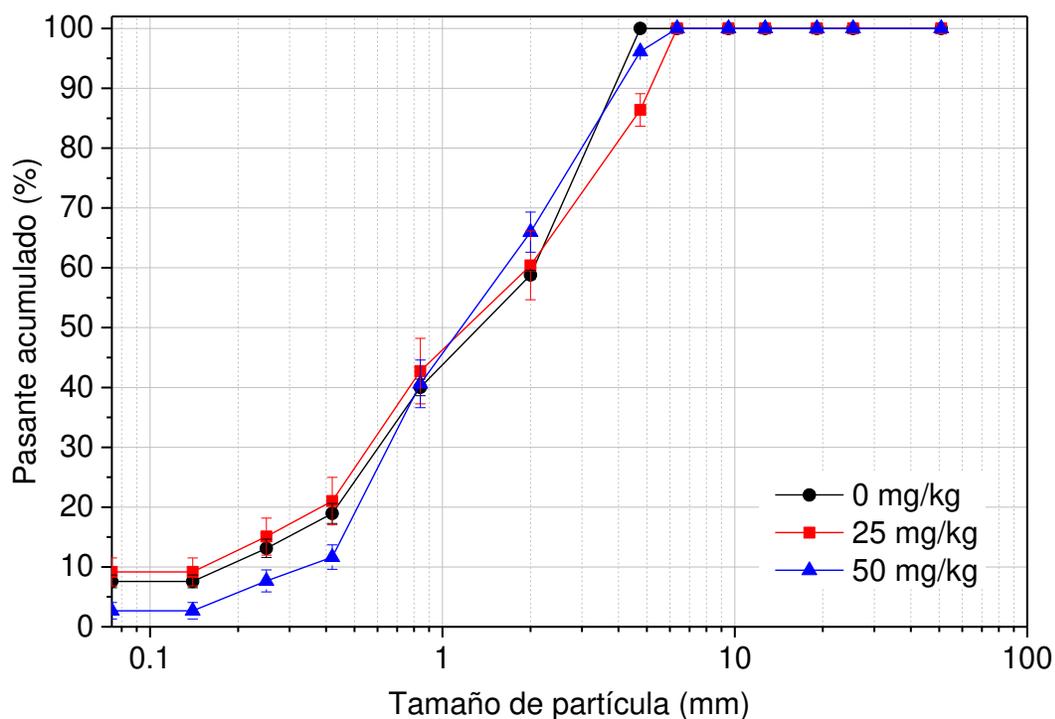


Figura 31. Curvas granulométricas del suelo en estado natural y contaminado

Inicialmente las partículas de suelo natural se encontraban parcialmente rodeadas por agua y aire, lo que ocasionaba que las partículas de suelo tuvieran una carga eléctrica definida. Sin embargo, al momento de agregar el arsénico al medio donde se encontraban las partículas de suelo, se pudo ocasionar un desequilibrio de la carga superficial de las partículas sólidas. Para contrarrestar dicho desequilibrio, las partículas finas del suelo tendieron a agregarse a las partículas gruesas mediante un mecanismo de coagulación similar al fenómeno que sufren las partículas coloidales durante la remoción del arsénico del agua con presencia de sólidos en suspensión.

Asimismo, la teoría de la doble capa difusa, indica que el espesor de dicha capa ($1/K$) depende, entre otros factores, de la concentración de electrolitos, como se indica en la Ecuación (103).

$$\frac{1}{K} = \left(\frac{DkT}{8\pi n_0 \varepsilon^2 \nu^2} \right)^{1/2} \quad (103)$$

Donde T es la temperatura (K), D es el efecto de la constante dieléctrica, k , corresponde a la constante de Boltzmann (1.38×10^{-16} erg/K), ε es carga electrónica unitaria (1.6×10^{-20} Coulomb), n_0 es la concentración de electrolitos (iones/cm³), ν denota el efecto de la valencia del catión.

Por lo tanto, al agregar arsénico en diferentes concentraciones, a la masa de suelo, se incrementó la concentración de los electrolitos presentes en el medio, por lo que se redujo el espesor de la doble capa difusa y se obtuvo como resultado la agrupación de las partículas finas del suelo y con ello se obtuvo un incremento aparente de la cantidad de partículas gruesas.

A fin de observar el efecto del arsénico en la masa de suelo se realizaron caracterizaciones de Microscopia Electrónica de Barrido de Alta Resolución (HRSEM por sus siglas en inglés) en partículas aisladas. Las micrografías son bastante reveladores en cuanto a su morfología y el cambio estructural una vez que el arsénico se ha incorporado en la masa de suelo. La Figura 32a) muestra el apilamiento de partículas laminares con algunos perfiles casi simétricos de un tamaño aproximado de 36 micras por 60 micras, mientras que la Figura 32b) muestra la pérdida de los perfiles casi simétricos incrementándose el tamaño de partícula considerablemente, teniendo un tamaño aproximado de 75 micras.

Acercándose un poco más a fin de observar la morfología a detalle en la presencia de arsénico la Figura 33a) muestra una partícula aislada de un tamaño aproximado de 30 micras por 25 micras, mientras que la Figura 33b) claramente muestra el cambio de morfología. Resultados similares se observan en la Figura 34a) que muestra una partícula aislada de aproximadamente 10 micras por 13 micras, mientras que Figura 34b) exhibe un cambio en el tamaño de partícula.

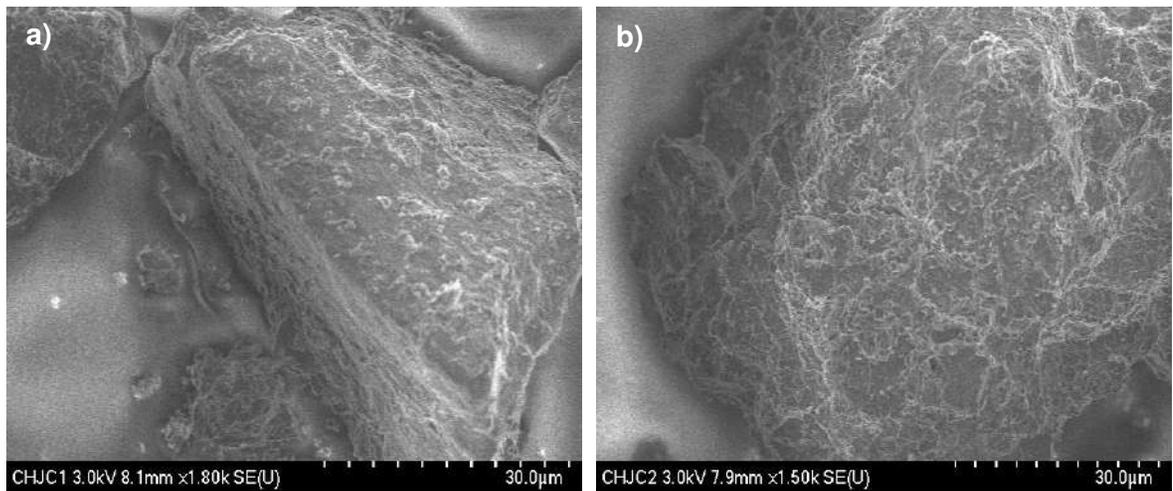


Figura 32. Imagen SEM HR de a) muestra natural a 1,800 aumentos, y, b) muestra contaminada a 50 mg/kg a 1,500 aumentos.

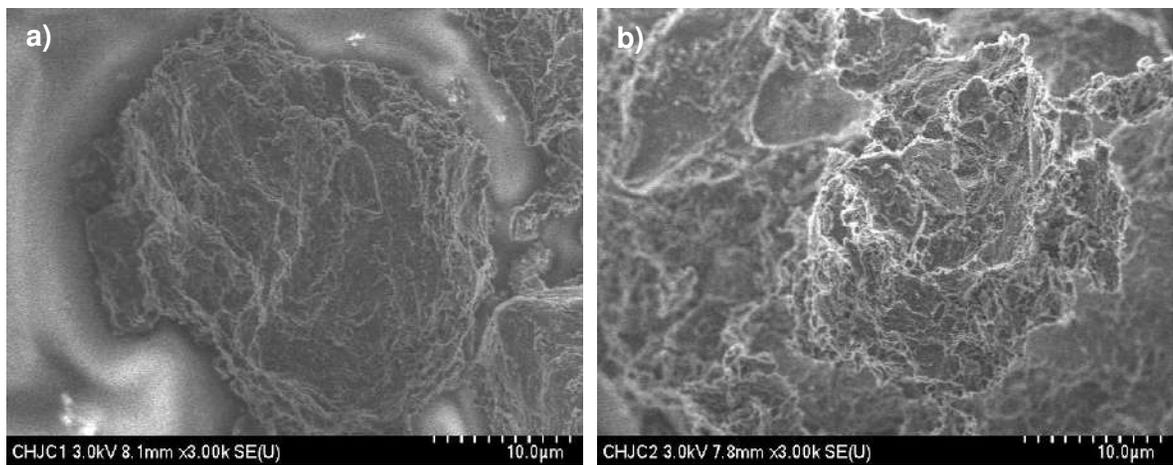


Figura 33. Imagen SEM HR de a) muestra natural, y, b) muestra contaminada a 50 mg/kg a 3,000 aumentos.

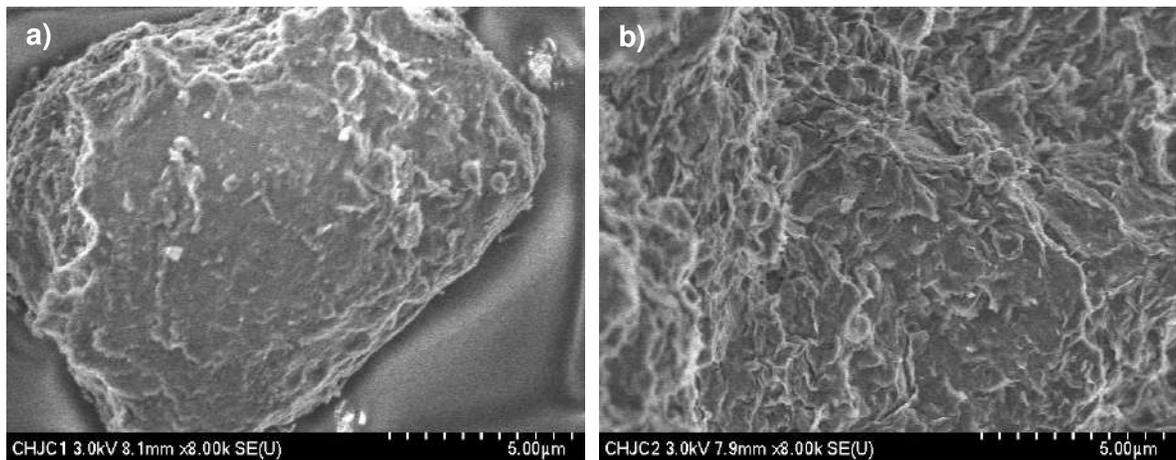


Figura 34. Imagen SEM HR de a) muestra natural y b) muestra contaminada a 50 mg/kg a 8,000 aumentos.

En general, estos resultados indican el aumento aparente de partículas gruesas a medida que la masa de suelo es contaminada. Por otra parte, se sabe que la superficie de las partículas de arcilla contiene hidroxilos cuya tendencia a disociarse en el agua depende fuertemente del pH del medio. A valores de pH altos se incrementa el valor de la carga negativa en las partículas de arcilla y se incrementa el espesor de la doble capa difusa. Por lo que, en el presente estudio, la reducción del pH del medio también pudo influenciar en la reducción del espesor de la doble capa difusa dando como resultado la formación de partículas de tamaño mayor y con ello se observó una reducción en el contenido de finos.

4.7 LÍMITES DE CONSISTENCIA

Para evaluar el límite líquido (LL), se utilizó la copa de Casagrande para muestras de suelo con distintas concentraciones de As. Ejemplos de la obtención del LL se pueden observar en la Figura 35. El suelo no contaminado presentó un LL de $79.78\% \pm 0.12\%$, que de acuerdo con la ASTM D2487 corresponde a un suelo fino de compresibilidad alta, y presentó un índice de plasticidad (IP) de $42.17\% \pm$

0.12%. Esto indica que el suelo es clasificado como un limo de alta compresibilidad (MH).

Los resultados obtenidos de los límites de consistencia para las distintas concentraciones de arsénico se muestran en la Tabla 9 y en forma gráfica en la Figura 36a). Los valores del LL y LP (límite plástico) a una concentración de arsénico de 25 mg/kg sufrieron una disminución de 4% ($77.04\% \pm 0.36\%$) y 7% ($35.13\% \pm 2.61\%$), respectivamente, en comparación al estado no contaminado (como se presenta en la Tabla 9).



Figura 35. Determinación del límite líquido en la copa de Casagrande para 25 mg/kg.

Al incrementar la concentración de arsénico en el suelo a 50 mg/kg, el valor del LL muestra un incremento inicial de 8% ($86.56\% \pm 0.29\%$) seguido de un decrecimiento del LP de 8% ($34.50\% \pm 1.12\%$) respecto al estado no contaminado. Basándonos en estos resultados podemos decir que el suelo contaminado es clasificado como una arcilla de alta compresibilidad (CH) en ambas concentraciones, para observar este cambio, se ha acotado el rango de los valores de la carta de plasticidad a fin de observar en que clasificación se ubican los resultados de cada concentración (Figura 36b)).

Tabla 9. Clasificación SUCS de muestras contaminadas con As a distintas concentraciones

Concentración de As (mg/kg)	Límite líquido (%)	Límite plástico (%)	Clasificación SUCS
0	79.79 ± 2.12	37.61 ± 0.00	MH
25	77.04 ± 0.36	35.13 ± 0.00	CH
50	86.56 ± 0.29	34.50 ± 0.00	CH

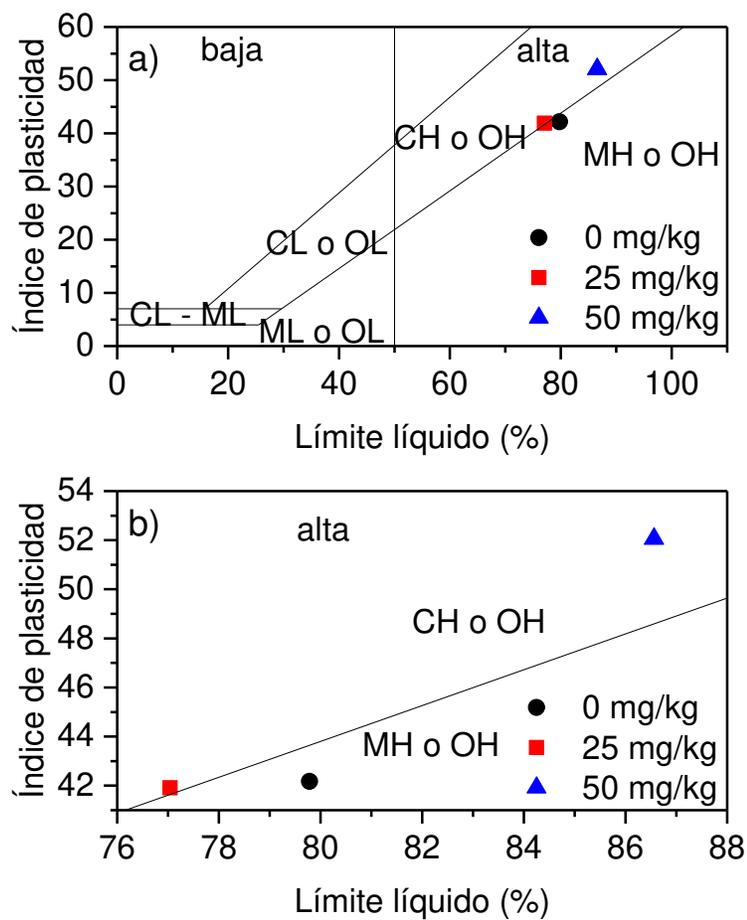


Figura 36. Carta de plasticidad y clasificación del suelo en distintas concentraciones de As

El resultado que emerge de la adición del As en el suelo es la reducción de la fuerza de atracción de las partículas, mientras se desarrolla un aumento en su fuerza de adherencia formando aglomeraciones, lo que causa los cambios en el límite líquido del suelo y su cambio en la clasificación, tomados en conjunto, estos resultados indican que el suelo se comporta como uno mayormente expansivo con la adición de As.

La literatura existente ha encontrado una fuerte relación entre la doble capa difusa (DDL), los parámetros de resistencia y la clasificación de suelos arcillosos (Juárez-Badillo & Rico, 2005; Sunil *et al.*, 2009; Ikeagwuani & Nwonu, 2019). Como ya se mencionó anteriormente, estos resultados sugieren que el arsénico modifica la clasificación del suelo.

De acuerdo a los presentes resultados, anteriores estudios como el de Resmi *et al.* (2011) y Li *et al.* (2015) quienes trabajaron con plomo y zinc como contaminantes en suelos Encontraron que la reducción del LL cambia directamente con el espesor de la DDL, es decir, cuando el LL disminuía, el espesor de la DDL que rodeaba las partículas se reducía, lo cual alteraba la estructura del suelo llevándola hacia una estructura floculada debido a las reacciones con los metales pesados. Además, la estructura floculada del suelo reduce la superficie específica (Negahdar & Nikghalpour, 2020), lo cual incrementa el tamaño de partícula como se comentó en el análisis granulométrico.

El valor de contracción lineal longitudinal presenta un valor de $20.26\% \pm 0.83\%$ para la condición no contaminada, mientras que para la concentración de 25 mg/kg disminuyó a $19.14\% \pm 0.6\%$, y para la concentración de 50 mg/kg aumentó a $20.60\% \pm 0.26\%$. Debido a que este material se considera como uno de alta compresibilidad, tomando como clasificación los límites de Atterberg, el conocer el valor de la contracción lineal nos permite conocer el potencial de expansión.

De acuerdo con las recomendaciones de Altmeyer (1995) el suelo se clasifica como uno con cambios críticos de volumen sin importar la concentración de arsénico (contracción lineal $> 8\%$), sugiriendo que el suelo es susceptible a los

cambios de volumen cuando entra en contacto con el arsénico. Una de las cuestiones desprendida de estos resultados es que las cimentaciones pueden desarrollar asentamientos debido a la expansión y contracción de la masa de suelo contaminada.

4.8 PRUEBAS DE CORTE

El proceso de preparación y montaje de la muestra en el equipo de corte directo se ilustra en la Figura 37, mientras que los resultados del ensaye se ilustran en la Figura 38. El suelo no contaminado presentó un valor de cohesión de 47.8 kPa y un ángulo de fricción interna 15.4° , que corresponde a un suelo mixto, es decir, un suelo con características cohesivas y friccionantes.

El resultado más llamativo que emerge de los datos de la Tabla 10 y Figura 38 es la fuerte disminución del valor de la cohesión (49%) en la concentración de 50 mg/kg (24.2 kPa) debido a la disminución de la fase de montmorillonita mostrada en los análisis de XRD. Esta disminución se ha observado en suelos contaminados con plomo (Karkush & Ali, 2020) debido a que se rompen los enlaces que mantienen a las partículas sólidas debido a una interacción con los metales pesados, resultando en la disminución de la cohesión.

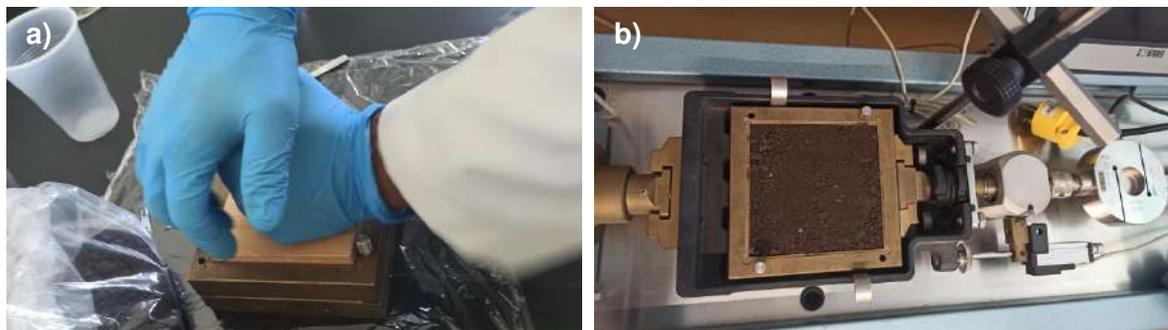


Figura 37. Prueba de corte directo: a) Preparación de la muestra y b) montaje de la muestra en concentración de 25 mg/kg.

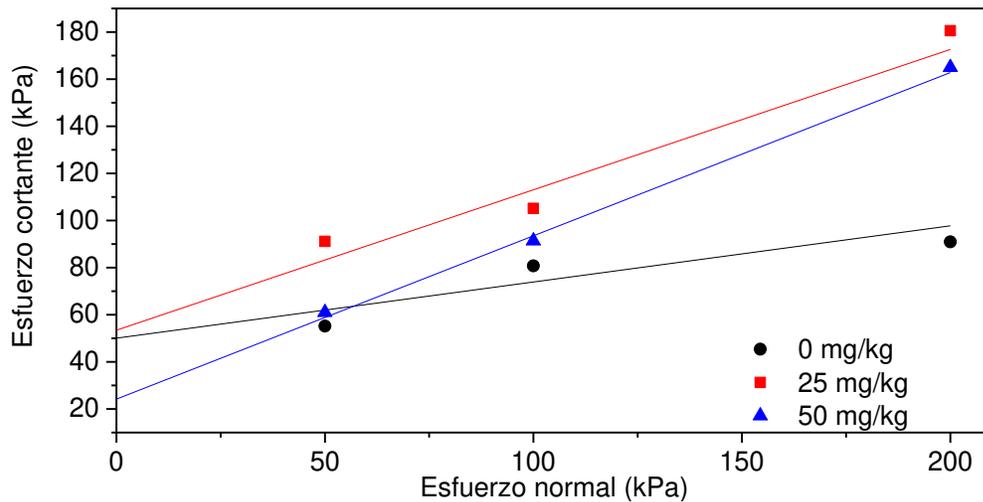


Figura 38. Pruebas de corte suelo contaminado con As.

Tabla 10. Valores de cohesión y fricción interna de suelos contaminados con arsénico en distintas concentraciones.

Concentración de As (mg/kg)	Cohesión (kPa)	Fricción interna (°)
0	50.09	13.40
25	53.45	30.79
50	24.18	34.73

No solo la cohesión disminuye, también el ángulo de fricción se incrementa comportándose como un suelo arenoso o grava a medida que la concentración de arsénico aumenta. La fricción interna se incrementó en una proporción de 1.37 y 1.25 veces en concentraciones de As en 25 mg/kg y 50 mg/kg, respectivamente. Podemos atribuir este aumento a la aglomeración de las partículas sólidas del suelo contaminado.

Li *et al.* (2015) atribuyó la modificación de la resistencia al corte a los cambios en la DDL, mientras Karkush y Ali (2020) explicaron que la DDL entre las partículas sólidas se rompe con la interacción de los metales pesados, lo cual disminuye la cohesión del suelo. Además, Negahdar y Nikghalpour (2020)

atribuyeron el incremento de la fricción al cambio a la estructura del suelo arcilloso, mientras que Sharma *et al.* (2018) sugirieron que la modificación de los parámetros de resistencia se debe a las reacciones químicas entre el contaminante y el suelo.

4.9 PRUEBAS DE COMPACTACIÓN

Los resultados de compactación por medio de la prueba Proctor estándar en muestras de suelo contaminadas a distintas concentraciones de arsénico se muestran en la Figura 39. Este grafico es bastante revelador, para la primera concentración de As, es decir, 25 mg/kg, el estado natural presenta un valor γ_d de 1,309.21 kg/m³ y al momento de contaminar aumenta a un valor de 1,326.65 kg/m³, es decir, aumenta 1.33%, en cuanto a la humedad óptima se presenta una disminución de 16.44% conforme se contamina el suelo.

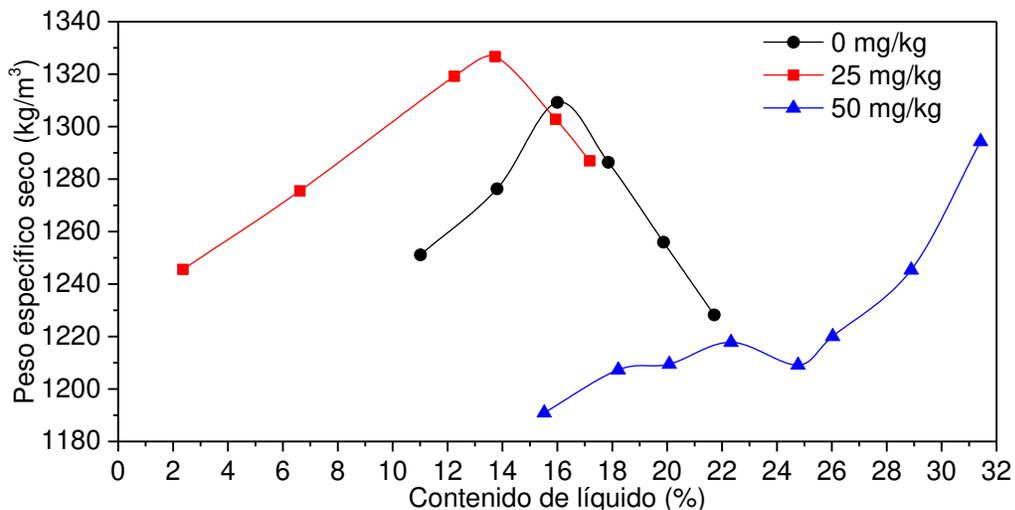


Figura 39. Pruebas de compactación Proctor estándar

Los resultados de la compactación en el suelo muestran que el suelo se vuelve débil al aumentar la concentración de arsénico a 50 mg/kg, puesto que no se observa un claro contenido óptimo de líquidos y el γ_d presenta máximos locales a

18.5% y 22% de contenido de líquidos, sin embargo, no se presenta un valor máximo general, lo cual se interpreta como una curva con características inferiores.

Los presentes resultados parecen ser consistentes con los que otras investigaciones han reportado. Sharo y Daradkah (2020) sugirieron que la reducción del peso específico seco y del contenido óptimo de agua en muestras de suelo con detergente son atribuidas al cambio en la constante dieléctrica en la concentración de los electrolitos, lo que cambia el espesor de la doble capa difusa.

Tomados juntos estos resultados, concuerdan con los de Nayak *et al.* (2007) quienes reportaron que al aumentar la concentración de solutos la curva de compactación adopta una forma extraña con características inferiores.

4.10 CONSOLIDACIÓN

Estos resultados deben ser comentados dado que el estudio del fenómeno de consolidación de los suelos contaminados ha documentado resultados variados, anteriormente Cabello-Suárez (2018) quien trabajó con hidrocarburos encontró modificaciones en el comportamiento clásico de la curva de compresibilidad de un suelo atribuyendo la manifestación de la consolidación secundaria al deslizamiento entre las partículas del suelo provocadas por el contaminante.

Sin embargo, en el caso del arsénico (As^{5+}) hay poca evidencia de los cambios geotécnicos, siendo Mogal *et al.* (2020) quienes han trabajado con metales pesados (As^{3+} , Cr^{6+} , Cu^{2+} , Hg^{2+} , Pb^{2+} y Zn^{2+}) y atribuyen los cambios volumétricos a los cambios en la DDL y a los cambios en pH. Debido a lo anterior, la presencia de As^{5+} en el suelo modificó el índice de compresibilidad volumétrica (m_v) y el coeficiente de consolidación (c_v) (Tabla 11) denotando el comportamiento de este contaminante en el suelo.

Tabla 11. Valores de consolidación

Concentración (mg/kg)	c_v (m^2/s)	m_v (m^2/s)	T_{50} (s)
0	3.15×10^{-8}	1.09×10^{-3}	1100
25	1.67×10^{-8}	9.99×10^{-4}	1533.33
50	2.79×10^{-8}	1.47×10^{-3}	900

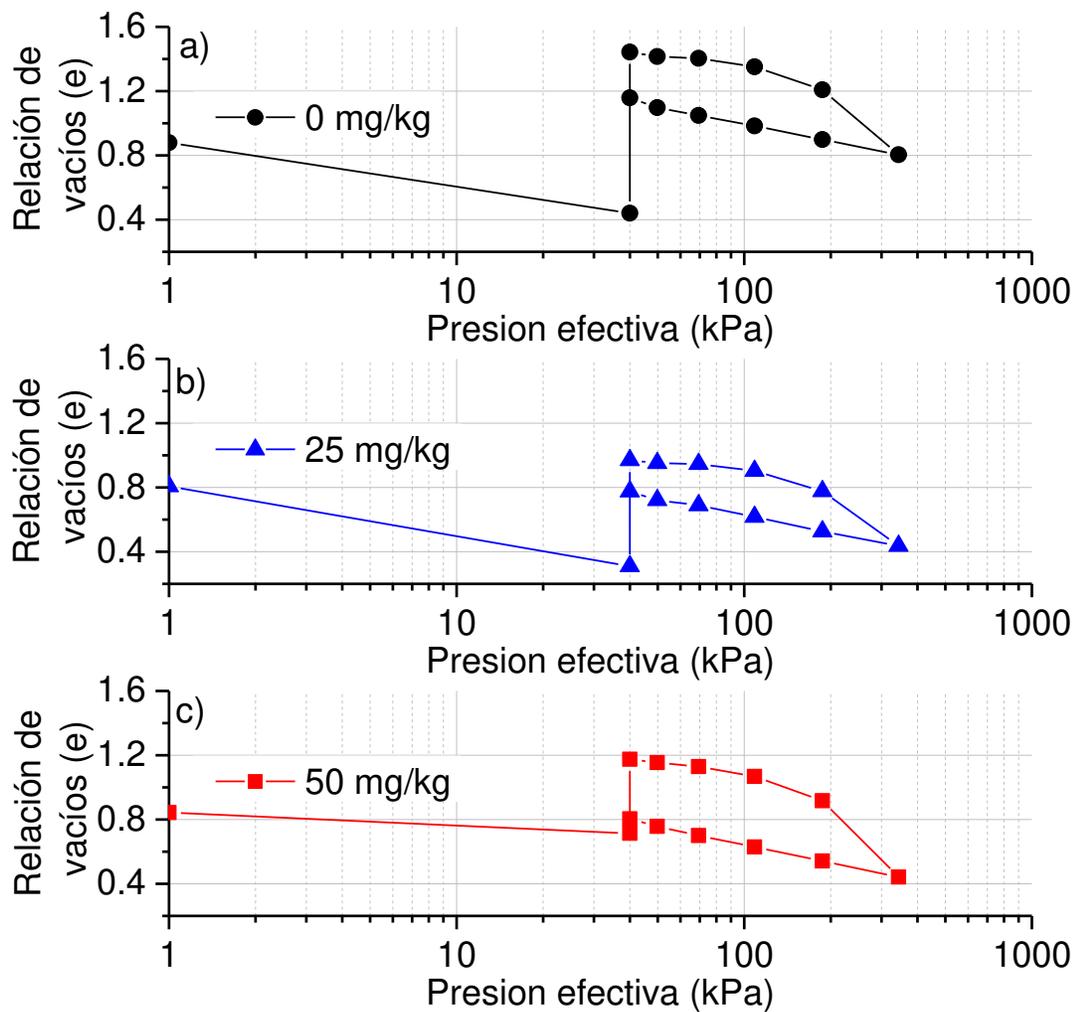


Figura 40. Curva de consolidación para muestras contaminadas con arsénico en:
a) 0 mg/kg, b) 25 mg/kg y c) 50 mg/kg

Al momento de contaminar con arsénico en 25 mg/kg, el m_v del suelo se comporta como uno menos compresible (es decir, una reducción de 8.74% respecto al valor natural), por lo que se esperaría presentara menores asentamientos que el estado natural bajo las mismas condiciones de carga y altura de estratos compresibles, mientras que con 50 mg/kg indica que el suelo se comporta como uno más compresible (aumento de 33.78% respecto al valor natural), es decir, los asentamientos serían mayores que el estado natural. Las curvas de consolidación se presentan de manera individual en la Figura 40 y comparativamente en la Figura 41.

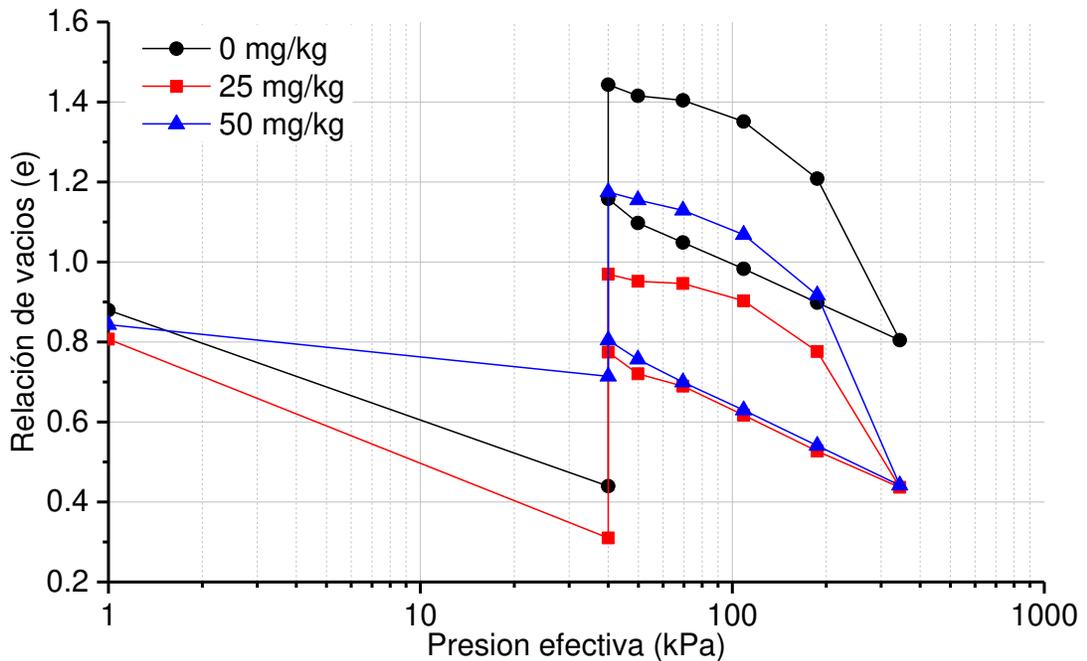


Figura 41. Pruebas de consolidación en muestras de suelo contaminado.

A partir de estos resultados podemos establecer que la relación de vacíos (e) sujeta a distintas cargas de consolidación decreció de manera general al momento de contaminar la muestra de suelo en ambas concentraciones. En un esfuerzo de 40.02 kPa (correspondiente a la aplicación de la primera carga) el estado natural (0 mg/kg) e tiene un valor de 1.44 (Figura 40a)), para 25 mg/kg e es

de 1.00 (Figura 40b)), lo cual corresponde a una reducción de 30.5%, finalmente para la concentración de 50 mg/kg e disminuye a 1.16 (reducción del 19.44% respecto al estado natural) (Figura 40c)).

Respecto al valor de e al momento de saturar la muestra, en estado natural, se expande desde $e = 0.44$ hasta $e = 1.44$ ($\Delta e = 1.00$), mientras que en 25 mg/kg lo hace desde $e = 0.31$ hasta $e = 1.00$ ($\Delta e = 0.69$), y finalmente en 50 mg/kg se expande desde $e = 0.71$ hasta 1.16 ($\Delta e = 0.45$), lo que se traduce en una disminución de 31% y 55% en 25 mg/kg y 50 mg/kg respectivamente. Los resultados muestran que se reduce el potencial de expansión, atribuido a las reacciones químicas entre el arsénico y el suelo, los cuales afectan la doble capa difusa incrementando la carga en iones de las partículas (Moghal *et al.*, 2020) y consecuentemente a la aglomeración de las partículas como se demostró en el Capítulo 4.6.

Estos resultados apoyan aún más la idea de considerar la modificación de los parámetros de consolidación en el transporte de solutos, puesto que se estarían obteniendo resultados erróneos en presencia de este contaminante. Es importante mencionar que estos resultados no pueden extrapolarse a otras concentraciones, puesto que se encontraron modificaciones en el comportamiento del fenómeno de consolidación aun con el mismo contaminante.

4.11 CONDUCTIVIDAD HIDRÁULICA

4.11.1 COEFICIENTE DE PERMEABILIDAD SATURADO

La Figura 42 muestra el montaje de la muestra para la prueba de permeabilidad y la Figura 43 los resultados del coeficiente de permeabilidad por medio del método de carga variable (ASTM D 5084) en muestras de suelo remoldeado no contaminadas y contaminadas con arsénico (25 mg/kg y 50 mg/kg)

utilizando los datos del estrato de referencia (peso específico de $1746.09 \text{ kg/m}^3 \pm 6.60 \text{ kg/m}^3$ y una humedad de $27.0\% \pm 0.3\%$)



Figura 42. Montaje de la muestra de suelo en estado natural para la prueba de conductividad hidráulica saturada.

Es interesante observar que el arsénico parece tener un efecto positivo en el comportamiento hidráulico de un suelo expansivo, debido a que el cambio del estado natural al estado contaminado supone un cambio de dos grados de magnitud en ambas concentraciones (25 mg/kg y 50 mg/kg), lo cual se traduce a que el suelo contaminado se comporta como si se tratara de un suelo granular, indicando que un líquido atravesará más rápido la masa de suelo en comparación a un suelo no contaminado.

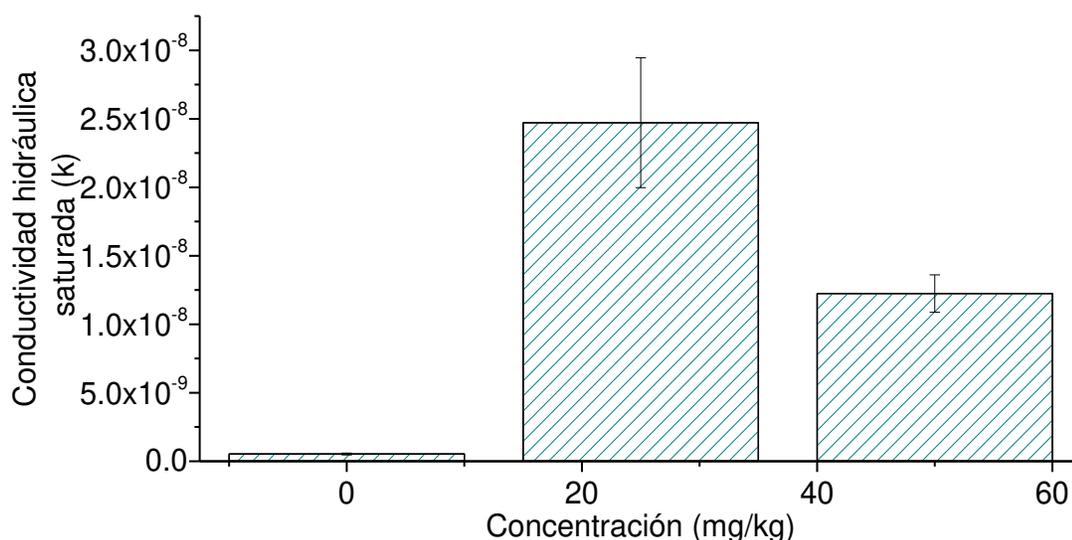


Figura 43. Conductividad hidráulica saturada para distintas concentraciones de arsénico.

Estos resultados confirman las conclusiones de Nayak *et al.*, 2007 quienes atribuyen el incremento de la conductividad hidráulica en suelos contaminados a la reacción química que genera cambios en el espacio entre los poros, ya que tanto la acidificación como alcalinización causan la disolución de los minerales de arcilla. Además, el efecto acidificante del As también pudo influenciar en la reducción del espesor de la doble capa difusa dando como resultado la formación de partículas de mayor tamaño, lo cual supone un aumento en su conductividad hidráulica saturada.

Debido a que el coeficiente de permeabilidad en suelos no saturados (función de conductividad hidráulica) se relaciona a la distribución de tamaño de poros y por tanto a la estructura, es obtenida a partir de los valores de succión (potenciales) (Fredlund *et al.*, 1994), por lo que, a partir de los resultados de granulometría se evidenció el aumento aparente de tamaño de partícula y se esperaba que el arsénico modifique el comportamiento hidromecánico del suelo, situación que se comprobó con la obtención del coeficiente de permeabilidad.

4.11.2 PREDICCIÓN DEL COEFICIENTE DE PERMEABILIDAD POR EL MÉTODO DE CONSOLIDACIÓN

Para evaluar el coeficiente de permeabilidad, se utilizó el método de consolidación en muestras contaminadas con arsénico. Los resultados de la prueba se presentan en la Tabla 12.

Tabla 12. Coeficiente de permeabilidad por medio del ensaye oedométrico

Concentración de As (mg/kg)	c_v (m ² /s)	E_m (N/m ²)	ρ_m (kg/m ³)	k (m/s)
0	3.15x10 ⁻⁸	9.1x10 ⁵	1000.000	3.2x10 ⁻¹⁰
25	1.67x10 ⁻⁸	1x10 ⁶	1001.102	1.6x10 ⁻¹⁰
50	2.79x10 ⁻⁸	6.8x10 ⁵	1002.031	4.0x10 ⁻¹⁰

A partir de estos datos, se puede observar que el coeficiente de permeabilidad mantiene en el mismo orden de magnitud sin importar la concentración de arsénico (0 mg/kg, 25 mg/kg, 50 mg/kg). Comparando los resultados, se evidencia un aumento del coeficiente de permeabilidad del 25% una vez que se contamina con 50 mg/kg de arsénico, lo cual muestra evidencia de los cambios físicos que sufre el suelo una vez contaminado (aumento en el tamaño de partícula y modificación de la DTP); sin embargo, en la concentración de 25 mg/kg de arsénico no se detectó un aumento del coeficiente de permeabilidad, ya que este disminuyó un 50% respecto al valor del suelo natural.

Si analizamos el suelo en estado natural encontramos que el coeficiente de permeabilidad es 40% inferior a lo obtenido por el permeámetro de carga variable, aun cuando se encuentran en el mismo orden de magnitud, los dos valores del coeficiente de permeabilidad son válidos para un análisis geotécnico. Sin embargo, no ocurre lo mismo con el estado contaminado, ya que no se reflejan las modificaciones físicas que sufre el suelo, de modo que los valores obtenidos en el

ensaye de consolidación no corresponden al comportamiento de un suelo contaminado.

En general, estos resultados indican que el uso de la ecuación de consolidación para la obtención del coeficiente de permeabilidad podría llevar a resultados inadecuados en un proyecto geotécnico. Además, la aplicación de la ecuación de consolidación requiere el considerar al peso específico como una mezcla de líquidos en lugar de considerarse el agua solamente, por lo cual para suelos contaminados debe ser evitada.

4.12 CARACTERIZACIÓN GEOTÉCNICA

En esta primera etapa del estudio se analizó el efecto del arsénico en el suelo utilizando un método de contaminación manual durante 6 semanas de tiempo de curado para asegurar la correcta homogenización y estudiar los efectos a largo plazo. El resumen de los resultados se presenta en la Tabla 13 e indican un cambio en el comportamiento hidráulico y mecánico al momento de ser contaminada la masa de suelo con arsénico, mostrando una tendencia del suelo contaminado a comportarse como si se tratara de un suelo más grueso, especialmente notable en la cohesión, fricción y permeabilidad al momento de compararlos con el estado natural, debido a los cambios físicos y químicos desarrollados al contaminarse.

Tabla 13. Caracterización geotécnica de un suelo contaminado con arsénico en distintas concentraciones.

PROPIEDADES	0 mg/kg	25 mg/kg	50 mg/kg	UNIDAD
Densidad de sólidos	2.59 ± 0.004	2.49 ± 0.016	2.54 ± 0.008	-
Densidad del suelo	1,746.09 ± 6.60	-	-	kg/m ³
Contenido de agua de sitio	27.00 ± 0.3	-	-	%
Límite líquido	79.79 ± 0.12	77.04 ± 0.36	86.56 ± 0.29	%
Índice plástico	42.17 ± 0.12	41.91 ± 0.36	52.06 ± 0.29	%

Límite plástico	37.61 ± 0.00	35.13 ± 0.00	34.50 ± 0.00	%
Contracción lineal longitudinal	20.26 ± 0.83	19.14 ± 0.60	20.62 ± 0.26	%
Contracción lineal transversal	21.47 ± 1.37	21.24 ± 1.22	21.20 ± 1.51	%
Clasificación (SUCS)	MH	CH	CH	-
Contenido de grava	0.00	13.633 ± 2.727	3.869 ± 0.220	%
Contenido de arena	92.41 ± 1.059	77.20 ± 3.203	93.45 ± 1.381	%
Contenido de finos	7.588 ± 1.059	9.167 ± 1.059	2.679 ± 1.371	%
Permeabilidad	$5.30 \times 10^{-10} \pm 6.29 \times 10^{-11}$	$2.47 \times 10^{-8} \pm 4.74 \times 10^{-9}$	$1.22 \times 10^{-8} \pm 1.36 \times 10^{-9}$	m/s
Peso específico seco	1,309.21	1,326.65	NP	kg/m ³
Contenido óptimo de agua	16.00	13.74	NP	%
pH	8.04 ± 0.03	7.93 ± 0.02	7.80 ± 0.02	-
Superficie específica	111.136	93.349	101.965	m ² /g
Ángulo de fricción interna	13.40	30.79	34.73	°
Cohesión	5,107.96	5,450.30	2,465.63	kg/m ²

NP = No presenta

4.13 SUCCIÓN

4.13.1 SUCCIÓN DEL SUELO NO CONTAMINADO

Los resultados de succión del suelo no contaminado correspondientes a la succión total y succión mátrica en muestras de suelo remoldeado con un peso específico de $1746.09 \text{ kg/m}^3 \pm 6.60 \text{ kg/m}^3$ y una humedad de $27.00\% \pm 0.3\%$, se ilustran en la Figura 44a) y Figura 44b). Todos los valores de succión son el resultado del uso de la prueba de papel de filtro utilizando el papel Whatman No. 42.

Los valores de succión se presentan en valores desde 1kPa hasta 1×10^6 kPa, mientras que el grado de saturación (al considerar el suelo no contaminado,

nos referimos al contenido de agua) se presenta de manera normalizada, que varía de 0 a 1.

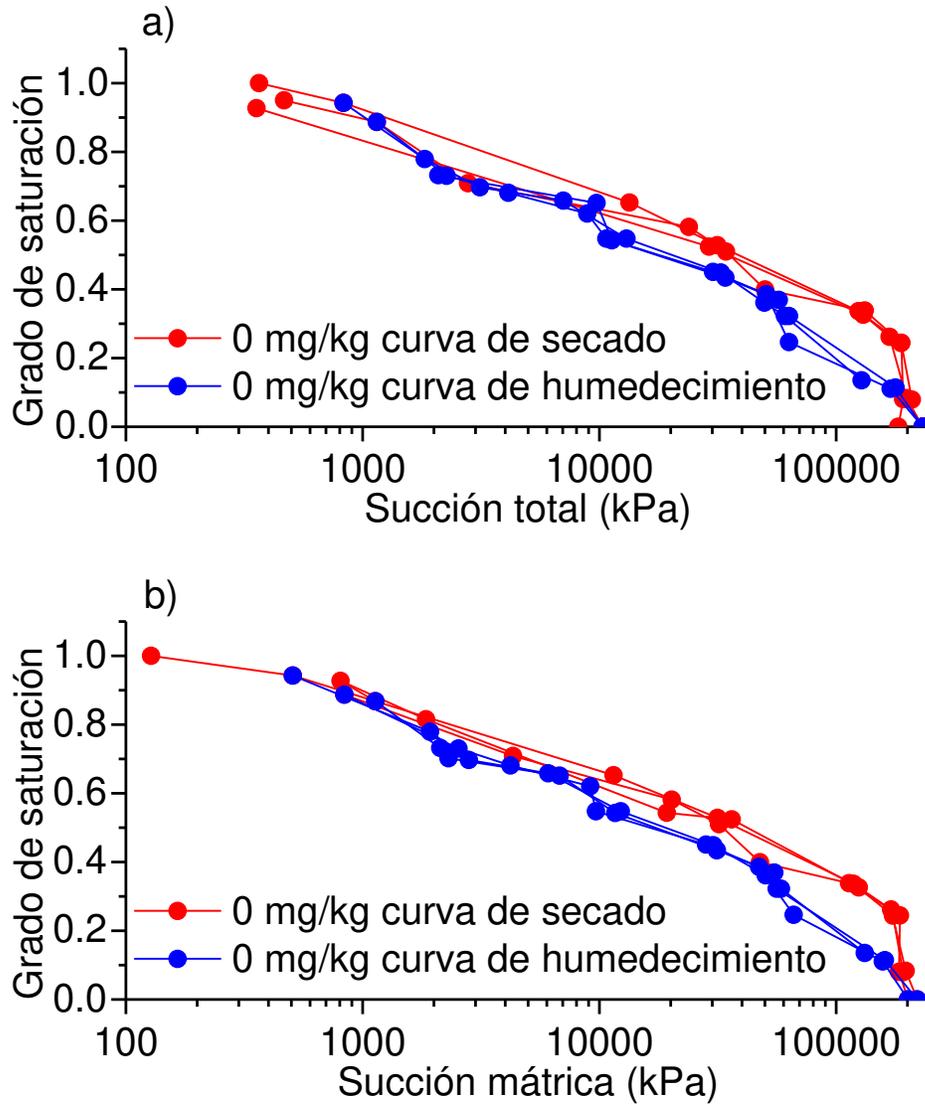


Figura 44. SWRC 0 mg/kg, Succión vs grado de saturación: a) succión total y b) succión mátrica

4.13.2 SUCCIÓN DE UN SUELO CONTAMINADO CON ARSÉNICO

Los resultados de la calibración del papel filtro Whatman No. 42 para la obtención de la succión total se presentan en la Figura 45, la cual los compara con los valores obtenidos por la norma ASTM D 5298-16. El análisis estadístico se muestra en la Tabla 14, que incluye la media (\bar{x}) de tres mediciones en siete concentraciones de As-NaCl, además de la desviación estándar (σ). Estos valores son reveladores en cuanto a la recta resultante de la calibración, ya que indican que el contenido de líquido en el papel filtro disminuye en comparación con los valores reportados en la norma ASTM D 5298-16 y por Likos y Lu (2002).

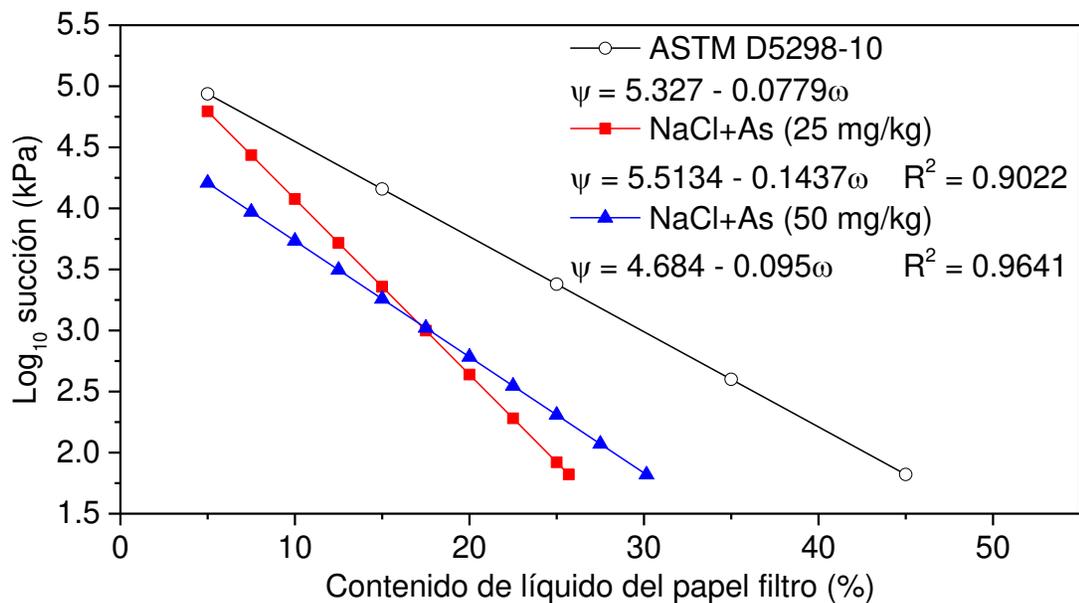


Figura 45. Calibración de papel filtro Whatman No. 42 en muestras contaminadas con arsénico.

Estos resultados tienen dos propósitos, el primero de ellos es la validación de la suposición de los cambios de succión producto del intercambio de vapores por la contaminación química en suelos. En segundo lugar, estos resultados proporcionan una ecuación para evaluar la succión total para suelos contaminados con arsénico, en donde la succión osmótica tiene un importante cambio una vez contaminada la masa de suelo. Estos resultados deben ser comentados, ya que al

momento de revisar la información disponible en la literatura no hay evidencia de la calibración de papel de filtro para la obtención de la succión para el suelo con contaminantes.

Tabla 14. Análisis estadístico de la calibración del papel filtro Whatman no. 42.

kPa	Succión			25 mg/kg		50 mg/kg	
	Log kPa	pF	atm	\bar{x}	σ	\bar{x}	σ
-98	1.99	3.00	-0.97	22.3889	0.608	29.277	0.852
-268	2.43	3.44	-2.64	21.6956	0.529	24.566	2.985
-310	2.49	3.50	-3.02	22.3150	0.486	20.332	0.341
-585	2.77	3.77	-5.77	17.3901	4.529	19.436	0.579
-980	2.99	4.00	-9.68	19.1201	1.968	18.057	1.001
-3099	3.49	4.50	-30.19	15.2668	1.249	13.650	0.148
-9800	3.99	5.00	-96.77	10.1656	1.744	7.677	0.316

Estos resultados sugieren que incluso si la concentración de arsénico se incrementa, la ecuación resultante tendría una ecuación similar debido a las posiciones de los puntos de la calibración, es decir, los puntos siguen un patrón similar que cambia por la desviación estándar que afecta el coeficiente de determinación (R^2) como se observa en la Figura 45 siendo la concentración de 50 mg/kg de arsénico la que cuenta con un mejor ajuste en comparación a la concentración de 25 mg/kg.

A partir de los resultados de la calibración del papel filtro se evaluaron muestras de suelo contaminado para determinar la succión del suelo. Los resultados se muestran en la Figura 46 y Figura 47, las cuales muestran los valores de succión para las trayectorias de humedecimiento y secado y son comparadas con el estado sin contaminar. Estos valores muestran claramente el cambio en la forma de la curva, el cual es asociado a los cambios físicos y mecánicos asociados a la interacción con el arsénico como son el tamaño de partícula, el pH y la permeabilidad.

Las diferencias entre las trayectorias de humedecimiento en estado contaminado y el estado natural se resaltan en la Figura 46. Si comparamos ambas condiciones en un grado de saturación alto ($s_r = 0.95$), el estado natural alcanza un valor de 828 kPa mientras que la condición contaminada es de 290 kPa, lo cual supone una disminución de 2.85 veces. Comparando ahora un grado de saturación bajo ($s_r = 0.20$), el estado natural alcanza un valor de 101,900 kPa y el estado contaminado un valor de 173,000 kPa, lo que supone un aumento de 1.69 veces una vez que el suelo se contamina. Basándonos en estos resultados es posible decir que solo en grados de saturación entre 0.3 y 0.6 los valores de succión son similares para las distintas concentraciones de arsénico lo cual corresponde a la mesoestructura de acuerdo con la ecuación de Laplace (5,760 kPa – 144,000 kPa).

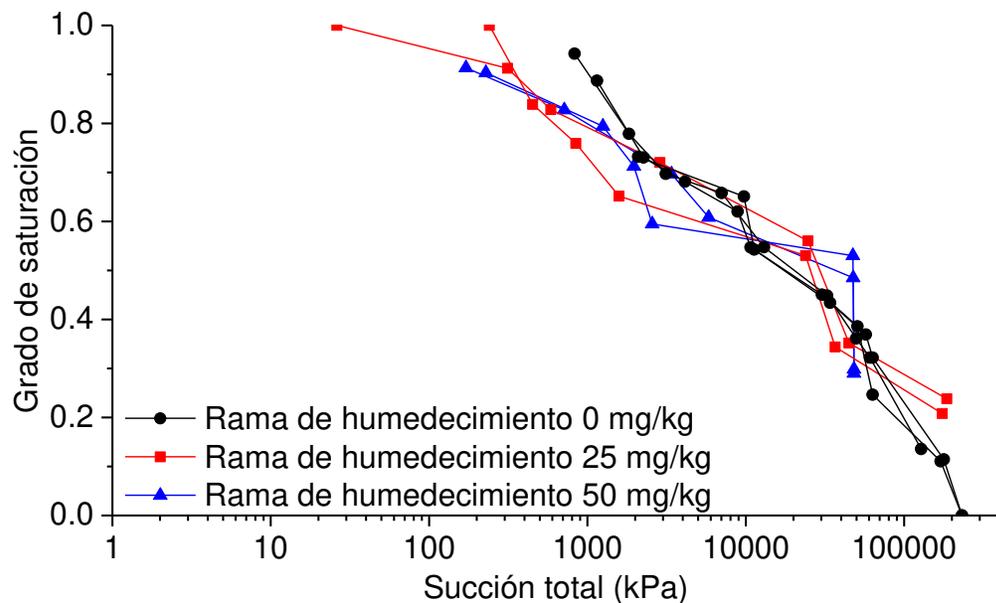


Figura 46. Trayectoria de humedecimiento agua-suelo-contaminante.

De forma similar la trayectoria de secado en ambas concentraciones de arsénico muestra modificaciones en los valores de succión asociados a los macroporos (< 5,760 kPa) y microporos (> 144,000 kPa). La Figura 47 muestra las trayectorias de secado en diferentes concentraciones de arsénico, curiosamente, también se observó un comportamiento similar en los valores altos de grado de

saturación ($s_r = 0.95$), donde el estado natural muestra valores de succión entre 350 kPa y 700 kPa, mientras que el estado contaminado muestra una disminución de los valores de succión modificándose a 120 kPa y 250 kPa, lo cual supone una modificación de cerca de 2.8 veces una vez que se contamina el suelo. Comparando ahora grados de saturación bajos ($s_r = 0.15$), el estado natural presenta un valor de 190,000 kPa mientras que el estado contaminado presenta valores de succión de 260,000 kPa, lo cual supone un aumento de 1.36 veces una vez se contamina el suelo.

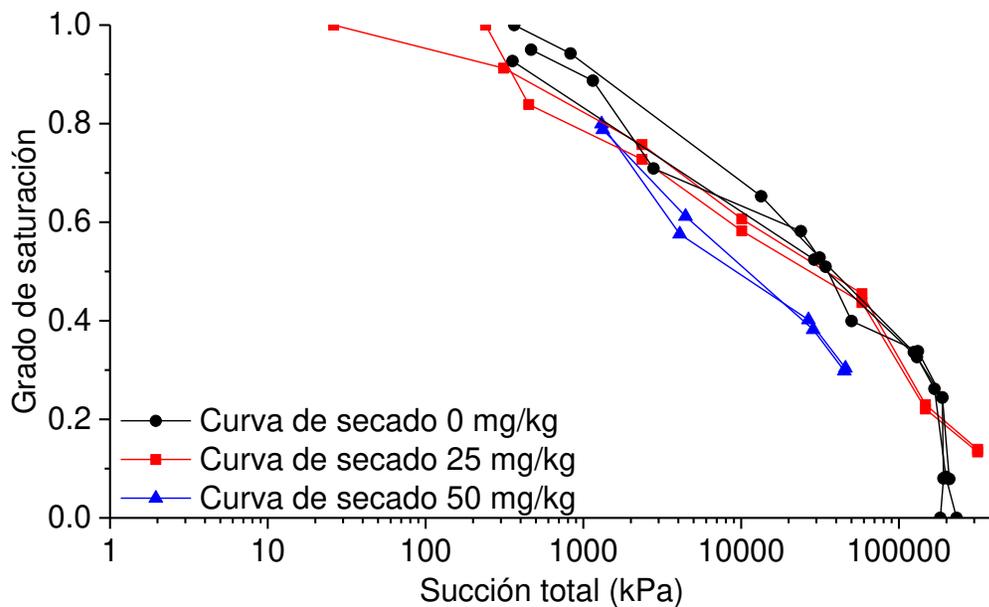


Figura 47. Trayectoria de secado agua-suelo-contaminante

En general, estos resultados indican que en grados de saturación elevados el suelo se comporta como un suelo granular (puesto que valores de succión bajos son gobernados por la macroestructura), lo cual confirma los resultados obtenidos en el tamaño de partícula y las micrografías SEM.

Los cambios en las curvas de retención se compararon evaluando los valores de succión con la curva de calibración tradicional a fin de encontrar una fuerte evidencia de la modificación de la metodología cuando se utilizan muestras contaminadas. Los resultados de la trayectoria de humedecimiento se muestra en

la Figura 48, los valores de no considerar una calibración para obtener la succión en muestras contaminadas fueron mayores que el estado natural y se muestra que en grados de saturación entre 0.2 y 0.6 el valor de succión permanece casi constante, sin embargo a grados de saturación mayores a 0.6 el valor de succión es superior al estado natural, lo cual supone un aumento de al menos 2.4 veces (en un grado de saturación de 0.94) cuando se encuentra en estado contaminado.

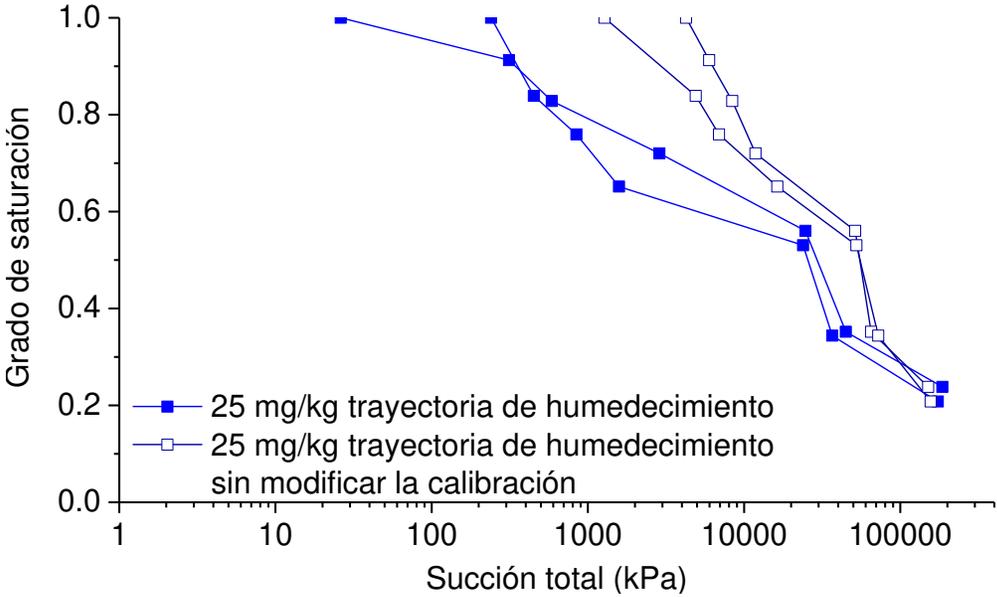


Figura 48. Comparación de la trayectoria de humedecimiento agua-suelo-contaminante.

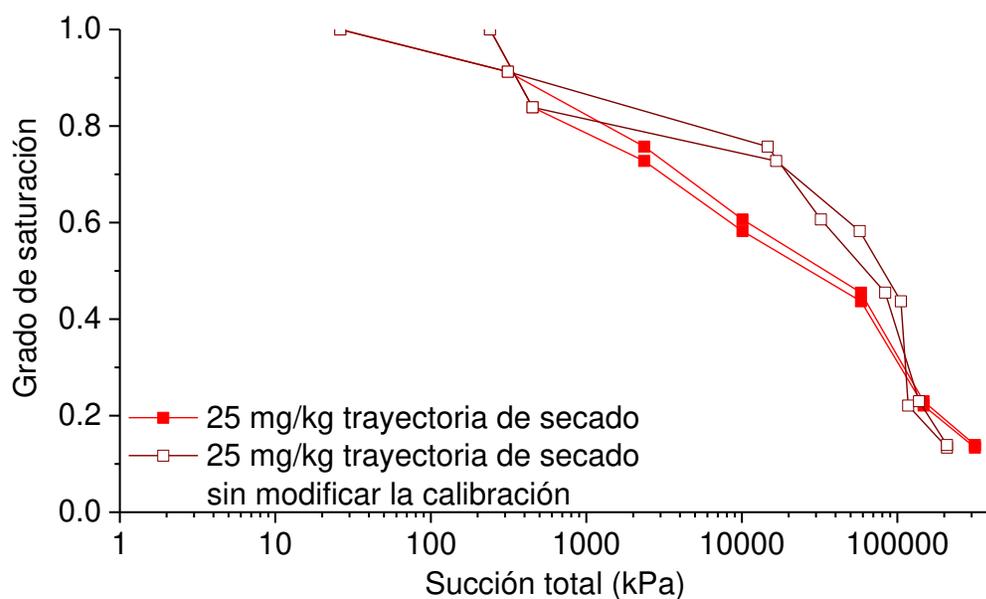


Figura 49. Comparación de la trayectoria de secado agua-suelo-contaminante. Succión total (kPa) vs Grado de saturación.

De manera similar, la trayectoria de secado mostrada en la Figura 49 muestra que la curva obtenida sin modificar la calibración exhibe valores de succión superiores al estado natural, lo que supone que algún método de estabilización requiere ser utilizado para controlar y minimizar los cambios de volumen en el suelo contaminado.

Anteriormente Cabello-Suarez (2015) examinó los efectos en la curva de retención producto de la contaminación con hidrocarburos y los resultados son consistentes en cuanto a la forma de la curva de retención, por lo que se resaltaba la importancia de la modificación de la metodología para obtener la succión en suelos contaminados considerando la variable química para describir adecuadamente el comportamiento hidromecánico del suelo. Los resultados proporcionaron el soporte para evaluar la SWRC por medio de la calibración del papel filtro al momento de trabajar con muestras contaminadas como consecuencia del intercambio de vapores de la contaminación química con arsénico.

4.14 POROSIMETRÍA

Uno de los aspectos que afectan la succión mátrica son las fuerzas capilares (tamaño de partícula y tamaño de poros) (Farouk *et al.*, 2004), y los resultados de succión evidenciaron un fuerte descenso, por lo que, para evaluar estos cambios, pruebas de porosimetría fueron realizados en las dos concentraciones de arsénico. Los resultados se muestran en la Figura 50a), mostrando la presión relativa ($0 < p/p_0 < 1$) y volumen adsorbido (cc/g). Estos resultados indican un isoterma tipo IV de acuerdo a la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC por sus siglas en inglés) con una histéresis tipo H3, la cual es característica de sólidos mesoporosos como la arcilla y sólidos relacionados con agregados en forma de placas paralelas.

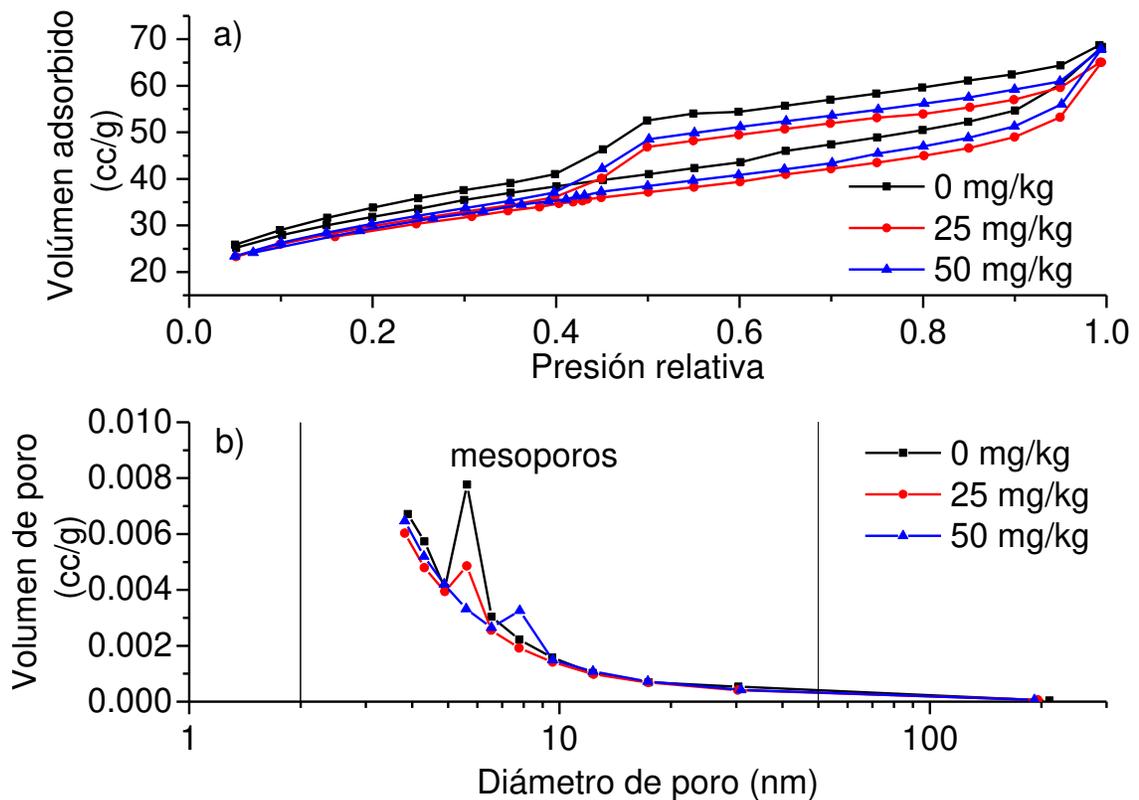


Figura 50. Pruebas de porosimetría, a) Isotermas para muestras contaminadas y b) distribución de tamaño de poro

Como se esperaba, la superficie específica disminuyó (16% y 8.99% para 25 mg/kg y 50 mg/kg, respectivamente), así como el volumen adsorbido después de haberse contaminado las muestras, sugiriendo que el arsénico modifica la estructura del suelo, lo cual resulta en el aglomeramiento de partículas sólidas. La Figura 50(b) indica la contribución de cada tamaño de diámetro de poro mostrando que el estado natural tiene un pico en la distribución en 5.6282 nm. A medida que el arsénico se incrementa a 50 mg/kg se reduce el volumen adsorbido como se muestra en la Tabla 15 y el diámetro de poro se modifica hacia poros de mayor tamaño (7.8141 nm).

Tabla 15. Diámetro de poro y superficie específica

Concentración (mg/kg)	Superficie específica (m ² /g)	Volumen adsorbido (cm ³ /nm/g)	Diámetro de poro (nm)
0	111.136	0.00777	5.6282
25	93.349	0.00486	5.6845
50	101.965	0.00325	7.8141

En otras palabras, el suelo se comporta como un material grueso a medida que se aumenta la concentración de arsénico. Esto se explica a partir del hecho de que el área específica de un sólido es una combinación de todas las áreas de las partículas en la masa de suelo, generando una relación inversa entre el tamaño de partícula y la superficie específica, es decir, mientras más grande es el tamaño de la partícula menor es su superficie específica (Ciesla *et al.*, 2018). Además, la adsorción es definida como la acumulación de material sobre la superficie (De Gisi *et al.*, 2016) y, en los resultados obtenidos se evidencia que la reducción del potencial de adsorción disminuye la superficie específica porque el adsorbato (N₂) requerido para llenar los poros del suelo es menor que la condición natural, lo cual resulta en el cambio en la posición de las isotermas.

En general, estos resultados indican que la succión mátrica de las muestras contaminadas se reduce debido a los cambios estructurales generados en la masa

de suelo. Esto se explica por la relación inversa entre la succión y el radio de curvatura de la superficie contráctil en la ecuación de Laplace (cuando la succión decrece, el radio de curvatura se incrementa).

4.15 AJUSTE DE LA CURVA DE RETENCIÓN A TRAVÉS DE LA CURVA GRANULOMÉTRICA POR EL MÉTODO DE FUENTES (1992)

Las curvas de retención fueron simuladas por medio del modelo de Fuentes *et al.* (1992), que ajusta los valores de las restricciones de la curva de retención usados en el modelo de van Genuchten (1980) (Mualem y Burnide) por medio de la granulometría y por medio de los modelos fractales Poro grande, Media geométrica y Poro neutro (Fuentes *et al.*, 2020). Los valores obtenidos de esta simulación se reportan en la Tabla 16, en la que se muestra una modificación esperada del diámetro equivalente de la partícula de suelo una vez contaminado con arsénico, incrementando su valor en casi todos los modelos para describir la curva de retención. A partir de estos datos, se puede establecer una disminución en los valores de succión mátrica evaluando la ecuación de Laplace (cuando la succión disminuye el radio de curvatura del menisco aumenta), lo cual modificará la forma de la SWRC.

Tabla 16. Resultados del ajuste de la curva granulométrica para obtener la SWRC

Modelo	Diámetro equivalente (μm)		
	As: 0 mg/kg	As: 25 mg/kg	As: 50 mg/kg
Burdine	2264.33 \pm 21.39	2580.00 \pm 305.43	2298.50 \pm 78.06
Mualem	2267.67 \pm 33.29	2238.17 \pm 50.76	2336.00 \pm 57.66
Media geométrica	2181.00 \pm 43.59	2230.00 \pm 171.68	2408.17 \pm 74.88
Poro neutro	2527.67 \pm 30.55	2589.67 \pm 233.43	2524.33 \pm 30.55
Poro grande	2630.17 \pm 40.18	2838.50 \pm 412.56	2646.83 \pm 83.23

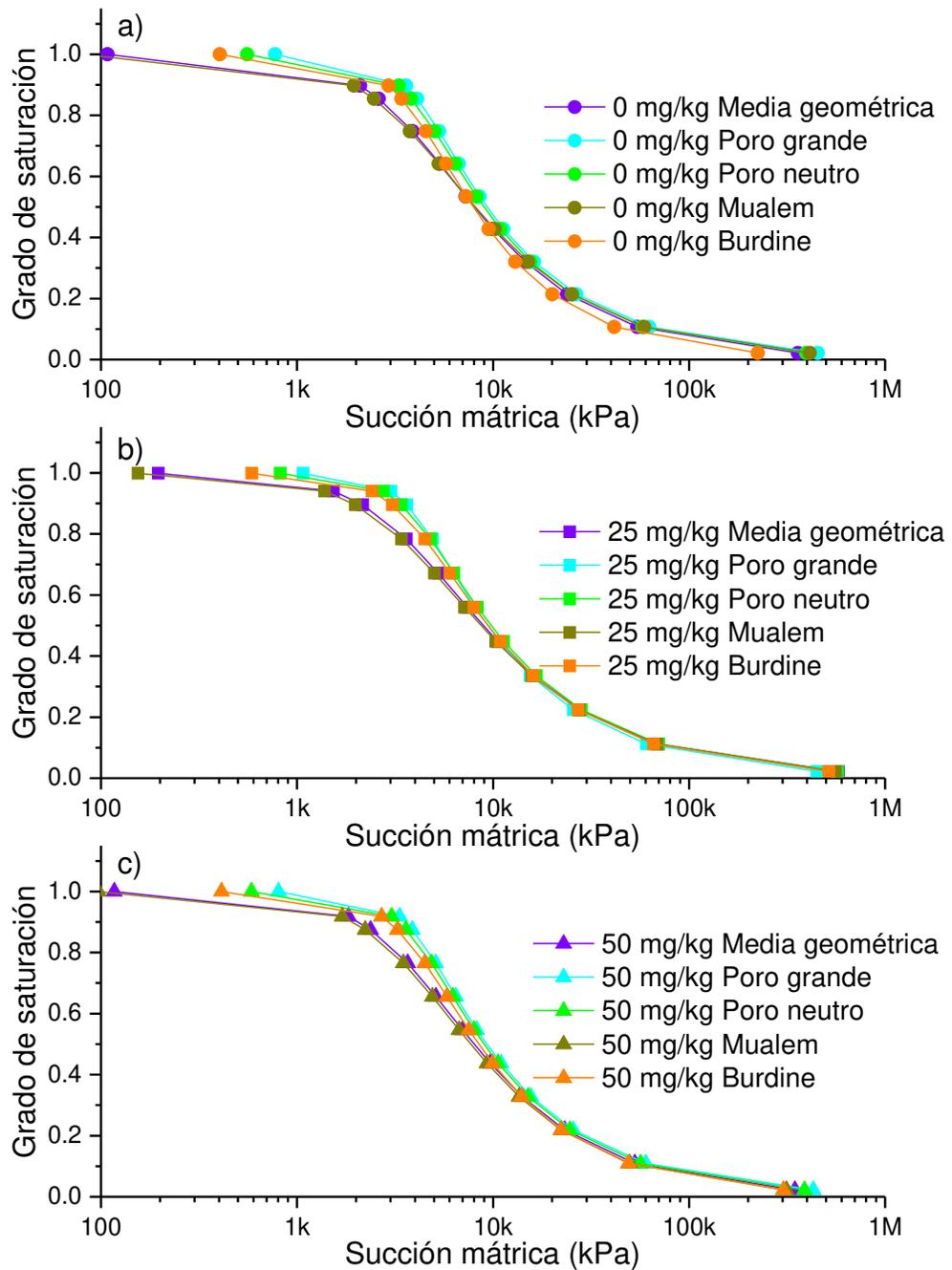


Figura 51. Comparación de las SWRC obtenidas por simulación para muestras contaminadas con arsénico: a) 0 mg/kg, b) 25 mg/kg y c) 50 mg/kg.

Como se puede verificar en la Tabla 16 el diámetro equivalente de partícula alcanzó su valor máximo con el modelo de poro grande en las 3 concentraciones de

arsénico (0 mg/kg, 25 mg/kg y 50 mg/kg), alcanzando valores 15% más grandes que el valor mínimo en la simulación (media geométrica para 0 mg/kg y 25 mg/kg y Burdine para 50 mg/kg). Una vez que se considera la concentración de 25 mg/kg el aumento en el tamaño de partícula respecto al estado natural (0 mg/kg) fue entre 2% y 14%, mientras que para la concentración de 50 mg/kg el aumento fue entre 0.6% y 9%.

La Figura 51 compara las SWRC bajo 3 concentraciones de arsénico (0 mg/kg, 25 mg/kg y 50 mg/kg). Comparando las SWRC se muestra una modificación de la forma de la curva en altos grados de saturación ($s_r > 70\%$) sin importar la concentración en la simulación, además en $s_r < 70\%$ la forma no sufrió una gran variación. Tomados estos resultados concuerdan con los de Fuentes & Rendón (2017) quienes destacan que a pesar de las diferencias de los valores de las restricciones del modelo de van Genuchten, las curvas de retención obtenidas por el modelo de Fuentes se comportan similar sin importar el modelo usado.

4.15.1 COMPARACIÓN DE LAS CURVAS DE RETENCIÓN OBTENIDAS POR LA SIMULACIÓN DE FUENTES CON LAS OBTENIDAS DEL PAPEL FILTRO

Los resultados, como se muestra en la Tabla 17, indican que el valor de la restricción n del modelo de van Genuchten sufrió una gran variación, aumentando su valor cuando se consideran los modelos de la simulación, sin importar el modelo. El valor más cercano al método de papel filtro con el suelo natural (0 mg/kg) fue el modelo de Mualem, sin embargo, la simulación proporciona valores 27% más grandes.

De manera similar, el suelo contaminado muestra un incremento en el valor n cuando se considera la simulación de las SWRC, comparándolo directamente con el valor de la restricción en el modelo de Mualem, el aumento es de 49% y 59% para la concentración de 25 mg/kg y 50 mg/kg, respectivamente, lo cual resulta en un cambio en la forma de la SWRC. Dicho cambio es explicado a través de la

correlación entre la restricción n y la distribución de tamaño de poro, ya que es función de la pendiente de la SWRC (van Genuchten, 1980; Taban *et al.*, 2018). La comparación de las SWRC simuladas y las de papel de filtro se muestra en la Figura 52 para las tres concentraciones de arsénico con el modelo de Mualem.

Tabla 17. Valores de la restricción n para ajustar la SWRC

Concentración de arsénico	Restricción n					
	Papel de filtro (Mualem)	Burdine	Mualem	Media geométrica	Poro neutro	Poro grande
0 mg/kg	1.44 ± 0.03	2.96 ± 0.01	1.83 ± 0.02	1.96 ± 0.02	3.33 ± 0.08	3.87 ± 0.02
25 mg/kg	1.19 ± 0.00	2.78 ± 0.06	1.77 ± 0.08	1.89 ± 0.06	3.26 ± 0.06	3.83 ± 0.08
50 mg/kg	1.18 ± 0.01	2.88 ± 0.04	1.88 ± 0.04	1.96 ± 0.03	3.31 ± 0.02	3.86 ± 0.05

Una forma alternativa de presentar los resultados de las SWRC simuladas es por medio de dos consideraciones: primero, la comparación de las SWRC del suelo natural (0 mg/kg), y segundo, la comparación de las SWRC en distintos grados de contaminación (25 mg/kg y 50 mg/kg), en ambos casos se considera el modelo de Mualem para la comparación directa.

Comparando el estado natural (Figura 52(a)), se presentan valores de succión mayores con el método de papel filtro, particularmente notables en la forma de la SWRC. El máximo valor de succión mátrica por medio del papel de filtro es de 1.30×10^8 kPa ($s_r = 1\%$), mientras que en la simulación el valor máximo de succión mátrica es de 4.13×10^5 kPa ($s_r = 1\%$), lo cual se traduce en una disminución de tres órdenes de magnitud cuando se utiliza la simulación. A medida que se aumenta el grado de saturación la diferencia de valores disminuye hasta que se alcanzan altos grados de saturación ($s_r > 70\%$), donde valores similares de succión mátrica se obtienen en los dos métodos.

La segunda consideración incluye la comparación de las concentraciones de 25 mg/kg y 50 mg/kg de arsénico. Para la concentración de 25 mg/kg (Figura 52(b)) con la simulación de la SWRC se obtienen valores menores que el método de papel de filtro, particularmente notables en la forma de la SWRC en bajos grados de saturación ($s_r < 45\%$). Por ejemplo, a $s_r = 20\%$, la succión mátrica simulada tiene un valor 25 veces menor que el método de papel de filtro, y a $s_r = 40\%$, la diferencia es de 1.5 veces menor que el método de papel de filtro.

Por otra parte, en altos grados de saturación ($s_r = 99\%$) los valores de succión mátrica en la simulación son ocho veces más grandes que el método de papel de filtro. De manera similar, para la concentración de 50 mg/kg (Figura 52(c)) los valores de succión mátrica con la simulación son menores que los del papel de filtro, esta tendencia se mantiene hasta alcanzar un $s_r = 65\%$, punto en el que se tiene el mismo valor de succión mátrica.

La disminución de los valores de succión mátrica puede explicarse en parte por el número de puntos utilizados para realizar el ajuste de van Genuchten con las curvas de succión por el método de papel de filtro en bajos grados de saturación. Sin embargo, otra explicación posible es el valor obtenido de la restricción n , el cual modifica la pendiente de la SWRC, y por lo tanto el aumento en este parámetro resulta en la disminución de los valores de succión. Este resultado puede repercutir en el uso de un método de estabilización si las curvas simuladas se utilizan en un estudio geotécnico, a pesar de que podría no ser necesario.

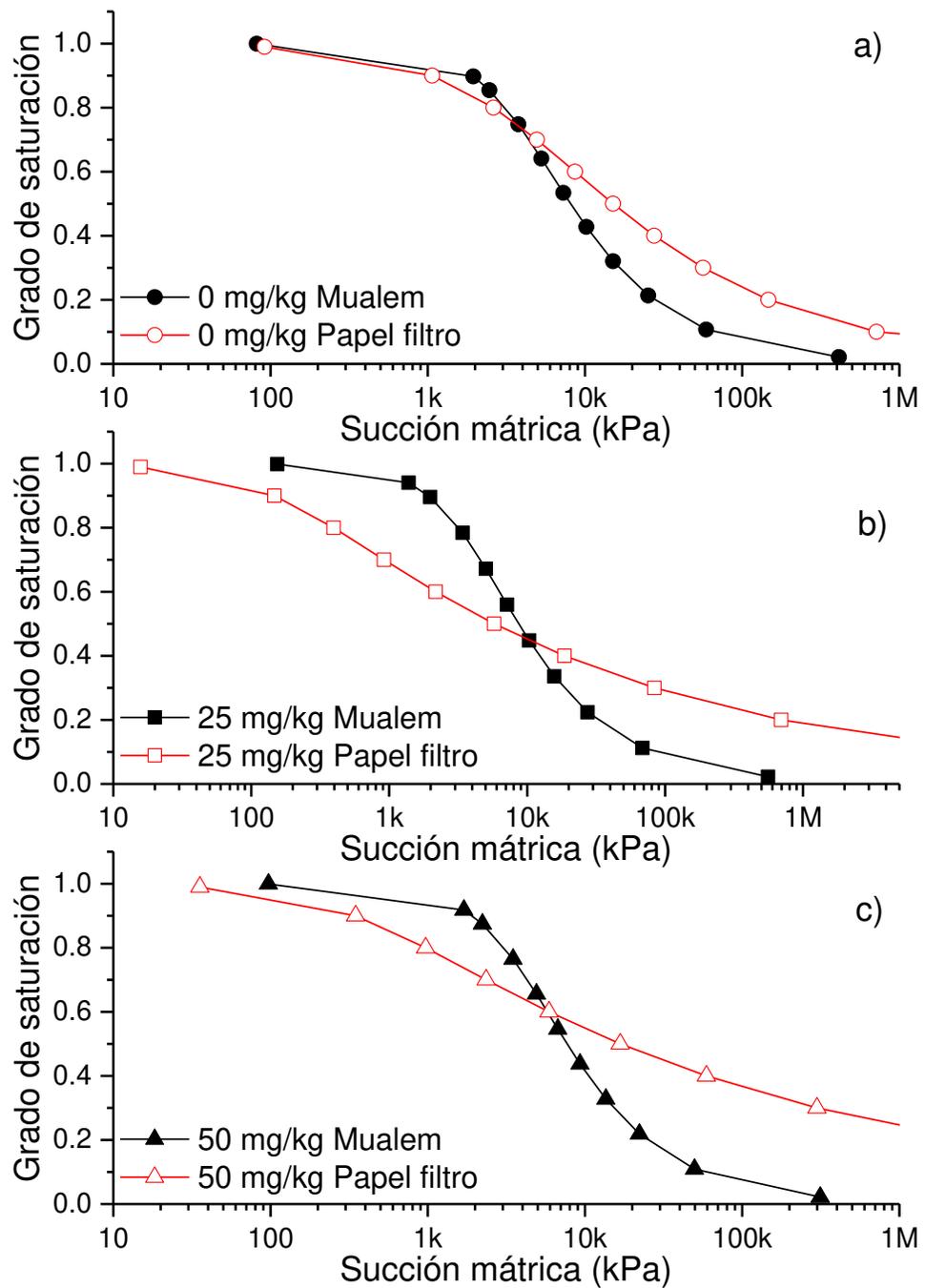


Figura 52. Comparación de las SWRC simuladas vs papel filtro con Mualem: a) 0 mg/kg, b) 25 mg/kg y c) 50 mg/kg.

Cambios físicos atribuidos a las reacciones químicas entre el arsénico y el suelo resultan en la formación de partículas de mayor tamaño, verificado mediante los resultados de la evaluación de los modelos fractales. Sin embargo, aun con estos incrementos en los diámetros de partícula, las diferencias entre las curvas de retención siguen siendo grandes.

La información disponible sobre la succión en suelos contaminados demuestra que la curva de retención evaluada con el método de papel de filtro resulta diferente al del suelo no contaminado (Cabello-Suárez *et al.*, 2017; Vásquez-Nogal & Hernández-Mendoza, 2022); es decir, sus valores son menores y su posición no sigue la forma clásica de la curva descrita en la ecuación de van Genuchten (1980), por lo cual podría resultar en un análisis hidráulico inadecuado (Función de conductividad hidráulica) cuando se utiliza este método. Por lo anterior es posible que este método para obtener la succión mátrica pueda no aplicar a muestras contaminadas, debido a que la proporción de la succión mátrica se ve disminuida en muestras contaminadas (Vásquez-Nogal & Hernández-Mendoza, 2022).

El uso de métodos indirectos para obtener la SWRC en suelos contaminados, como es el modelo de Fuentes, proporciona resultados rápidos en comparación a otras técnicas, debido a que utiliza parámetros sencillos como es la curva de retención, disminuyendo el tiempo de análisis. Sin embargo, su uso debe de realizarse con cuidado, ya que una vez realizado el ajuste de los parámetros m y n es necesario seleccionar un valor de succión de entrada de aire (ψ_d), el cual puede ser obtenido por otros medios como es la información disponible en la literatura o por medio del método de papel de filtro en muestras de suelo con altos grados de saturación.

4.15.2 COMPARACIÓN DE LAS FUNCIONES DE CONDUCTIVIDAD HIDRÁULICA (FCH) OBTENIDAS POR LA SIMULACIÓN DE FUENTES CON LAS OBTENIDAS DEL PAPEL DE FILTRO

La conductividad hidráulica saturada (k) utilizada para obtener la FCH para el estado natural (0 mg/kg) es de 5.3×10^{-10} m/s \pm 6.2×10^{-11} m/s, la de 25 mg/kg cuenta con un valor de 2.5×10^{-8} m/s \pm 4.7×10^{-9} m/s, y para la última concentración de arsénico (50 mg/kg) es de 1.2×10^{-8} m/s \pm 1.4×10^{-7} m/s. En aras de claridad al momento de comparar las FCH por ambos métodos, el análisis se presenta en dos fases: (I) la FCH del suelo natural y (II) la comparación de la FCH del suelo contaminado.

En la primera fase (Figura 53a)), la comparación de las FCH muestra que no existe una gran variación de los valores de conductividad hidráulica entre los dos métodos. Sin embargo, a altos valores de succión, la conductividad hidráulica de las curvas simuladas no corresponde a los valores obtenidos por el método de papel de filtro, debido al ajuste de van Genuchten, en el cual las restricciones controlan la pendiente de la SWRC, y por consiguiente los valores de succión mátrica.

En la segunda fase, comparando la FCH de 25 mg/kg (Figura 53 (b)), se muestra que sufre una gran variación en la forma de la FCH, afectada por el ajuste de van Genuchten, dichos resultados son afectados por el valor de las restricciones m y n ($m = 0.43 \pm 0.03$ para las curvas simuladas, y $m = 0.16 \pm 0.00$ para las curvas del método de papel de filtro).

Aun cuando los resultados se encuentran en el mismo orden de magnitud, las curvas simuladas cuentan con resultados mayores que el papel filtro. Para $s_r = 90\%$ el valor de conductividad hidráulica en las curvas simuladas es 18 veces más pequeño que el del papel de filtro. Para la concentración de 50 mg/kg se encontraron resultados similares al momento de compararse las FCH ($m = 0.47 \pm 0.01$ para las curvas simuladas, y $m = 0.15 \pm 0.01$ para las curvas del método de papel de filtro).

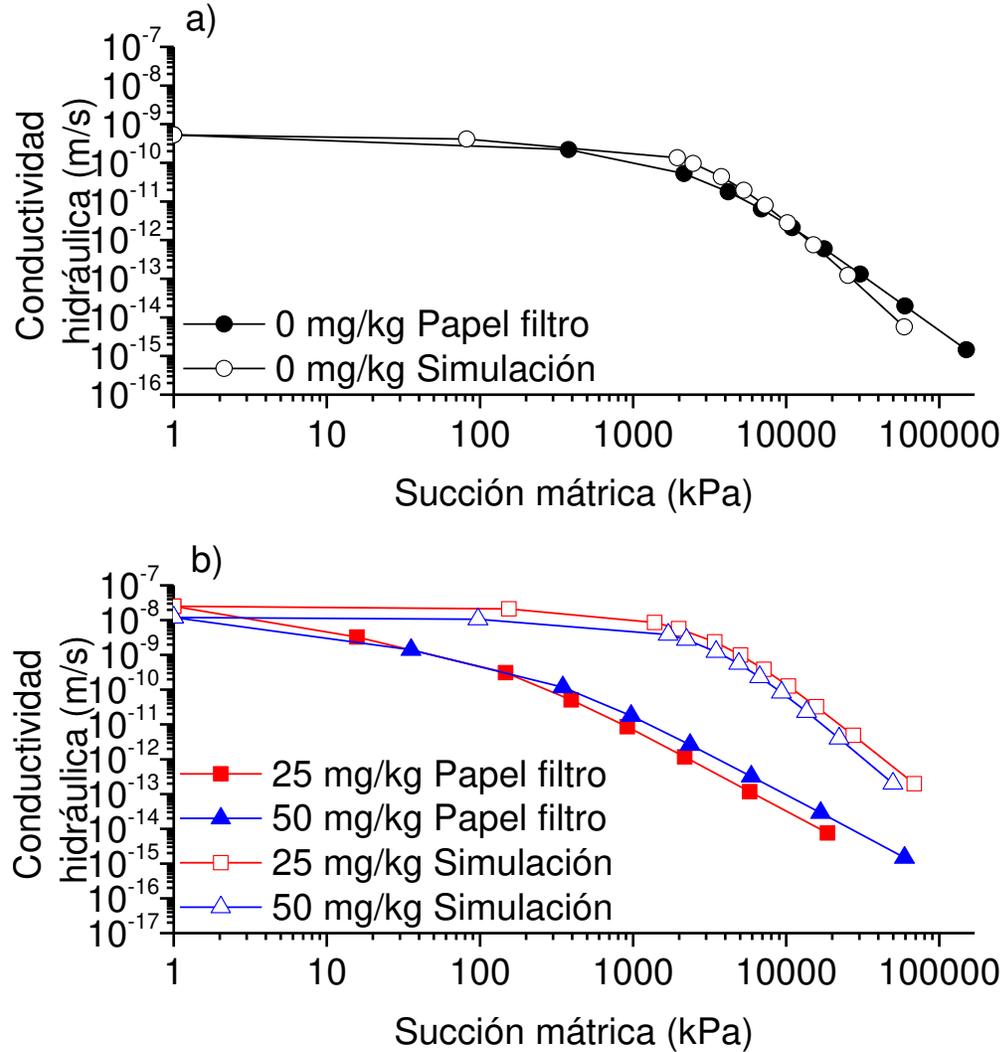


Figura 53. Función de conductividad hidráulica. Succión mátrica (kPa) vs Conductividad hidráulica (m/s): a) suelo natural y b) suelo contaminado

En general, la obtención de las SWRC (simulación y método de papel de filtro) proporcionan FCH similares cuando son analizadas en el estado no contaminado (0 mg/kg). Sin embargo, al momento de compararlas por concentración se observa que los valores de conductividad hidráulica en la simulación son mayores que los de papel filtro. Esto indica que el potencial de retención de las curvas simuladas no refleja el comportamiento del suelo evaluado,

por lo que los resultados de utilizar la simulación de las SWRC y la FCH en suelos contaminados requieren interpretarse con precaución ya que el contaminante afecta el comportamiento del suelo, lo cual no se refleja en los modelos de simulación.

4.16 PROPIEDADES HIDRÁULICAS DEL MODELO DE FLUJO EN LA ANALOGÍA TÉRMICA

4.16.1 FUNCIÓN DE DIFUSIVIDAD

Para evaluar el flujo de líquido en la zona no saturada del suelo, se utilizó el algoritmo de la analogía térmica descrito en el Capítulo 0. El primer paso fue la obtención de las características hidráulicas, es decir, de la FCH y la función de difusividad en el suelo de acuerdo al procedimiento descrito en el Capítulo 2.6.3.3, por lo cual para obtener las propiedades hidráulicas se eligió la concentración de 25 mg/kg debido a que, de los dos grados de contaminación utilizados en esta investigación (25 mg/kg y 50 mg/kg), la primer concentración es la que genera un mayor cambio respecto al estado natural (analizando los valores de ψ_m y ψ_o).

La función de conductividad hidráulica se calculó por el modelo de Fredlund *et al.* (1994), debido a que, además de no utilizar un ajuste de la SWRC, el uso de la ecuación de van Genuchten presentaba una serie de factores que afectan el valor de la FCH, en primer lugar, la elección del modelo de las restricciones (Mualem, Burdine y modelos fractales) depende de un punto de vista probabilístico (es decir, la resistencia al flujo depende de la contribución de los poros capilares) y que se ha demostrado que el uso de modelos fractales para la obtención de la FCH puede llevar a resultados no satisfactorios para muestras de suelo contaminadas (Vásquez-Nogal *et al.*, 2022), en segundo lugar se encuentra la obtención de los parámetros de ajuste de la SWRC (α , m y n) que afectan la posición y forma de la SWRC (Chen *et al.*, 2022), y por último, que las SWRC de suelos contaminados han demostrado no seguir la forma típica que presentan los suelos sin contaminar (como se menciona en el Capítulo 4.12).

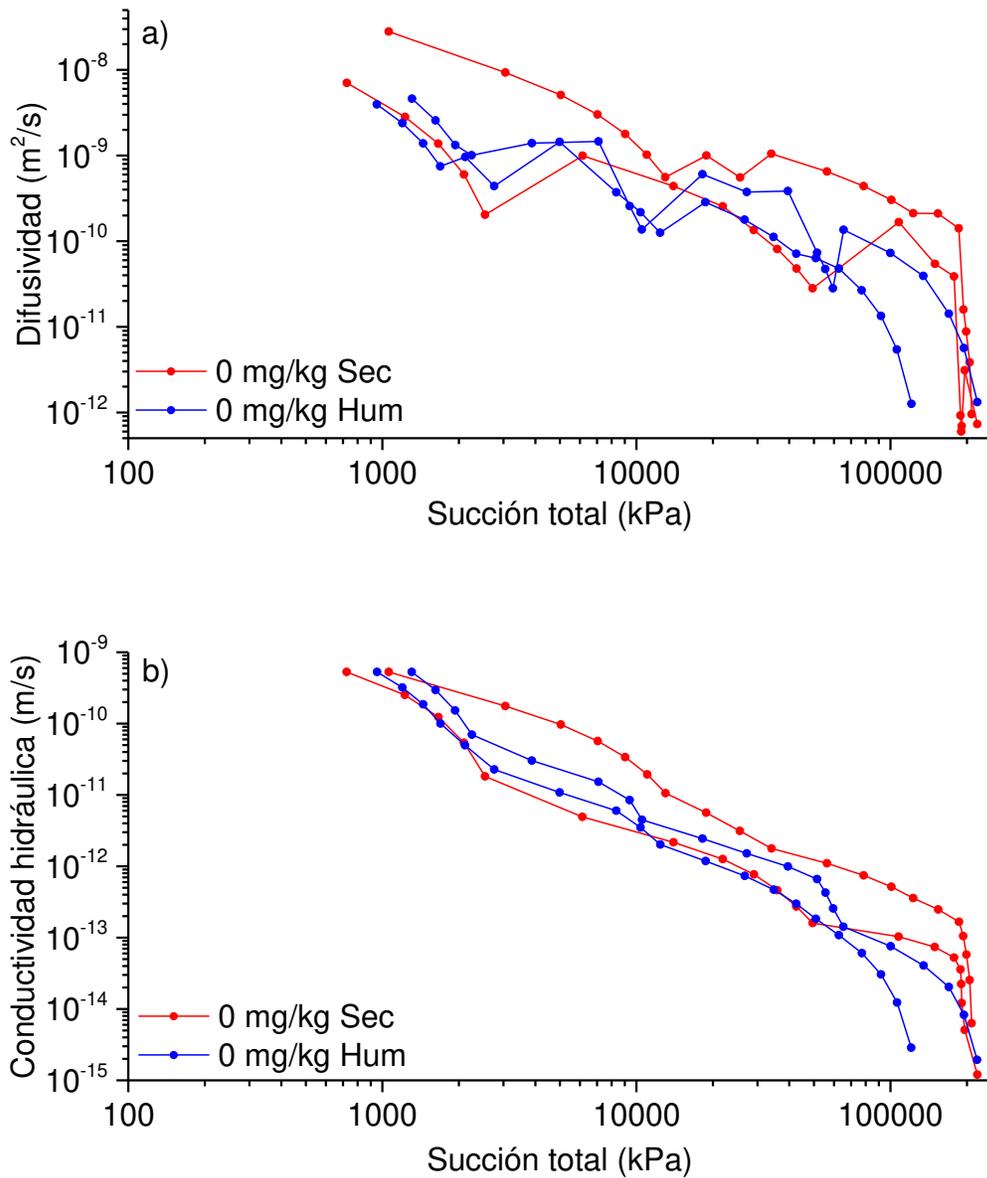


Figura 54. a) Difusividad y b) Función de conductividad hidráulica como función de la succión en la concentración de 0 mg/kg de arsénico

La Figura 54a) presenta los resultados de la función de difusividad en las trayectorias de secado y humedecimiento, mientras que la Figura 54b) presenta la FCH, ambas para la concentración de 0 mg/kg (suelo no contaminado utilizando los

datos de dos SWRC obtenidas en laboratorio por el método de papel de filtro). Los resultados de la FCH muestran variaciones en los valores de succión (la forma de la curva se ve desplazada, conservando la misma forma), debido principalmente a los valores de las SWRC utilizando ψ_t (que dependen del número de puntos en cada trayectoria, además de que, al tratarse de muestras remoldeadas se espera no sean totalmente iguales los valores) y en consecuencia variaciones en la función de difusividad.

De acuerdo a lo establecido en el Capítulo 2.5, el uso de ambas funciones hidráulicas (FCH y Difusividad) es de gran importancia debido a que, aunque se ha demostrado el uso de la Ley de Richards en la zona no saturada del suelo con el modelo de Fityus *et al.* (1999), no se tomaba en cuenta las variaciones del perfil de humedad ni se consideraba la función de difusividad, dejando ciertas limitaciones en el análisis de flujo. Por otro lado, el modelo de Abbase Maedeh *et al.* (2017) enfocado en la dispersión de hidrocarburos a pesar de utilizar el valor de ψ_m y la conductividad hidráulica saturada no consideraba los cambios en la conductividad hidráulica (debido a los cambios de succión) ni los cambios en la succión (debido a las variaciones en el contenido de líquidos).

La Figura 55a) presenta los resultados de la FCH en las trayectorias de secado y humedecimiento, mientras que la Figura 55b) presenta la función de difusividad, ambas para la concentración de 25 mg/kg (suelo contaminado). A diferencia del estado natural se presentan funciones similares (tanto en valores como en la forma de la función) en ambas funciones (FCH y Difusividad). Para dar más claridad al análisis, se ha omitido la comparación de las FCH, debido a que dicha comparación se encuentra en el Capítulo 4.15.2 y se ha optado por comparar las funciones de Difusividad (estado natural y contaminado) en su trayectoria de secado en la Figura 56a) y la Figura 57a) en función de la ψ_T y el contenido volumétrico de líquido (θ) respectivamente, mientras que para la trayectoria de humedecimiento en la Figura 56b) y la Figura 57b).

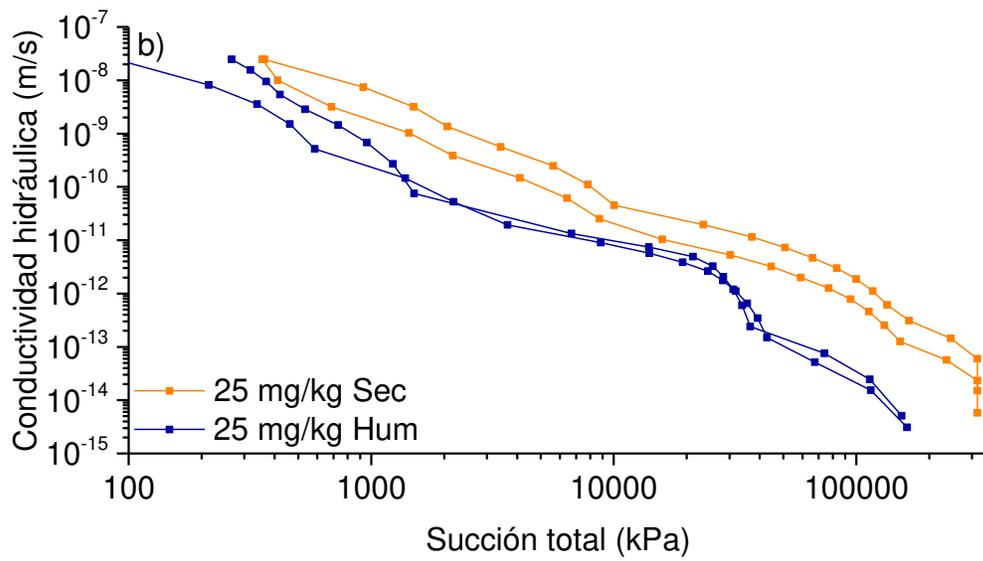
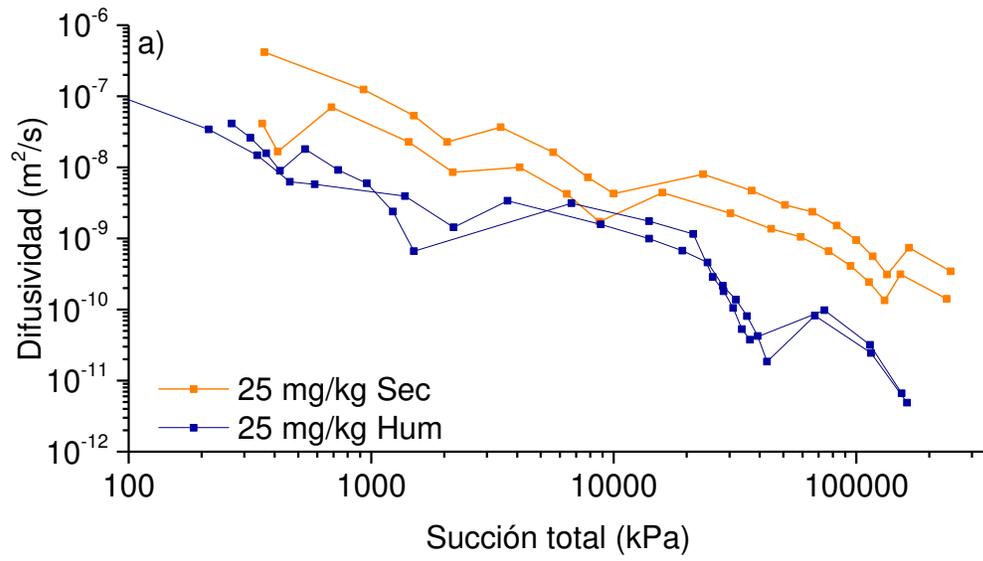


Figura 55. a) Difusividad y b) Función de conductividad hidráulica como función de la succión en la concentración de 25 mg/kg de arsénico

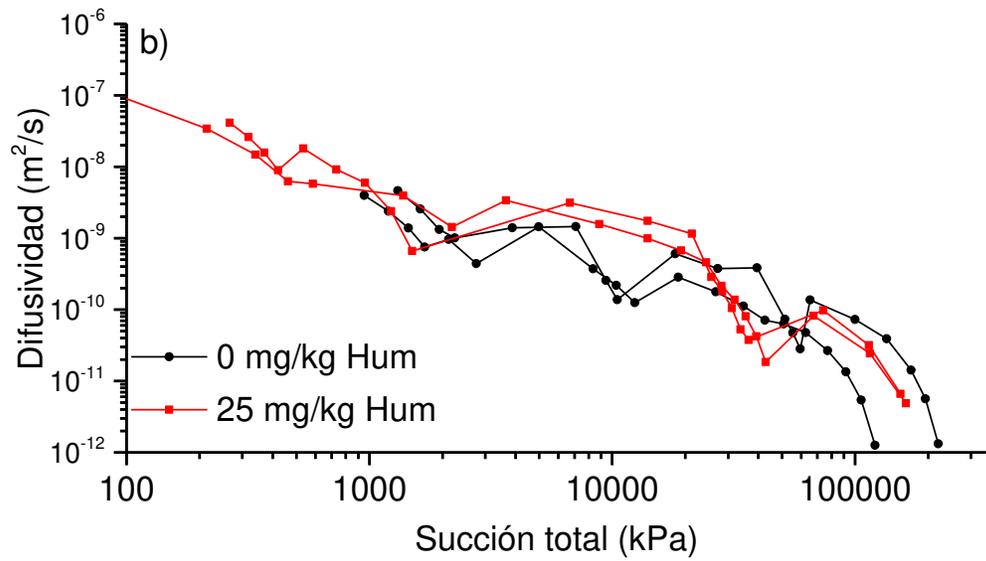
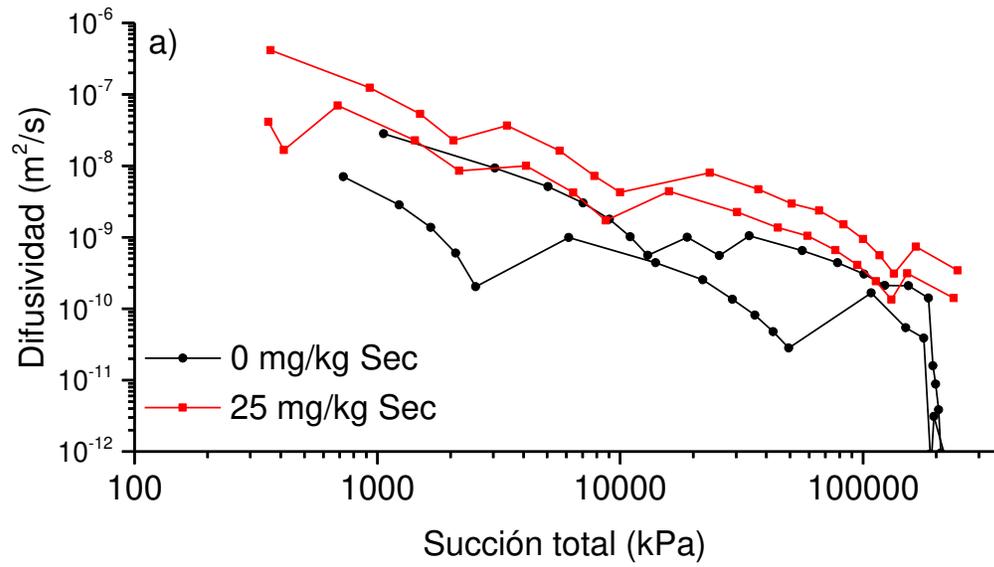


Figura 56. Comparación de las funciones de Difusividad como función de la succión en a) trayectoria de secado y b) trayectoria de humedecimiento

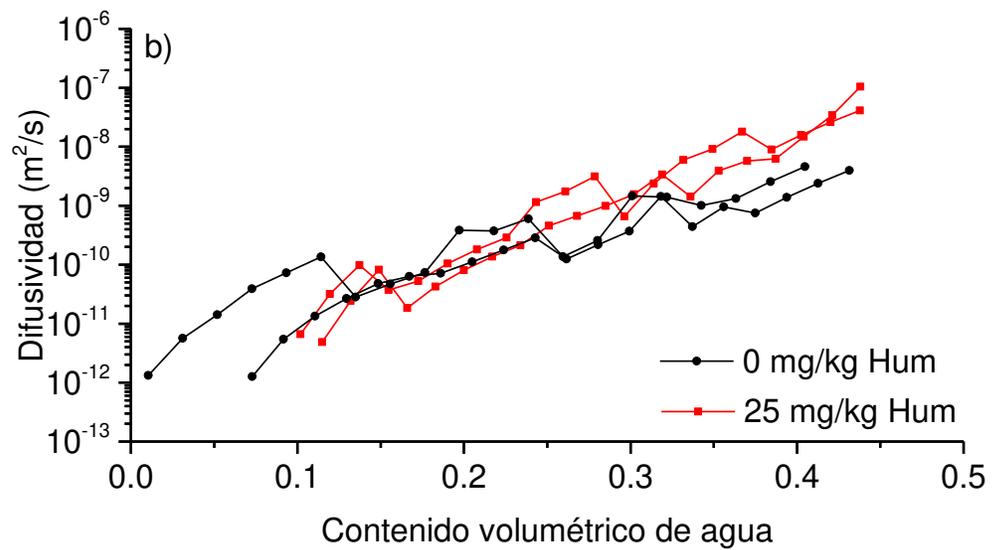
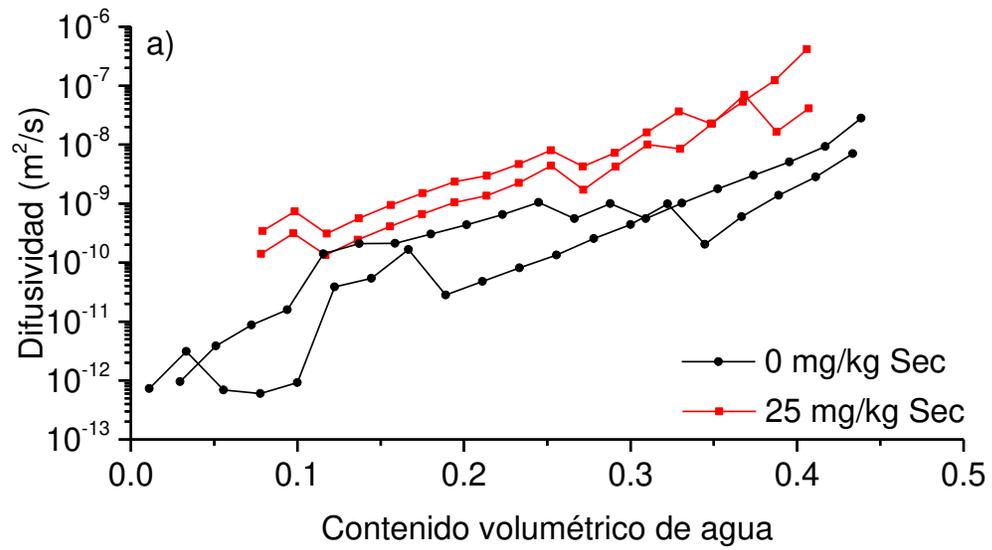


Figura 57. Comparación de las funciones de Difusividad como función del contenido volumétrico de agua en a) trayectoria de secado y b) trayectoria de humedecimiento

Analizando los valores de succión total, podemos observar que las difusividades para la rama de secado en estado no contaminado alcanzan su valor máximo entre 1000 kPa y 2000 kPa, mientras que el estado contaminado lo alcanza

entre los 360 kPa y 400 kPa (es decir, 2.5 y 5 veces menor respecto al estado natural). Los valores de difusividad en estado contaminado permanecen superiores a los del estado no contaminado en los valores de succión implicando que se incrementa la velocidad de infiltración al contaminarse el suelo. Similarmente, la rama de humedecimiento en el estado no contaminado alcanza su valor máximo entre los 100 kPa y 200 kPa, mientras que en 25 mg/kg se presenta el valor máximo en 1000 kPa (10 y 5 veces menor respecto al estado natural).

Comparando ahora, respecto a θ , observamos que, en ambas trayectorias, al incrementar la concentración de arsénico (de 0 mg/kg a 25 mg/kg) se disminuye el valor de Difusividad para la mayoría de los valores de θ , lo cual podemos asociar al cambio de tamaño de los poros debido a la contaminación con arsénico (y en consecuencia la disminución del valor de la ψ_T una vez contaminado). Este hecho se explica debido a que al aumentar el espacio interplanar se disminuye el tamaño de los poros (recordando que los espacios interplanares de la montmorillonita incrementaron de $d_{001} = 16.873 \text{ \AA}$ hasta $d_{001} = 16.999 \text{ \AA}$ para 0 mg/kg y 25 mg/kg respectivamente, como se menciona en el Capítulo 4.2), es decir, existe un cambio de macroporos a microporos, y por lo tanto un cambio en la velocidad de infiltración (Aoda & Younan, 2010).

4.16.2 ZONA ACTIVA Y PERFIL DE SUCCIONES TOTALES

Para evaluar la zona activa, se utilizaron los perfiles de succión realizados por López-Lara (1995), sin embargo, dichos perfiles, no cuentan con los valores de succión correspondientes al mes de octubre, por lo que, es posible obtener un perfil de succiones totales para la concentración de 0 mg/kg (suelo natural) a través de los datos con el perfil de humedad obtenido del muestreo PCA en esta investigación y complementar los datos reportados anteriormente para la región de Jurica. Dichos datos se muestran en la Figura 58 y la Figura 59.

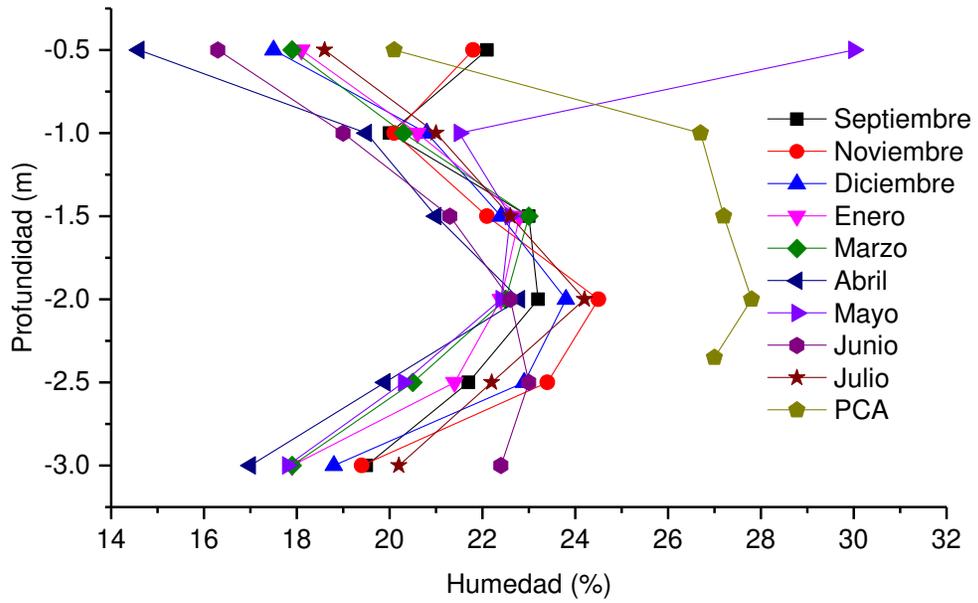


Figura 58. Perfiles de humedad de la región de Jurica, Qro.

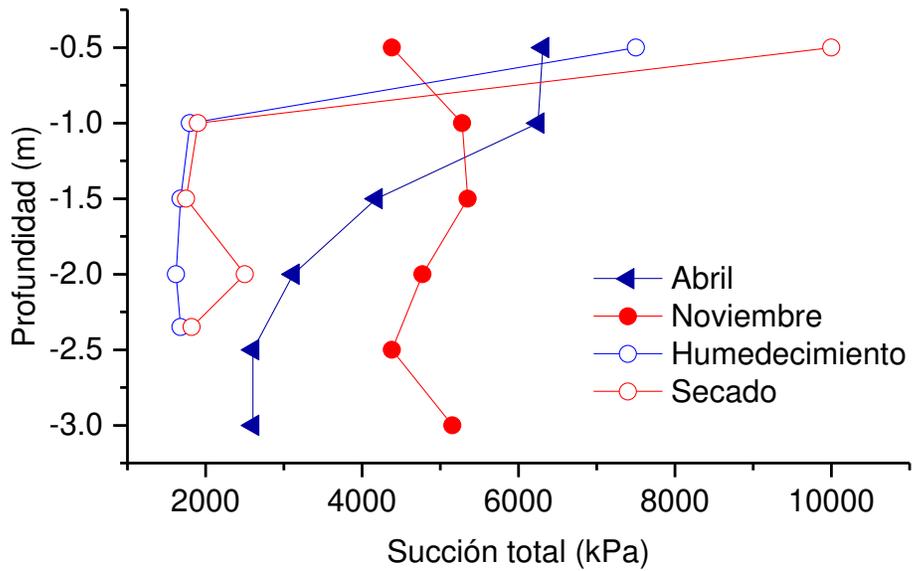


Figura 59. Perfiles de succión en la región de Jurica, Qro.

Es posible observar que el perfil de humedad obtenido (PCA) a una profundidad de 0.5 m se encuentra dentro del rango de valores de succión, siendo inferior en un 8.5% respecto al mes de noviembre, el cual cuenta con la mayor humedad reportada. Por otro lado, los datos del PCA a una profundidad de 2.35 m (profundidad de obtención de la muestra) muestran valores superiores a los reportados (12.5% para noviembre), lo cual se explica debido a que la muestra de suelo del PCA no se obtuvo del mismo lugar ni en el mismo periodo, además del creciente aumento de la precipitación media en el estado de Querétaro (Comision Nacional del Agua, 2022).

Adicionalmente, al cotejar estos datos con el fin de observar la variación que ha sufrido el perfil de humedad respecto al tiempo en la Figura 59, se muestra que el perfil del PCA tiene una succión total 2.56 veces más pequeña que la reportada anteriormente. Este resultado puede estar relacionado con el cambio en la precipitación media desde 1995 hasta 2019 (fecha de toma de la muestra), es decir, ha existido un aumento en la precipitación a lo largo del tiempo, lo cual resulta en que los valores de succión se vean disminuidos, además, la diferencia de valores puede atribuirse a que las muestras no se obtuvieron del mismo lugar.

Estos resultados contribuyen al conocimiento existente de los valores de succión en la región de Jurica proporcionado por López-Lara (1995) debido a que ahora existen más datos reportados a distintos meses permitiendo ser utilizados para el análisis de flujo en la zona no saturada del suelo, lo cual es útil para identificar la succión de inicio que se utilizará en el modelo en un ciclo de secado (que corresponderá al inicio de las lluvias).

4.17 ANÁLISIS DE FLUJO DE LA ANALOGÍA TÉRMICA

4.17.1 GEOMETRÍA Y MALLADO

Para evaluar el modelo de flujo, se utilizó una profundidad de análisis de 4 m para abarcar la profundidad de extracción de la muestra (2.35 m) además de las

profundidades del perfil de succiones y humedades (0 m hasta 3.0 m). Por otra parte, la longitud del estrato se definió en 12 m para observar adecuadamente los cambios en la zona afectada por el flujo de líquidos, y finalmente, el mallado utiliza una separación de 0.1 m en ambos sentidos (x y z) como se muestra en la Figura 60.

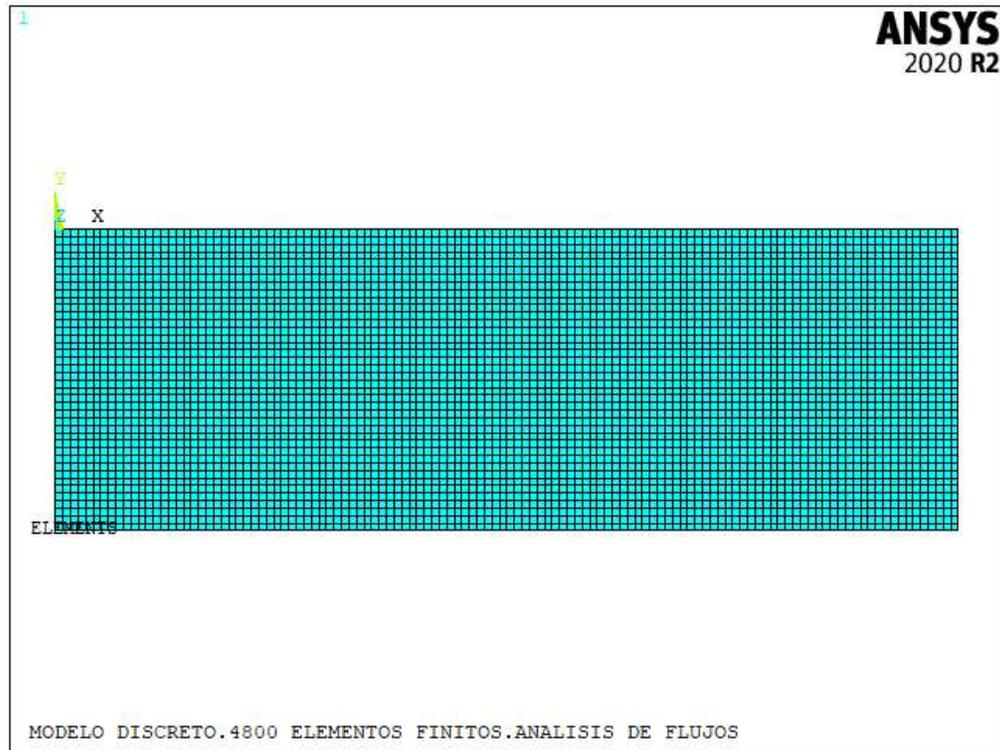


Figura 60. Geometría y mallado del modelo discreto de flujo, 4 m de profundidad, 12 m de longitud y mallado de 0.1 m

4.17.2 FUNCIÓN DE PRECIPITACIÓN COSINUSOIDAL

A lo largo del Capítulo 2.3 se han recogido aspectos relacionados a la contaminación de suelos y sus efectos en las propiedades geotécnicas, sin embargo, no se hacía distinción entre el método de descarga que originó el cambio en las propiedades, por lo cual, para el propósito del análisis, el flujo se efectúa tomando en cuenta dos condiciones: a) descarga puntual en dos puntos de tiempo

diferentes, es decir, se cotejan los resultados entre el estado natural y el estado contaminado, considerando que ocurrió una descarga puntual que contaminó el suelo con 25 mg/kg de arsénico (250 ml de arsénico por cada 10 kg de suelo), y b) flujo constante sobre el medio de análisis (por medio de un flujo en la superficie del suelo ubicado en el centro de la longitud) para simular una descarga constante. Ambas condiciones consideran la descarga debida a las condiciones ambientales (función de precipitación), y los resultados se cotejan en el estado contaminado y el estado natural para observar los cambios en los perfiles de succión total.

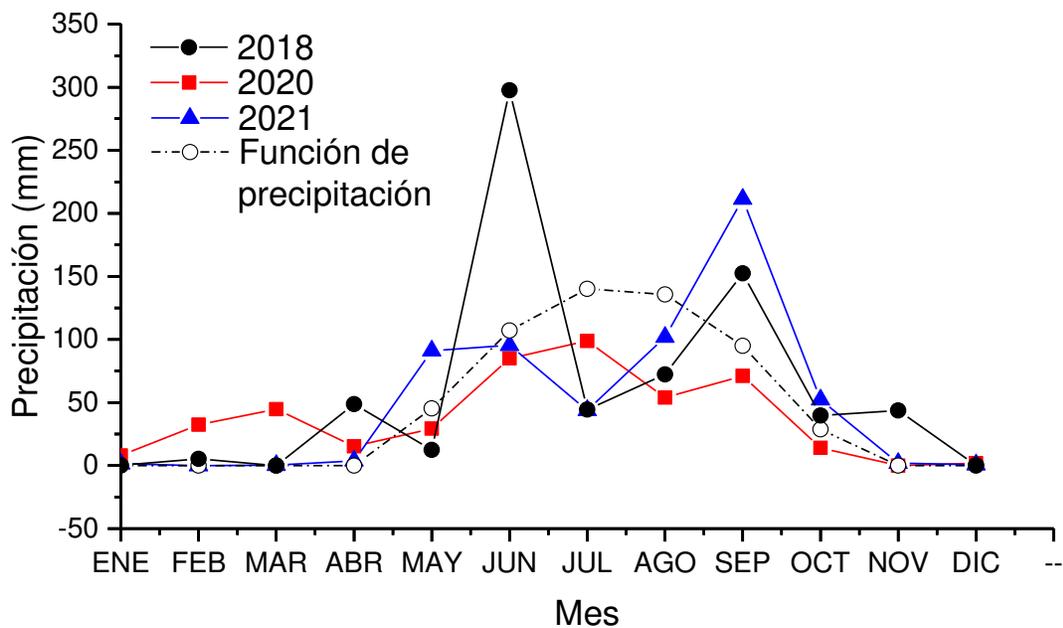


Figura 61. Función de precipitación cosinusoidal

La función cosinusoidal mostrada en la Figura 61 se ajustó a los datos de la EMA y de *Climate Queretaro* utilizando un ángulo de fase de -1.3 , lo cual permitió que: a) el inicio de las lluvias se presentara en el mes de mayo, b) que la precipitación máxima se presentara en el mes de julio y, c) que diciembre presentara la menor precipitación. A pesar de que al ser evaluada la función en los primeros meses se obtienen resultados negativos (precipitaciones negativas en los meses octubre a abril), debido a la naturaleza de la función coseno (que cuenta con un

conjunto entre -143 y 143), los valores se consideraron como cero (0 mm) para ajustarse a los datos de precipitación de la región.

De esta manera los resultados son consistentes al considerar que se trata del ciclo de secado (0 mm de precipitación de enero a abril) y se ajustan de manera adecuada al ciclo de humedecimiento por medio de la función coseno (del mes de mayo a diciembre), contando con la ventaja de que, esta función no utiliza otro dato adicional aparte de la precipitación, como si lo consideran los modelos de Thornthwaite y Penman-Monteith (Capítulo 2.6.2).

4.17.3 PERFIL DE SUCCIONES CONSIDERANDO UNA DESCARGA TRANSITORIA

Con el fin de identificar los cambios en los perfiles de succión en concentraciones de As de 0 mg/kg y 25 mg/kg, se realizó el análisis del modelo de flujo utilizando una condición transitoria (para simular un pasivo ambiental). El modelo evalúa distintos pasos de tiempo durante un periodo de 4 años, registrando perfiles de succión representados en valores máximos de ψ_t en color rojo, mientras que los valores mínimos de ψ_t se presentan en color azul.

Al iniciar el análisis de succiones ($t = 0$ días, correspondiente al mes de enero), los perfiles se encuentran con succión máxima (escala de color roja), ya que la función cosinusoidal considera que la precipitación es de 0 mm de agua, por lo que no existe una modificación de los valores de ψ_t . Los tiempos elegidos para evaluar los perfiles de ψ_t son $t = 150, 270$ y 720 días (considerando solamente la función de precipitación) debido a que son tiempos en que existen modificaciones en el contenido de humedad del suelo (ya sea sequia a humedecimiento o viceversa).

El primer perfil de ψ_t ($t = 150$ días, correspondiente al mes de mayo) mostrado en la Figura 62 representa el inicio de la época de lluvias de acuerdo a lo establecido en la Figura 61 (función de precipitación ≈ 0). La profundidad susceptible

a cambios de succión es aquella debajo de la cual ya no se presentan modificaciones en los rangos de ψ_t (similar a la capa activa), es decir, la escala de colores se vuelve constante.

El perfil de 0 mg/kg (Figura 62a) se compara con la concentración de 25 mg/kg (Figura 62b) y como se puede observar, el cambio más notorio es la variación de ψ_t al momento de contaminar el suelo con 25 mg/kg, es decir, en un principio el suelo se encontraba en época de cero precipitación (se presentan succiones máximas en el medio al no existir la presencia de líquido) y la profundidad susceptible a los cambios de succión varía de 0.3 m (en 0 mg/kg) a 1.78 m (en 25 mg/kg), lo que representa un aumento de 6 veces al momento de considerar la contaminación del suelo.

Esta situación se explica debido a los cambios en las propiedades del suelo contaminado (cambios en granulometría, disminución de sus potenciales de retención y el aumento en la permeabilidad), los cuales se consideran constantes en todo el medio (4 m de profundidad y 12 m de análisis) para cada condición de contaminación, ocasionando que el líquido (precipitación) ingrese en todo el medio y afecte una profundidad mayor. A partir de este periodo, el agua empieza a ingresar por la frontera superior del medio y se infiltra en el suelo.

Esta infiltración es apreciable en 25 mg/kg, disminuyendo los valores de ψ_t (de acuerdo a los rangos de temperatura (succión) ubicados en la zona inferior de la Figura 62b) en los primeros 1.78 m, mostrando el perfil como un cambio de color rojo (o temperatura) (2593.14 – 2599.24 kPa) hacia un color naranja (2587.05 – 2593.14 kPa), mientras que en 0 mg/kg estos cambios no se distinguen claramente, debido principalmente a que la permeabilidad del suelo corresponde a la de un suelo fino, por lo que cualquier líquido tardará más tiempo en infiltrarse.

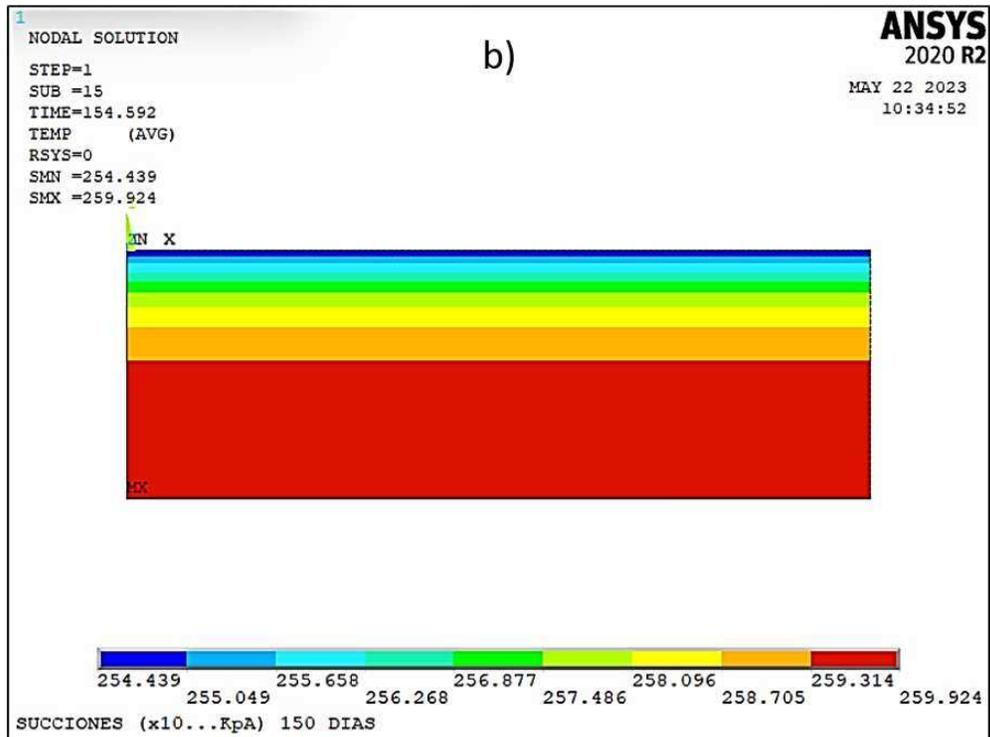
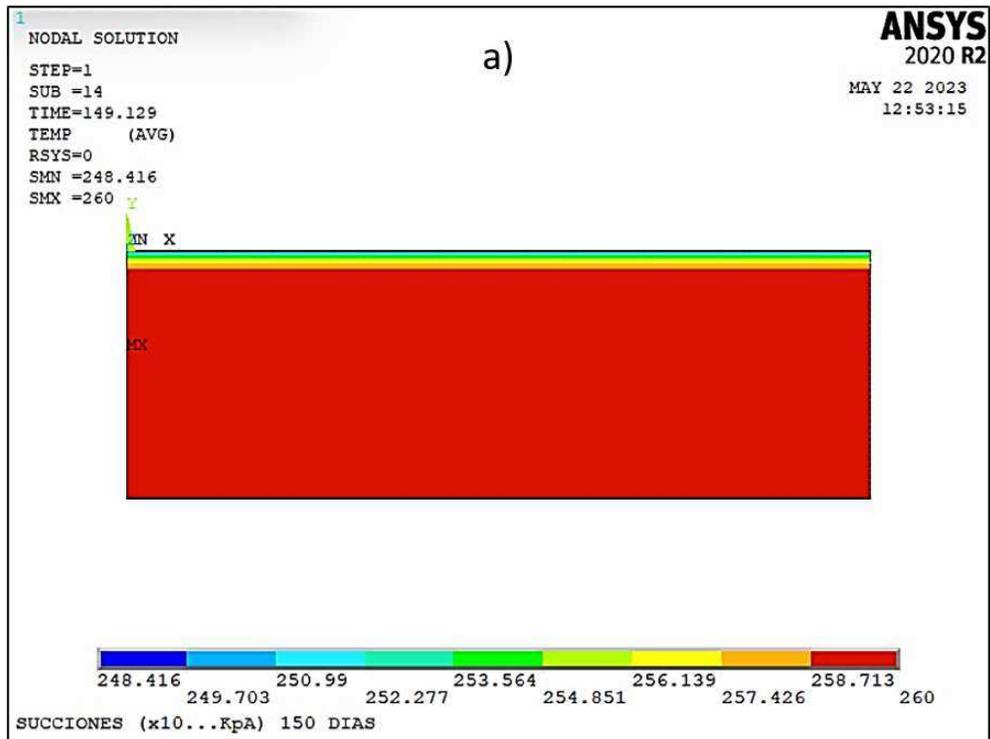


Figura 62. Modelo discreto de flujo transitorio: a) suelo natural a 150 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 150 días

Por otra parte, los cambios en ψ_t (datos ubicados en la esquina superior izquierda) son de $\Delta\psi_t = 115.84$ kPa para 0 mg/kg y $\Delta\psi_t = 54.85$ kPa para 25 mg/kg, es decir, una disminución de 2.11 veces. Parece posible que estos resultados se relacionan directamente con los cambios físicos que presenta el suelo contaminado (disminución de finos y aglomeración de partículas), que se reflejan en la disminución de los valores de ψ en la SWRC (apreciables en $s_r > 70\%$).

El siguiente periodo de tiempo ($t = 270$ días, correspondiente al mes de septiembre) se ubica en el periodo de lluvias cercano a los meses de precipitación máxima (correspondiente al mes de julio). La Figura 63a) muestra el estado natural (0 mg/kg) mientras que la Figura 63b) muestra el estado contaminado (25 mg/kg). Es interesante notar que en este periodo el suelo natural muestra una disminución de ψ_t en una profundidad de 0.80 m, mientras que el periodo anterior ($t = 150$ días) no presenta ese cambio, debido principalmente a que ya se presentan precipitaciones y el agua empieza a fluir en el suelo humedeciendo una profundidad mayor (2.6 veces más grande).

Análogamente, en 25 mg/kg se presenta una profundidad de afectación de 2.60 m (1.46 veces mayor que el periodo anterior en el mismo grado de contaminación), lo que se traduce en un aumento de 3.25 veces más grande que 0 mg/kg en este periodo, estos resultados indican que el líquido atravesará el medio más rápido y por lo tanto afectará una zona mayor cuando se encuentra en estado contaminado.

El periodo de tiempo $t = 720$ días (correspondiente al mes de enero en el segundo año de análisis) se presenta en la Figura 64a) para 0 mg/kg y la Figura 64b) para 25 mg/kg, periodo en el cual el suelo se encuentra en la época de sequía (precipitación nula). La zona de afectación mantiene el mismo comportamiento, es decir, un aumento de 1.66 veces cuando se compara el suelo contaminado con uno natural (debido al cambio en sus propiedades geotécnicas) (1.86 m para 0 mg/kg y 3.08 m para 25 mg/kg).

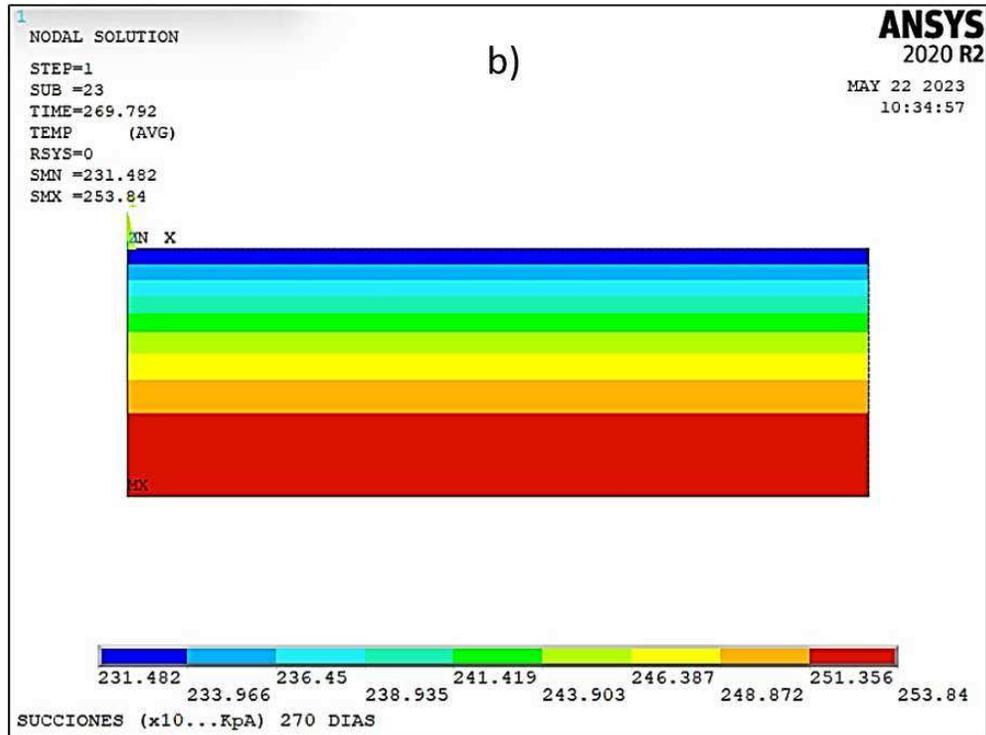
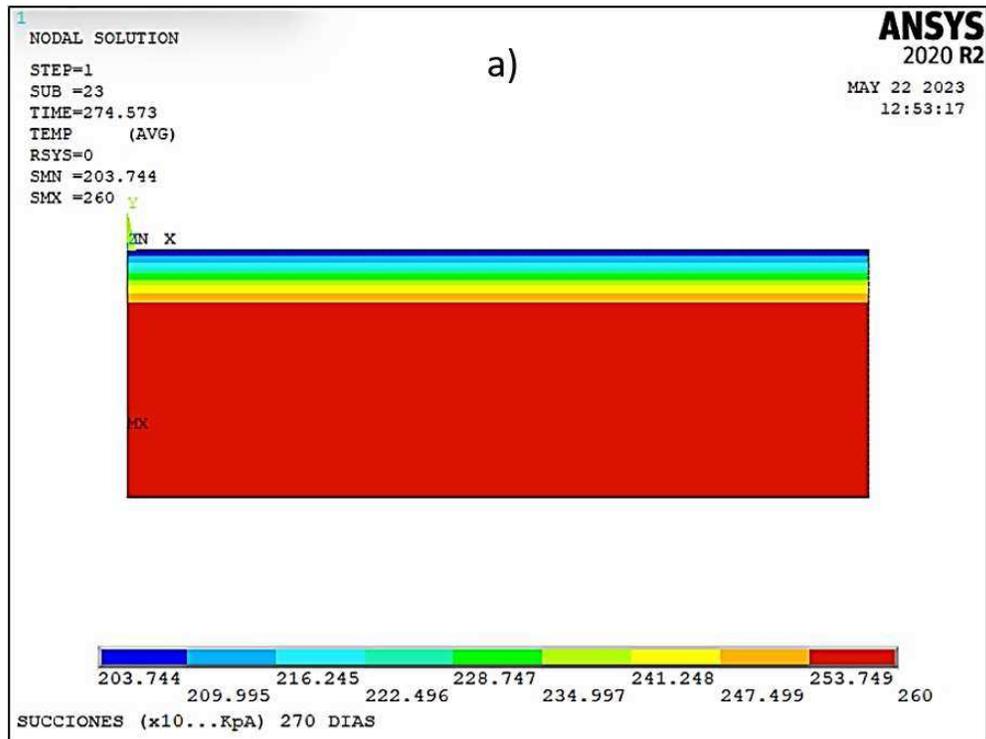


Figura 63. Modelo discreto de flujo transitorio: a) suelo natural a 270 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 270 días

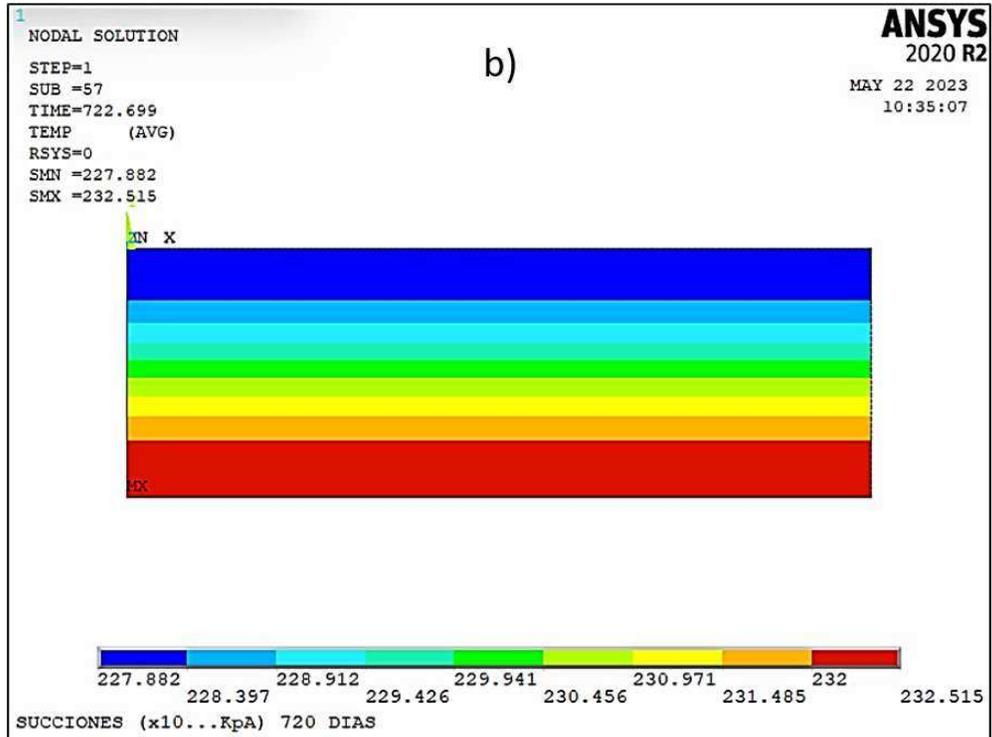
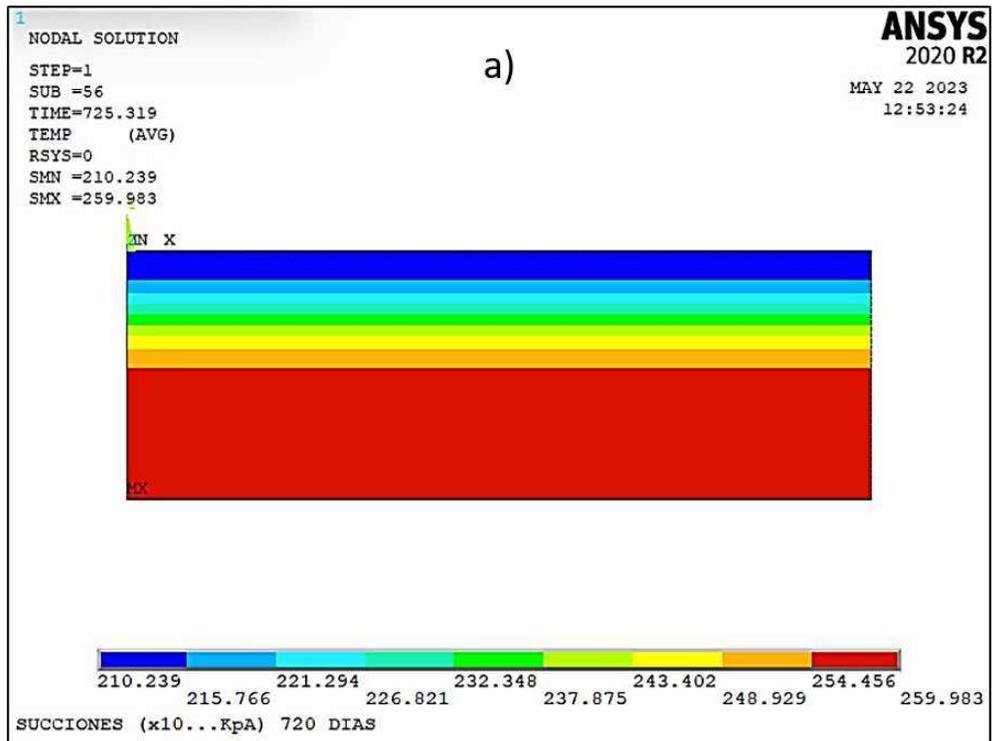


Figura 64. Modelo discreto de flujo transitorio: a) suelo natural a 720 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 720 días

Es importante mencionar que el suelo natural presenta un comportamiento interesante con el paso del tiempo, ya que la profundidad susceptible a cambios de ψ_t aumentará al término de cada periodo. Al llegar a los tiempos 480 d correspondiente al mes de abril del segundo año de análisis (Figura 65), 870 d correspondiente al mes de mayo del tercer año de análisis (Figura 66), 1230 d correspondiente al mes de mayo del cuarto año de análisis (Figura 67), las barras de rangos de ψ_t aumentan su espesor, mientras que la zona azul (de ψ_t mínima) ubicada en la superficie disminuye, indicando que el agua se mueve hacia zonas más profundas mientras modifica los valores de ψ_t (producto del inicio de la época de lluvias de acuerdo a la función de precipitación).

Esta situación continua hasta llegar a estabilizarse en los rangos de ψ_t máxima (color rojo) a profundidades cada vez más grandes además de que, al tratarse de un suelo fino, el agua avanza lentamente debido al bajo valor de permeabilidad ($k = 5.30 \times 10^{-10} \pm 6.29 \times 10^{-11}$ m/s). Este aumento en la profundidad se presenta constante, sin importar si se trata de época de sequía o de humedecimiento, y alcanza su profundidad máxima de 2.78 m en 1440 días (Figura 71).

Por otra parte, al analizar el suelo contaminado (25 mg/kg de arsénico) se observa que la máxima profundidad en la cual se presentan los cambios de ψ_t ocurre en los tiempos 480, 870 y 1170 días (meses de abril a junio) y es de 3.15 m (1.13 veces más grande que el suelo natural), indicado que se incrementa la velocidad de humedecimiento debido a la contaminación con arsénico, presentándose en un periodo 30 días más rápido que el suelo natural. Situación que se explica por el hecho de que el suelo sufre modificaciones en su comportamiento hidromecánico como se ha expuesto en capítulos anteriores en esta investigación.

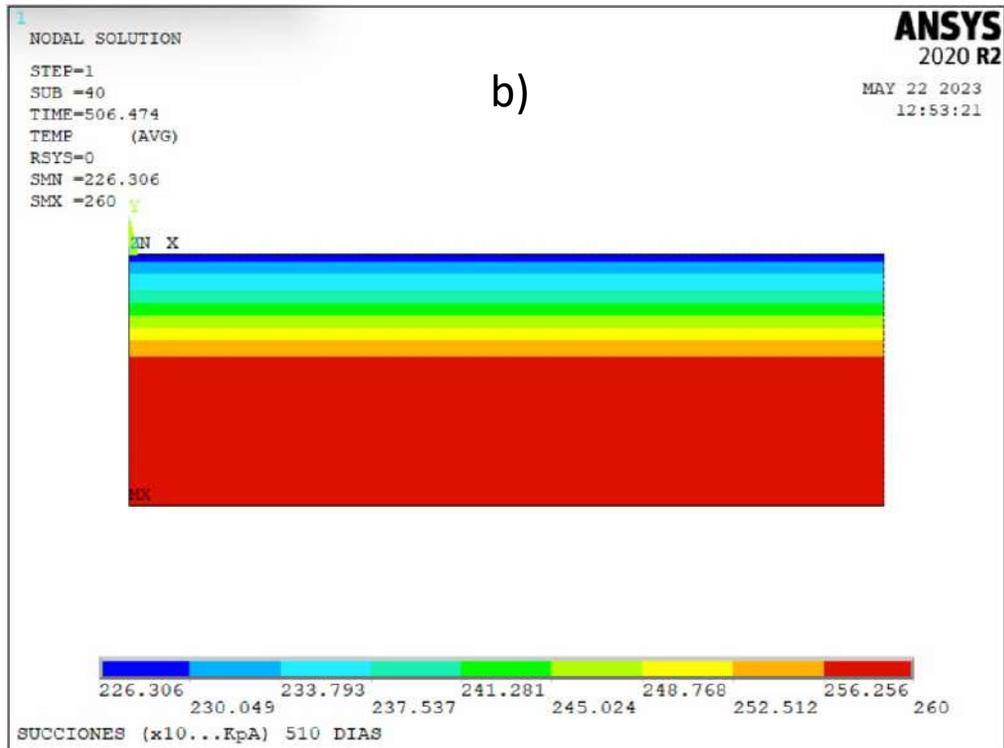
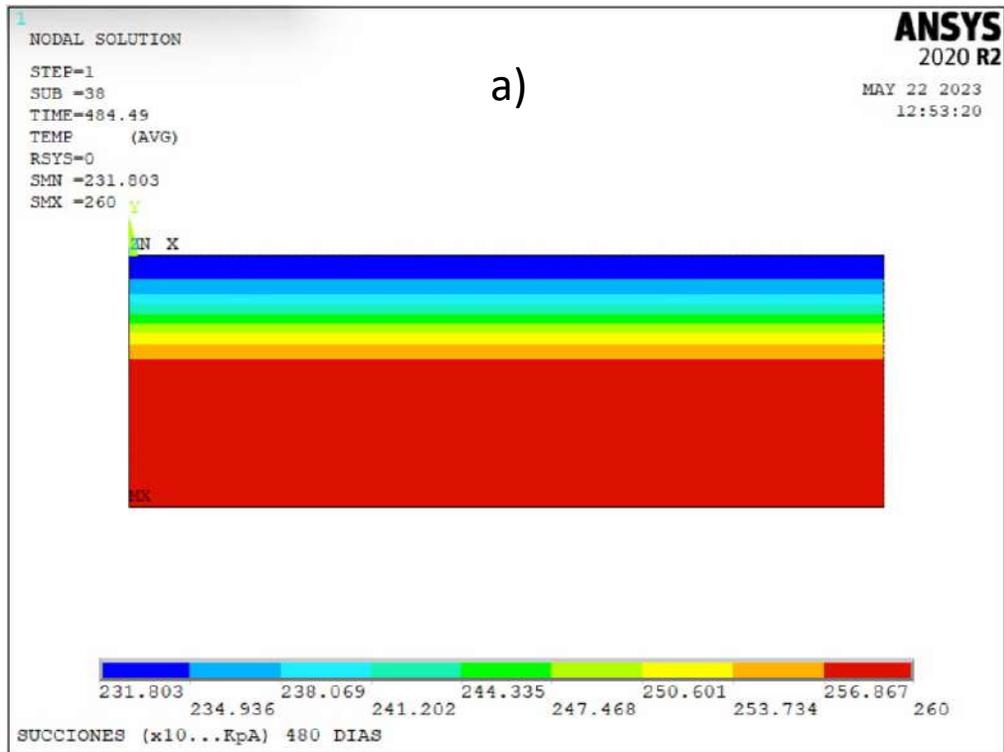


Figura 68. Modelo discreto de flujo transitorio: a) suelo natural a 480 días, y b) suelo natural a 510 días.

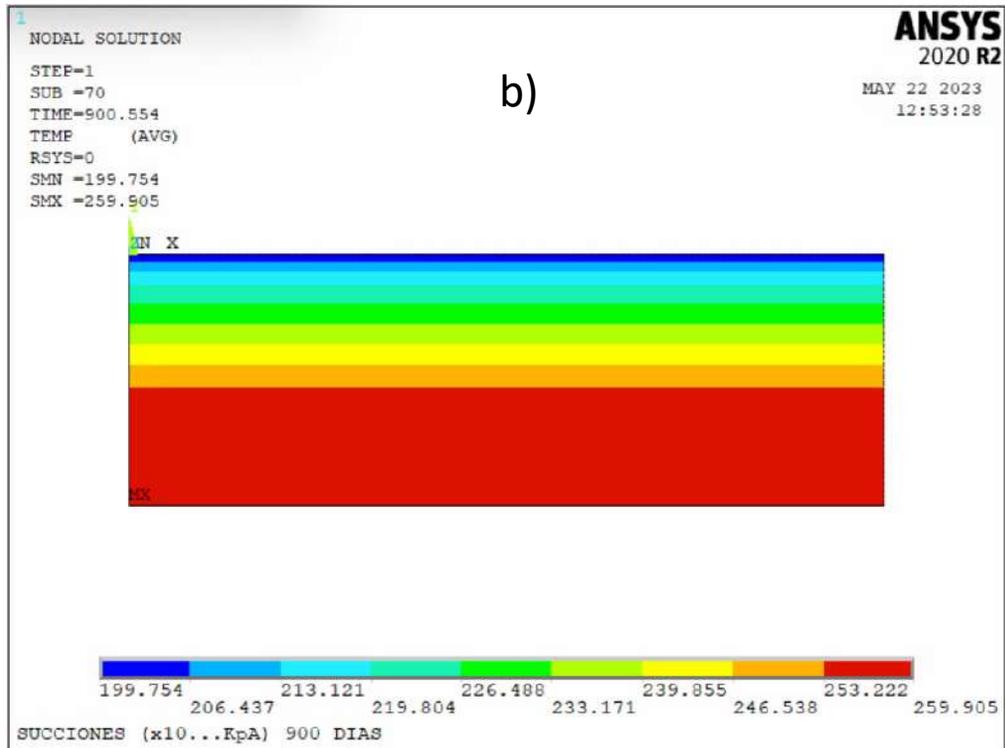
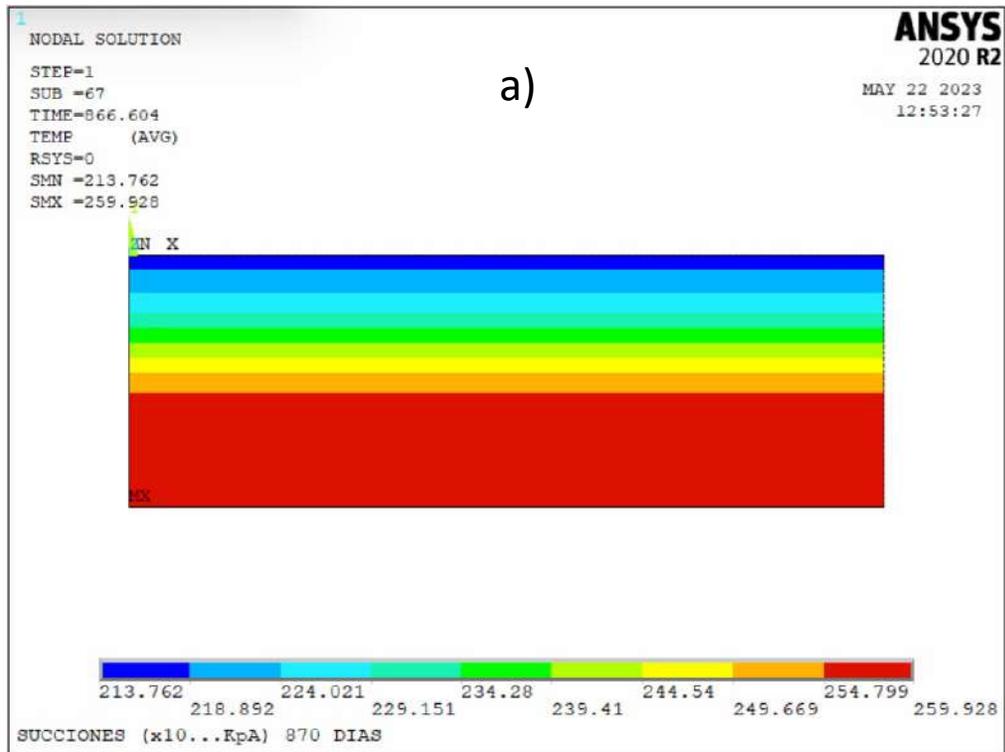


Figura 69. Modelo discreto de flujo transitorio: a) suelo natural a 870 días, y b) suelo natural a 900 días.

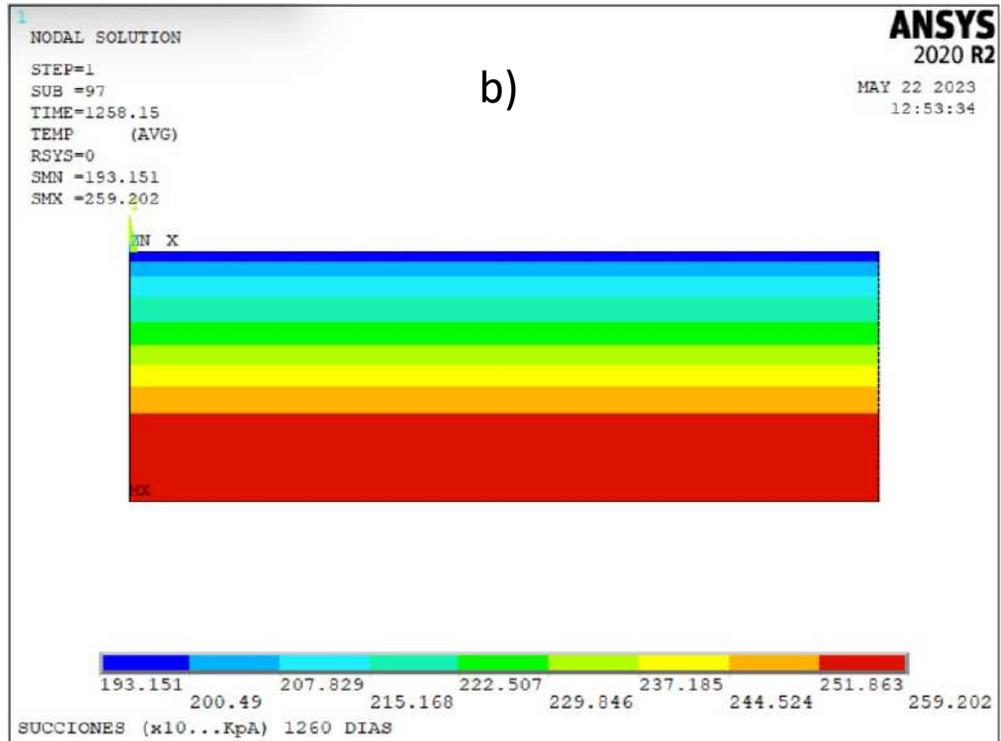
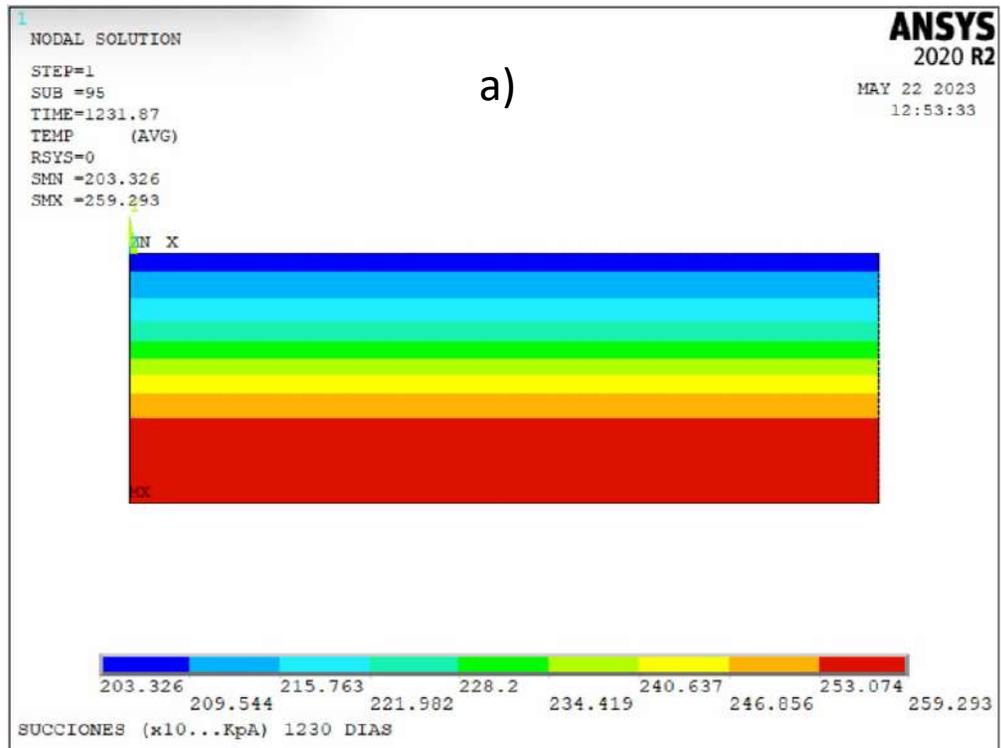


Figura 70. Modelo discreto de flujo transitorio: a) suelo natural a 1230 días, y b) suelo natural a 1260 días.

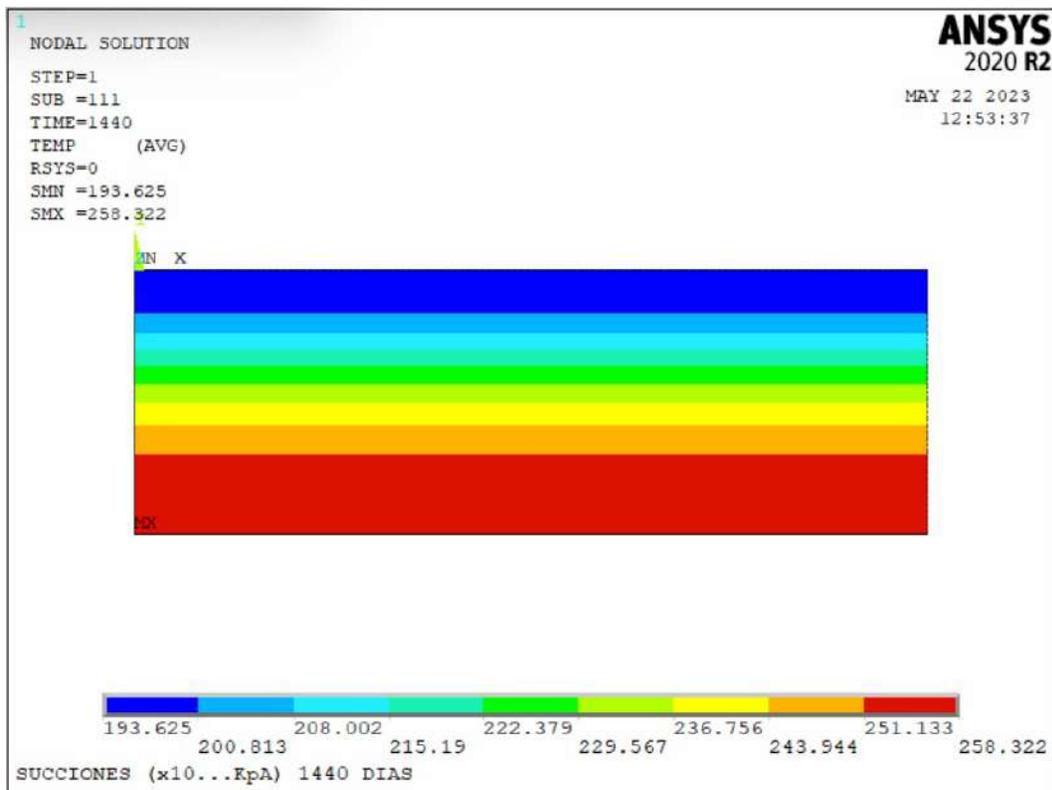


Figura 71. Modelo discreto de flujo transitorio en suelo natural a 1440 días, con profundidad máxima de 2.78 m.

Estos resultados en conjunto confirman que los estudios de transporte de sustancias (contaminantes) mostrados en la revisión bibliográfica no realizan el modelado de una forma realista, debido a que dichos estudios no consideran que el suelo ha sufrido una modificación en su estructura, y es gracias al hecho de considerar las modificaciones que se amplía el conocimiento de los suelos contaminados y su afectación en el suelo (respecto al comportamiento hidromecánico).

Sin embargo, hasta este punto, la principal limitación es que además de considerar que el suelo ha sufrido una modificación, solo se consideran las condiciones de precipitación, razón por la cual se realiza el análisis de una fuente puntual para analizar un escenario más amplio de la zona de afectación en la zona no saturada del suelo.

4.17.4 DESCARGA PUNTUAL

El modelo registra los perfiles de ψ_t en distintos pasos de tiempo (de 30 días cada paso) durante un periodo de 4 años, utilizando como flujo (ingreso de agua al medio) ambas descargas: la función de precipitación y una descarga puntual continua (en caso de existir se introduce desde el tiempo $t = 1$ día), por lo cual, la zona que resulta afectada por esta descarga modifica su perfil de succión (Figura 72).

La idea de identificar la zona afectada de esta manera es debido a que existe una distorsión de los rangos de succión mostrados en cada perfil, y al identificar la coordenada en cada rango de succión es posible construir un perfil de afectación, lo que nos da una idea de cómo se distribuye un líquido en la masa de suelo. Una vez obtenidos estos perfiles, es posible delimitar la zona afectada y comparar los perfiles de succión de los distintos tiempos en cada concentración de arsénico.

El modelo discreto asocia el flujo a un cambio en la densidad del suelo en el tiempo, por lo que, para evaluar los efectos de una descarga de líquidos y la magnitud de la zona afectada, se evaluaron cuatro distintos valores de descarga en análisis de 4 años bajo las mismas características del suelo (permeabilidad, succiones, densidad y perfiles de succión) y dejando solamente como variable el flujo.

Las magnitud de las descargas elegidas para el análisis fueron 0.00015 t/m^3 que corresponde a una descarga de 7.26 L/s de agua residual típica de la agroindustria azucarera (Cisneros *et al.*, 2011), 0.002 t/m^3 que corresponde a una descarga de contaminantes de agua residual de 150 L/hab-d en una zona urbana (González *et al.*, 1997), 0.006 t/m^3 equivalente a una descarga de 450 L/s de agua residual en un sistema de agua potable y alcantarillado (Jáuregui-Medina *et al.*, 2007) y 0.012 t/m^3 considerando un colector principal de aguas residuales (1000 L/s) (Jáuregui-Medina *et al.*, 2007).

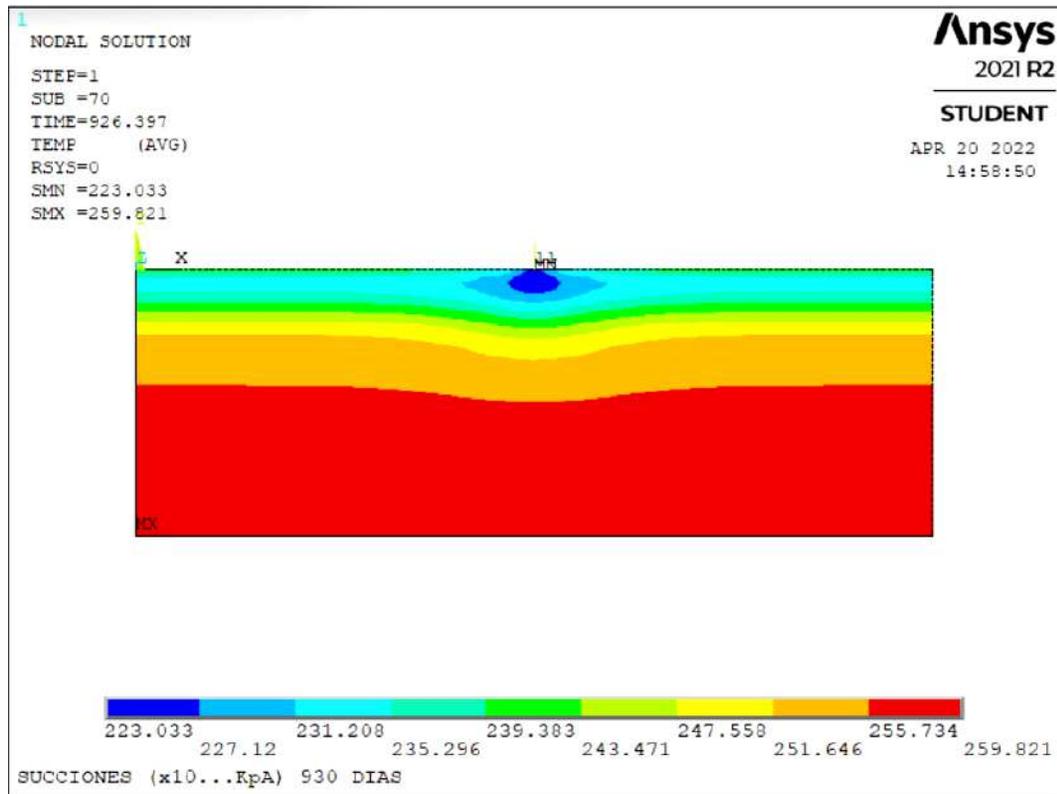


Figura 72. Perfil de succión utilizando una descarga puntual de 0.002 t/m^3 en un tiempo de 930 días

Se toma en cuenta la magnitud de descargas de líquido que han contenido dentro de sus elementos al arsenico, independientemente de su concentración, como es el caso de las aguas residuales (Carbonell-Barrachina *et al.*, 1999), ya sea por mezclas de residuos producto de pesticidas, de industria (Tavares *et al.*, 2012) o por contener concentraciones altas de este elemento (Huang *et al.*, 2011) (0.01 mg/L en agua de acuerdo a la NOM-127-SSA1-2021), realizando el analisis a traves de una fuente puntual para observar el comportamiento del suelo en la zona no saturada.

La Figura 77 compara los resultados obtenidos de las 4 descargas con el fin de identificar la forma de propagación del contaminante, en un paso de tiempo de 570 días (mes de julio, considerando que se encuentra en la época de lluvias en el segundo año de análisis), mostrando un aumento constante en el área afectada

al incrementar el flujo de la descarga puntual, afectando 5.77 m^2 para la descarga de 0.00015 t/m^3 (Figura 73), 6.05 m^2 para la descarga de 0.002 t/m^3 (Figura 74), 7.51 m^2 para la descarga de 0.006 t/m^3 (Figura 75), y 8.20 m^2 para la descarga de 0.012 t/m^3 (Figura 76), lo cual se traduce en un aumento constante de 4.8%, 30.12% y 42.17% respecto al valor de referencia (0.00015 t/m^3), respectivamente.

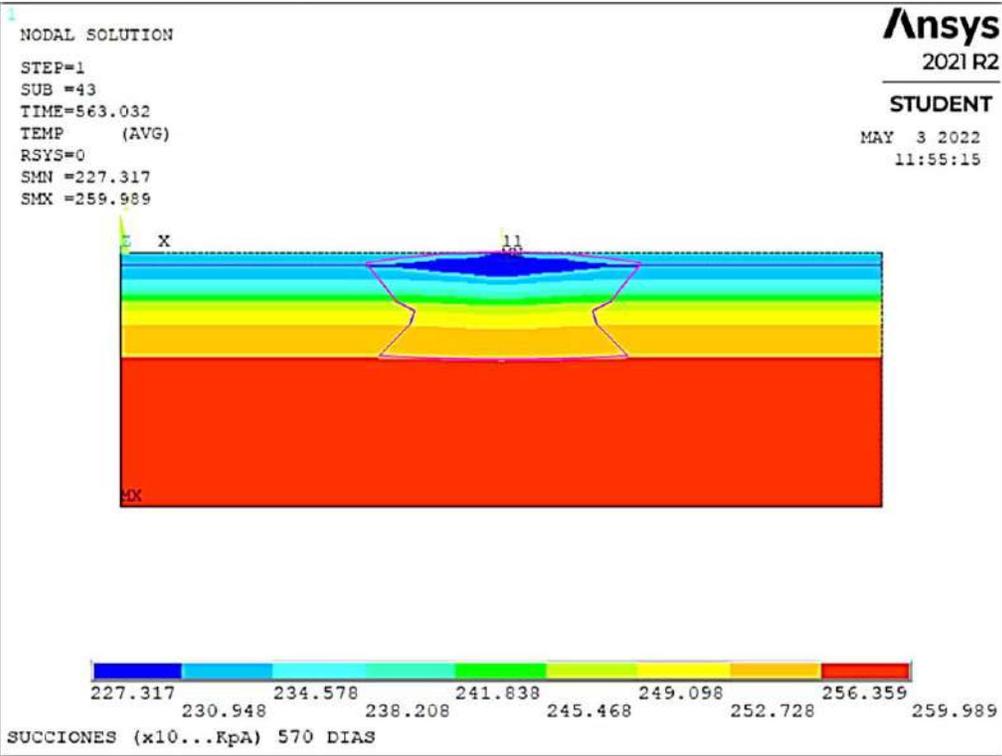


Figura 73. Zona afectada por cambios de ψ_t en una descarga de 0.00015 T/m^3

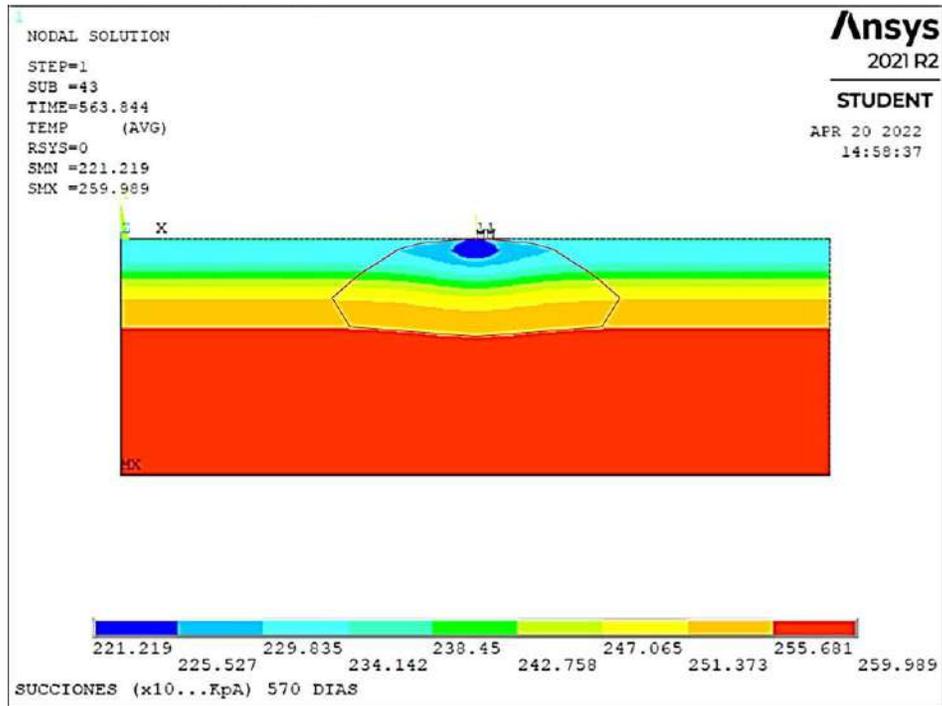


Figura 74. Zona afectada por cambios de ψ_t en una descarga de 0.002 T/m^3

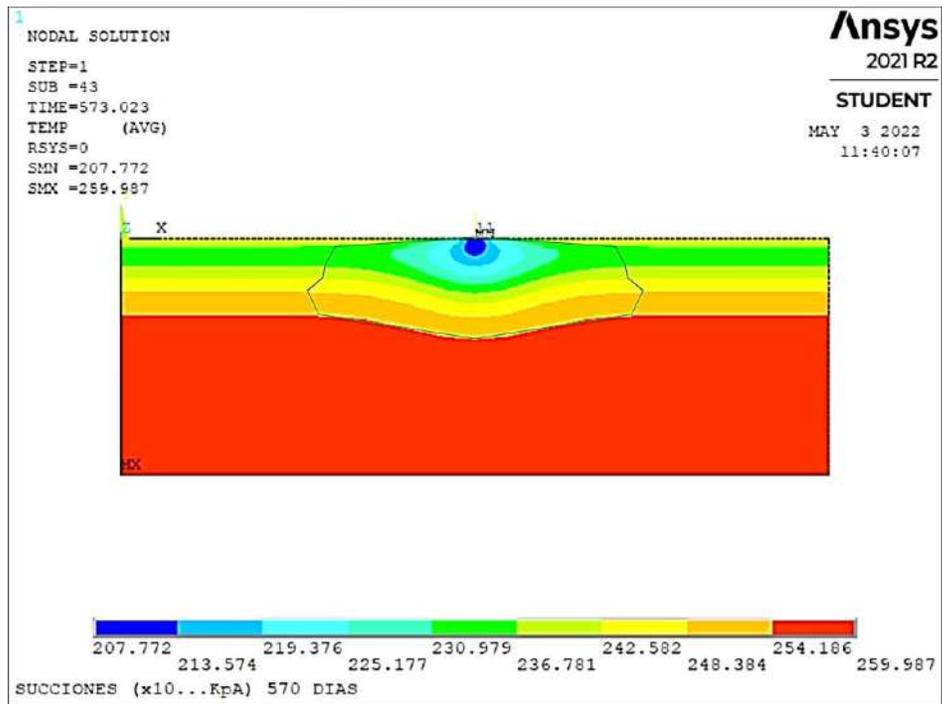


Figura 75. Zona afectada por cambios de ψ_t en una descarga de 0.006 T/m^3

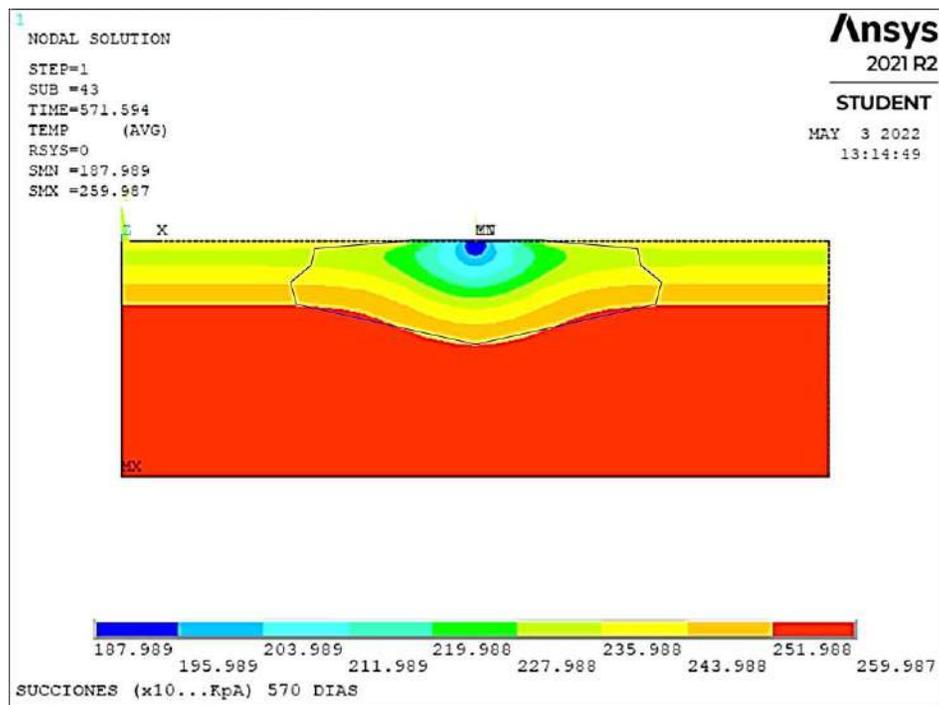


Figura 76. Zona afectada por cambios de ψ_t en una descarga de 0.012 T/m^3

Bajo estas condiciones, los resultados parecen confirmar que el contaminante se distribuye de forma ovalada (bulbo), esto es un resultado interesante, dado que suele representarse el transporte de contaminantes por medio de una pluma contaminante, principalmente debido a que los modelos de flujo comúnmente analizan el suelo como un medio completamente saturado (como se menciona en el Capítulo 2.5), es decir, se realiza en análisis a partir del nivel de aguas freáticas (NAF) en el que se presenta una velocidad de flujo en dirección x , y , o z (teoría de permeabilidad).

Tras evaluar distintos valores de descarga en el modelo discreto de análisis de flujo, se decidió trabajar con una descarga de 0.002 t/m^3 (150 L/hab/d) correspondiente a una descarga en una zona urbana para cotejar la etapa de flujo. El análisis se efectuó en distintos periodos de tiempo ($t = 30, 150, 330, 540, 810, 1170$ y 1350 días) para las concentraciones de As de 0 mg/kg y 25 mg/kg , en dichos perfiles se presentan los valores máximos de ψ_t ($\times 10 \text{ kPa}$) (representados por el color rojo) y los valores mínimos de ψ_t ($\times 10 \text{ kPa}$) (representados en color azul).

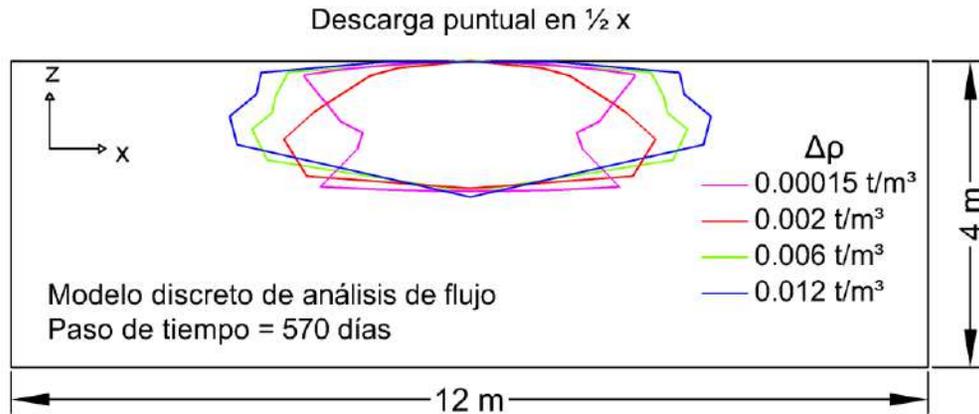


Figura 77. Comparación entre las zonas afectadas por succión en diferentes cambios de descarga (cambios en densidad)

Los resultados obtenidos para un periodo de tiempo de 30 días (representando la época de precipitación = 0 de acuerdo a la Figura 61) se presentan en la Figura 78a) y Figura 78b) para 0 mg/kg y 25 mg/kg respectivamente. En este periodo, la única fuente de agua presente en el análisis es por medio de una fuente puntual en la parte superior del suelo (la cual se presenta desde el $t = 1$ día), y al comparar ambas condiciones de concentración, el resultado más llamativo es la modificación de los perfiles de ψ_t , es decir, un incremento en la profundidad susceptible a cambios de ψ_t (debido a la variación del contenido de líquido) una vez que se contamina el suelo (0.37 m para 0 mg/kg y 1.20 m para 25 mg/kg), es decir, 3.24 veces más grande y disipándose las variaciones de ψ_t a profundidades mayores.

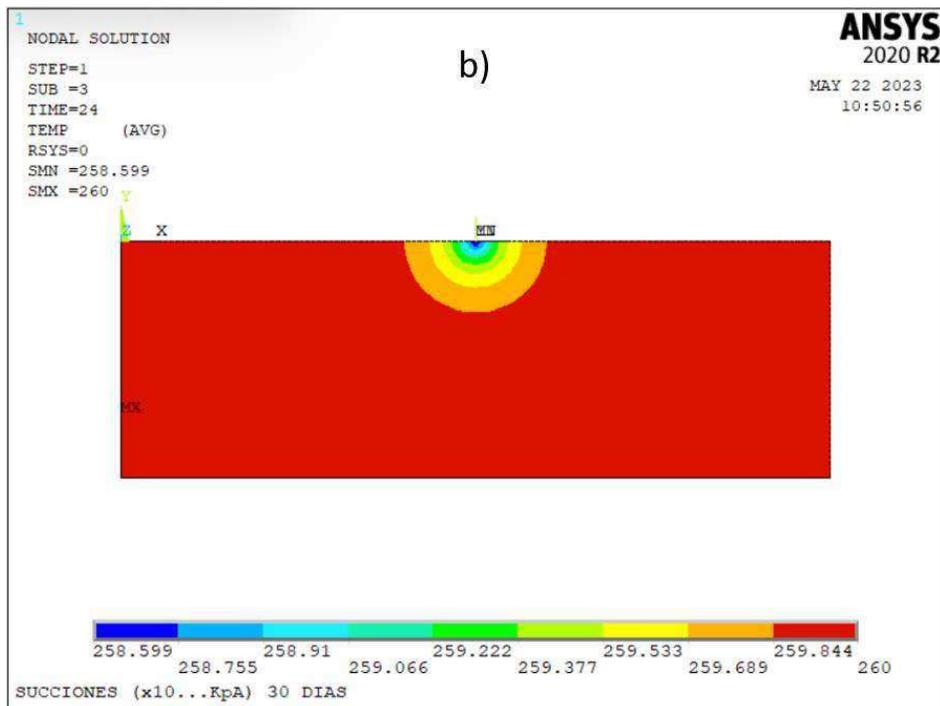
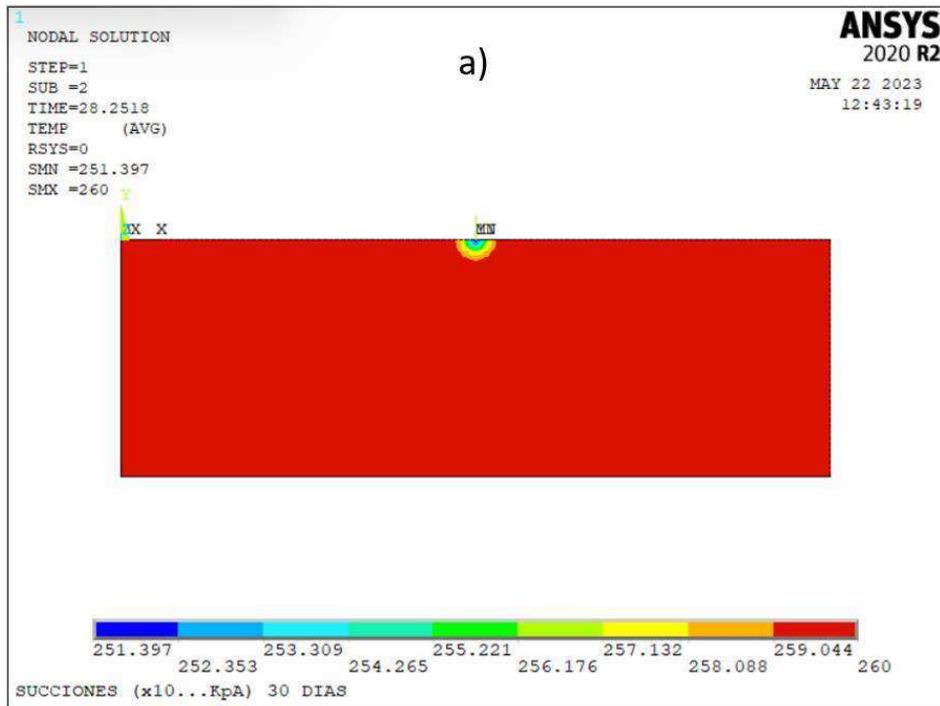


Figura 78. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 30 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 30 días

Estos resultados son interesantes dado que presentan que hay una mayor zona afectada por la descarga de líquidos al contaminar el suelo, explicándose por el hecho de que el suelo contaminado parece comportarse como un suelo más grueso y, por lo tanto, exhibe una mayor permeabilidad que el suelo natural, esto se traduce en el hecho de que cualquier líquido atravesará más rápido una masa de suelo (y por lo tanto afectará una profundidad mayor), situación contraria con el estado natural (0 mg/kg) en la que la afectación es menor debido a que el líquido se mantiene retenido por más tiempo en el suelo.

Por otra parte, al obtener la variación de ψ_t ($\Delta\psi_t$) de los datos en la parte superior izquierda de los perfiles (SMN = Succión mínima y SMX = Succión máxima), es posible observar que para 0 mg/kg $\Delta\psi_t$ es de 86.03 kPa, mientras que $\Delta\psi_t$ es de 14.01 para 25 mg/kg, lo cual se traduce en una disminución de 6.14 veces. Este hecho se explica debido a que las SWRC con As presentan una disminución de los valores de ψ_t debido a la contaminación química (con dos efectos: primero disminuyendo el valor de ψ_m debido a la aglomeración de partículas y explicado a través de la ecuación de Laplace y, segundo, aumentando el valor de ψ_o debido a la concentración de sales y el intercambio de vapores).

El periodo de tiempo $t = 150$ días (correspondiente al mes de mayo, es decir, se encuentra en la época de lluvias) se presenta en la Figura 79a) y Figura 79b) para la concentración de As de 0 mg/kg y 25 mg/kg, respectivamente, la cual muestra un aumento de 3.55 veces en la profundidad susceptible a cambios de ψ_t en la concentración de 25 mg/kg (0.53 m para 0 mg/kg y 1.88 m para 25 mg/kg), dicho cambio es asociado tanto a los cambios físicos del suelo, como al hecho de que en ese periodo de tiempo se inicia la época de lluvias, lo cual aumenta la cantidad de líquido que ingresa por la frontera superior del medio de análisis y en conjunto con la descarga puntual acelera el movimiento del líquido en el medio.

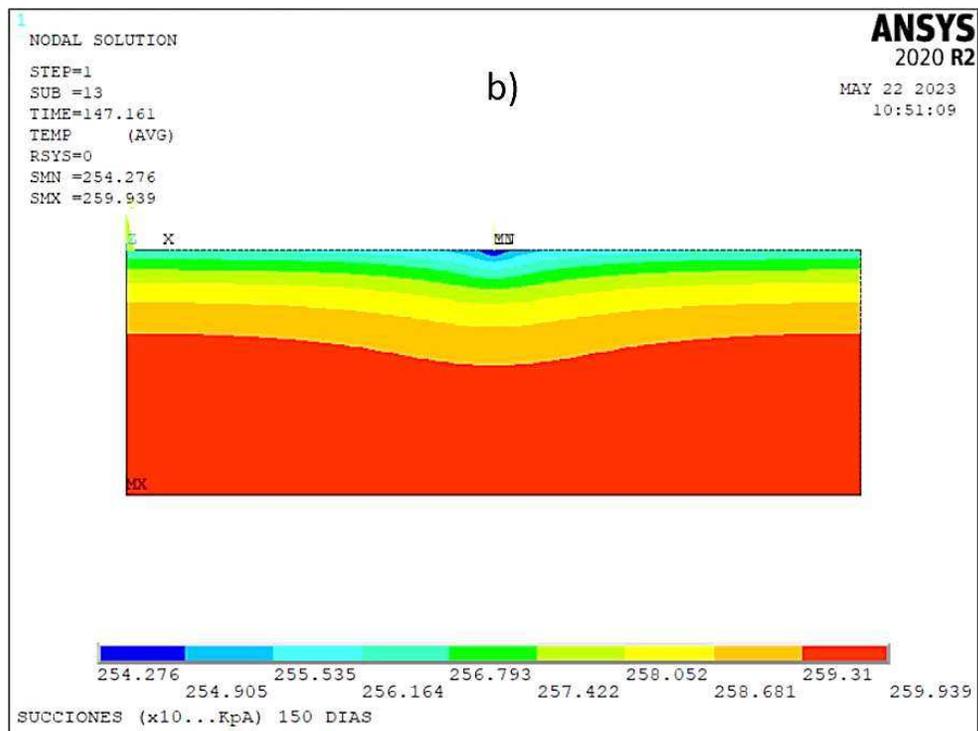
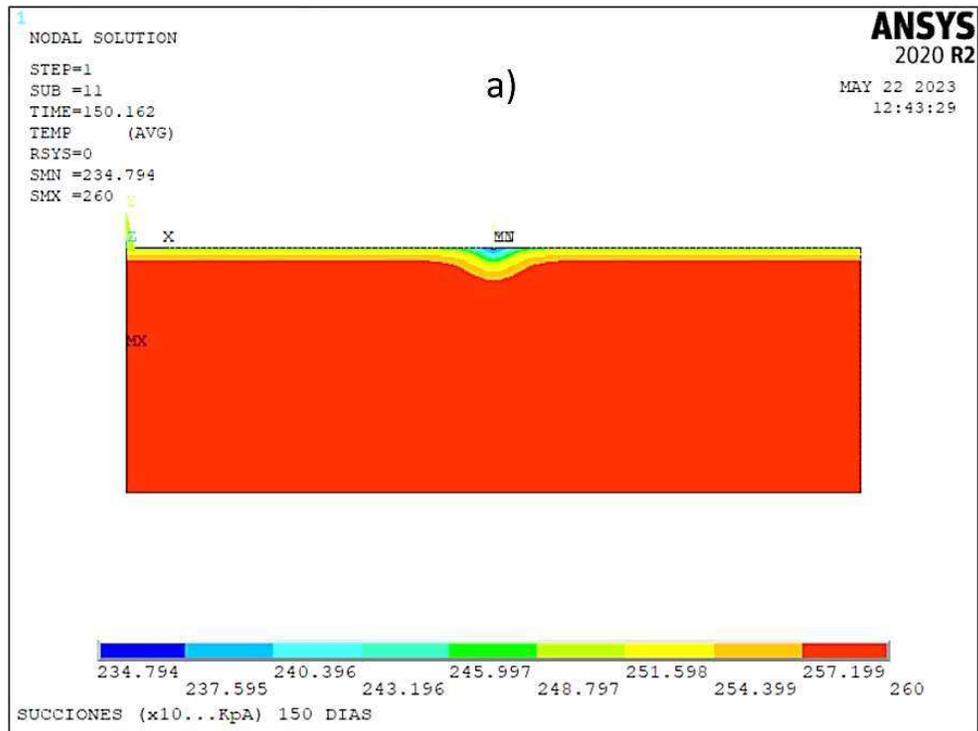


Figura 79. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 150 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 150 días

En este periodo de tiempo ($t = 150$ días) es posible observar dos posibles efectos en el suelo contaminado con 25 mg/kg: un humedecimiento de los costados del suelo en la superficie, que se traduce en el cambio entre las escalas de colores (de azul a naranja, los cuales corresponden a zonas entre 2542.76 kPa – 2593.1 kPa) en los primeros 1.36 m debido al inicio de las lluvias, mientras que se desarrolla un flujo en la parte central (debido a la descarga puntal) que se encuentra a 1.88 m de profundidad (zona color naranja con valores de ψ_t promedio de 2590 kPa), razón por la cual no se encuentra totalmente formado un bulbo de afectación en la zona central del perfil y solo se presenta en la parte superficial.

Por otro lado, para la concentración de 0 mg/kg se presentan resultados similares, sin embargo, la magnitud de estos cambios es menor, puesto que el humedecimiento del suelo debido a la precipitación se presenta en los primeros 0.21 m y no ha infiltrado a una mayor velocidad debido a la permeabilidad del tipo de suelo ($k = 5.30 \times 10^{-10} \pm 6.29 \times 10^{-11}$ m/s), es decir, el líquido permanece más tiempo en la masa de suelo en comparación al suelo contaminado ($k = 2.47 \times 10^{-8} \pm 4.74 \times 10^{-9}$ m/s), mientras que la descarga puntal alcanza una profundidad de 0.53 m. Respecto a $\Delta\psi_t$ (de acuerdo a los datos ubicados en la esquina superior izquierda), existe una disminución de 4.45 veces una vez que se ha contaminado el suelo ($\Delta\psi_t = 252.06$ kPa para 0 mg/kg y $\Delta\psi_t = 56.63$ kPa para 25 mg/kg), lo cual representa una disminución constante de los valores de ψ_t observados a través de la SWRC a altos grados de saturación ($s_r > 70\%$).

Continuando con el siguiente periodo de tiempo ($t = 330$ días) correspondiente al mes de noviembre, se representa la época en la cual el suelo se encuentra en la etapa de secado (precipitación ≈ 0), este análisis se presenta en la Figura 81a) y Figura 81b) para la concentración de 0 mg/kg y 25 mg/kg respectivamente. En este periodo se empieza a formar un bulbo de ψ_t en el centro del perfil de análisis en las dos concentraciones (0 mg/kg y 25 mg/kg) mientras que a los costados se disminuye la variación de ψ_t (1.08 m para 0 mg/kg y 2.88 m para

25 mg/kg) debido a la ausencia de precipitación en la frontera superior del suelo, siendo la descarga puntual el único flujo que ingresa al medio.

Los resultados indican dos efectos: primero, un fuerte aumento en la profundidad afectada en el suelo contaminado (1.07 m para 0 mg/kg y 2.88 m para 25 mg/kg), o expresado de forma más simple como un aumento de 2.69 veces respecto al estado natural (0 mg/kg), lo cual indica que la variación de ψ_t se estabiliza a profundidades más elevadas, y segundo, un aumento en la longitud del bulbo de ψ_t (causado por la descarga puntual en la superficie y representando los valores mínimos de ψ_t) observado en el centro del perfil de suelo, aumentando de 1.07 m para 0 mg/kg a 3.02 m para 25 mg/kg, lo que se traduce en un aumento de 2.6 veces respecto al estado natural (debido a la capacidad de retención de líquidos).

Respecto a los valores de ψ_t , encontramos $\Delta\psi_t = 497.78$ kPa para 0 mg/kg y $\Delta\psi_t = 119.38$ kPa para 25 mg/kg (disminución de 4.17 veces al contaminarse el suelo), lo cual reafirma los resultados anteriores en $t = 150$ días. Para dar más claridad, estos resultados se presentan en la Figura 80, la cual muestra un claro patrón: los valores mínimos de $\Delta\psi_t$ se presentan en el inicio de la época de precipitación = 0 ($t = 1, 420$ y 720 días), tiempos donde el bulbo de ψ_t se empieza a formar, producto de una reducción de humedad en las zonas profundas ubicadas en los costados del perfil del suelo (la ψ_t empieza a aumentar en la superficie) mientras que permanece el flujo en el centro, razón por la cual el suelo no presenta una variación tan grande en los valores de ψ_t . Por otra parte, los valores máximos de $\Delta\psi_t$ se presentan en época de lluvias ($t = 270$ y 600 días) debido a que el líquido humedece la superficie y empieza a fluir presentándose variaciones en los valores de ψ_t con la profundidad.

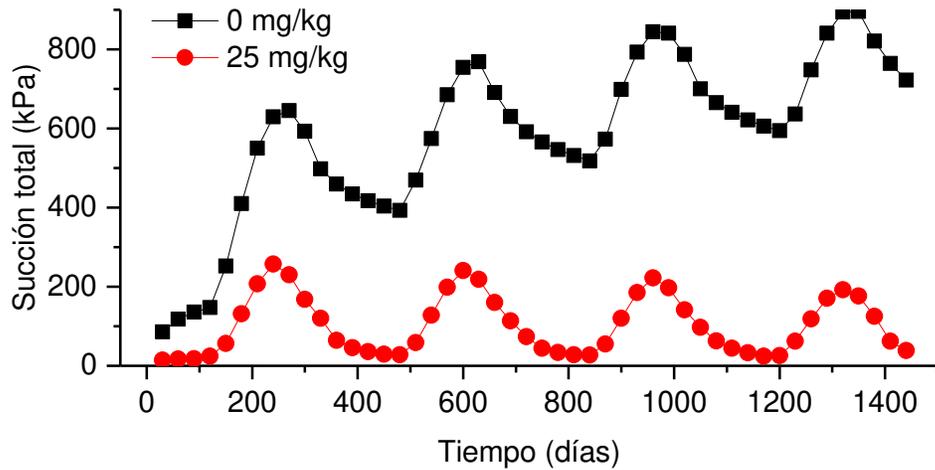


Figura 80. $\Delta\psi_t$ respecto al tiempo en suelos contaminados con As a 0 mg/kg y 25 mg/kg

Además, es necesario resaltar que para el perfil de 0 mg/kg, $\Delta\psi_t$ se encuentra en aumento respecto al tiempo, relacionándose con el aumento gradual de la zona afectada (la cual es máxima al final del análisis), debido a que al momento de entrar en nula precipitación el suelo en la superficie empieza a secarse y aumenta ψ_t , sin embargo, al tratarse de un suelo fino, el líquido permanece por más tiempo en esas zonas, y en el momento en que vuelve a presentarse precipitación el agua comienza a fluir hacia el interior del suelo, generando que la zona de afectación se encuentre en constante aumento y, por consiguiente, $\Delta\psi_t$ es más grande al presentarse un rango más amplio de los valores de ψ_t .

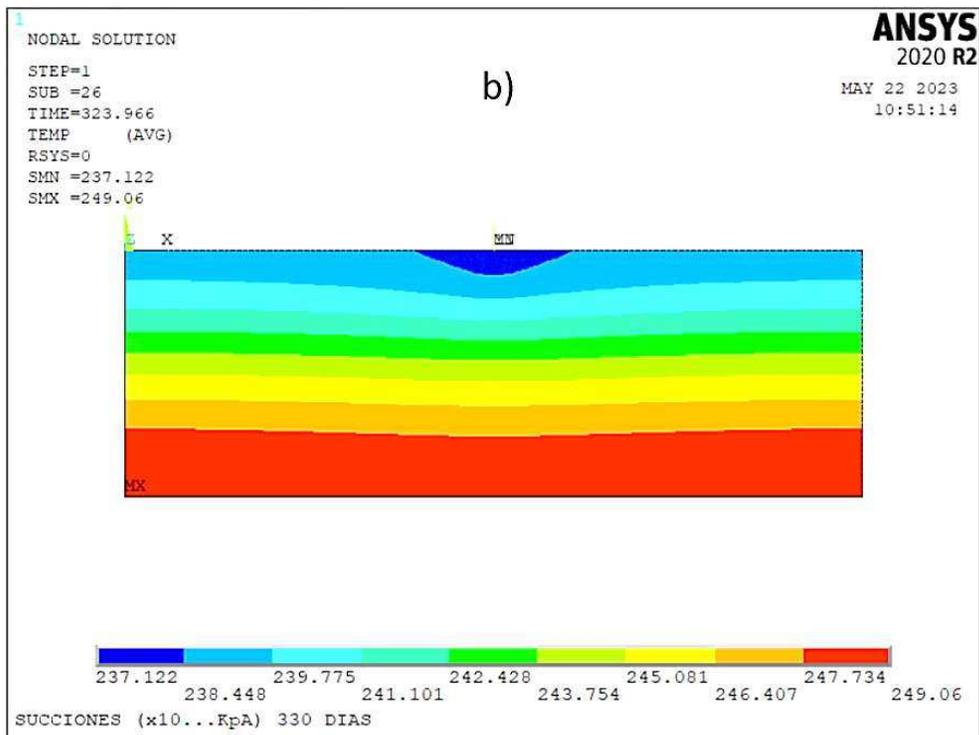
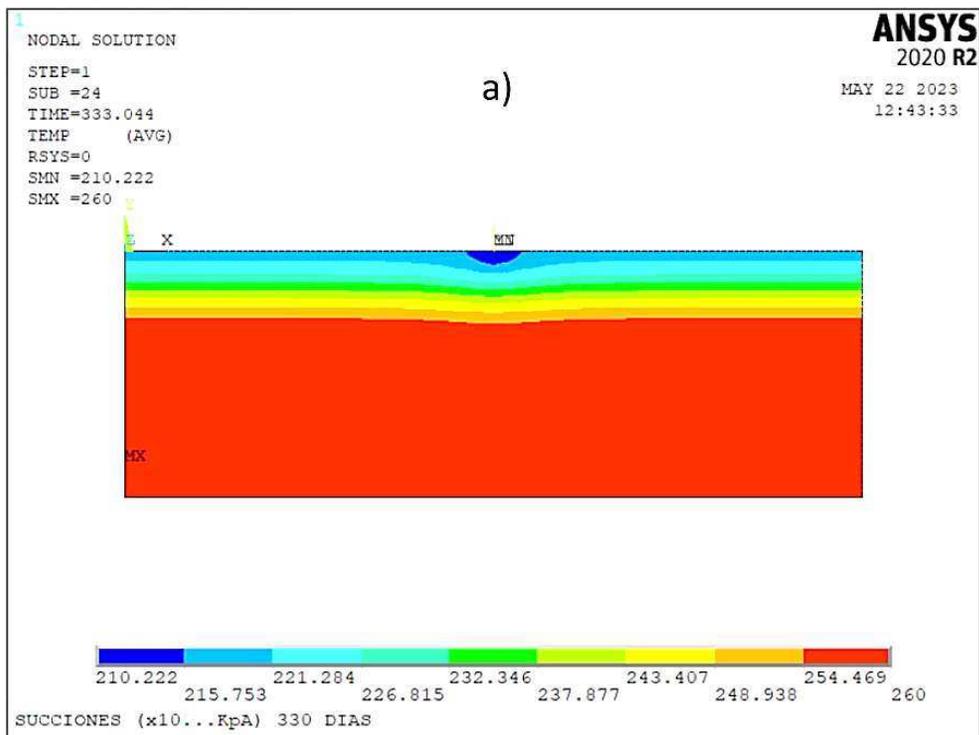


Figura 81. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 330 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 330 días

La Figura 82 representan el periodo de tiempo $t = 540$ días, tiempo correspondiente al mes de junio del segundo año de análisis (en época de lluvias) en el cual el agua producto de lluvia (de acuerdo a la función de precipitación) está ingresando al medio por la frontera superior causando que el cambio de ψ_t se estabilice (1.47 m para 0 mg/kg y 1.90 m para 25 mg/kg) con la parte central que recibe el flujo constante (1.58 m para 0 mg/kg y 2.16 m para 25 mg/kg), por lo que la escala de los cambios de ψ_t se mantiene casi horizontal (existe un cambio de 7.5% para 0 mg/kg y 13.44% para 25 mg/kg); es decir, la distorsión de los rangos de succión es menor, indicando que el suelo en ese periodo tenga una ψ_t similar en casi todo el medio a la misma profundidad.

Este comportamiento es similar a la condición de flujo debida solamente a la función de precipitación, demás, cada rango de ψ_t (escala de colores) incrementa su tamaño (visto gráficamente) debido al flujo de agua por el medio, permitiendo que se desarrollen y visualicen en tamaño todos los rangos de valores de ψ_t y aumentando $\Delta\psi_t$, siendo este valor más grande en la concentración de 25 mg/kg que en la de 0 mg/kg debido a la magnitud por los cambios que tiene el suelo una vez contaminado.

El tiempo $t = 810$ días (correspondiente al mes de marzo del tercer año de análisis) se presenta en la Figura 83, tiempo en el cual el suelo se encuentra en precipitación = 0. Para 0 mg/kg (Figura 83a) el bulbo de flujo (asociado a la fuente puntual) alcanza una profundidad de 2.10 m siendo casi horizontal con las barras de ψ_t a los costados (presentes a 2.00 m), se esperaría que a los costados se presentara una reducción de la profundidad de cambios de ψ_t , sin embargo esto no ocurre debido a la naturaleza del suelo mismo, ya que aunque no se presente flujo en la superficie, el líquido permanece en la estructura del suelo y por el valor de permeabilidad no es posible atravesar la masa de suelo rápidamente, situación que continua hasta llegar a la época de lluvia, en la cual la profundidad de estabilización seguirá aumentando sin dejar tiempo para que a los costados se aumente la ψ_t .

Por otra parte, para 25 mg/kg (Figura 83b) se presenta definido el bulbo de ψ_t en la zona central (a una profundidad de 3.40 m, es decir 1.61 veces más grande que 0 mg/kg) mientras que se desarrolla una reducción de profundidad en los costados del perfil de suelo (llegando a 2.46 m, lo que representa una reducción del 27.64% respecto al bulbo central), este comportamiento se presenta recurrente en el mes de marzo ($t = 450, 810$ y 1170 días), correspondiente a época de sequía (precipitación = 0).

Para dar más claridad a lo anterior, en el tiempo ($t = 1170$ días), el estado natural (Figura 84a) presenta un bulbo de ψ_t que se desarrolla hasta 2.62 m (30.3% más grande que el periodo anterior), y alcanzando una profundidad a los costados de 2.51 m (24.87% más grande que el periodo anterior), mostrándose un aumento constante en el perfil de ψ_t (profundidad de estabilización) sin importar si se trata de época de sequía o de lluvia. Por otra parte, la concentración de 25 mg/kg (Figura 84b) presenta un bulbo de ψ_t en el parte central definido a una profundidad de 3.51 m (aumento de 2.9% respecto al tiempo anterior), mientras que a los costados el bulbo se desarrolla hasta 2.37 m (3.6% menor que el periodo anterior). Estos resultados proporcionan una evidencia definitiva de los cambios físicos que sufre el suelo contaminado y como afectan el transporte de líquidos en el suelo, presentándose no solo una zona afectada mayor (en coordenadas x y z), si no que puede llegar a presentarse antes en periodos de tiempos mayores a 500 días.

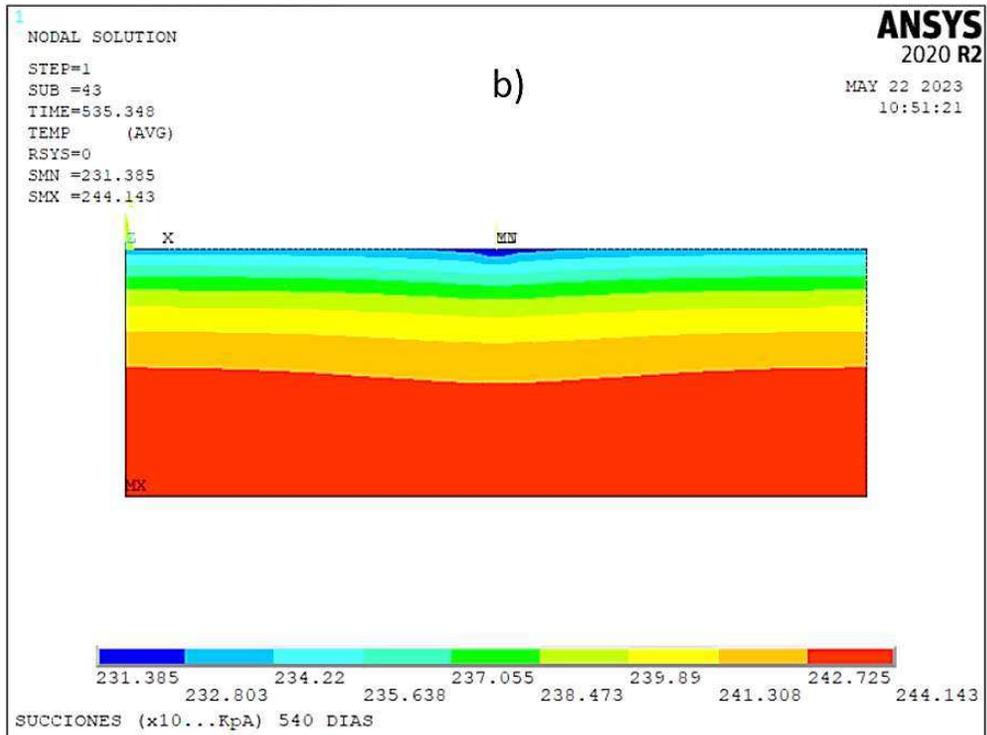
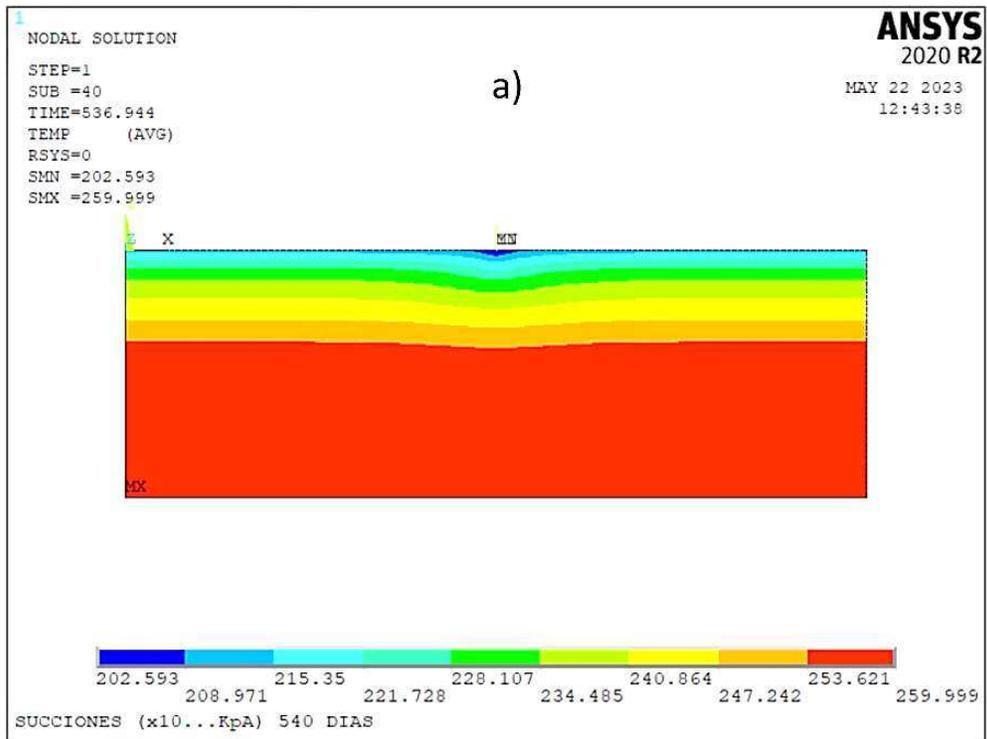


Figura 82. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 540 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 540 días

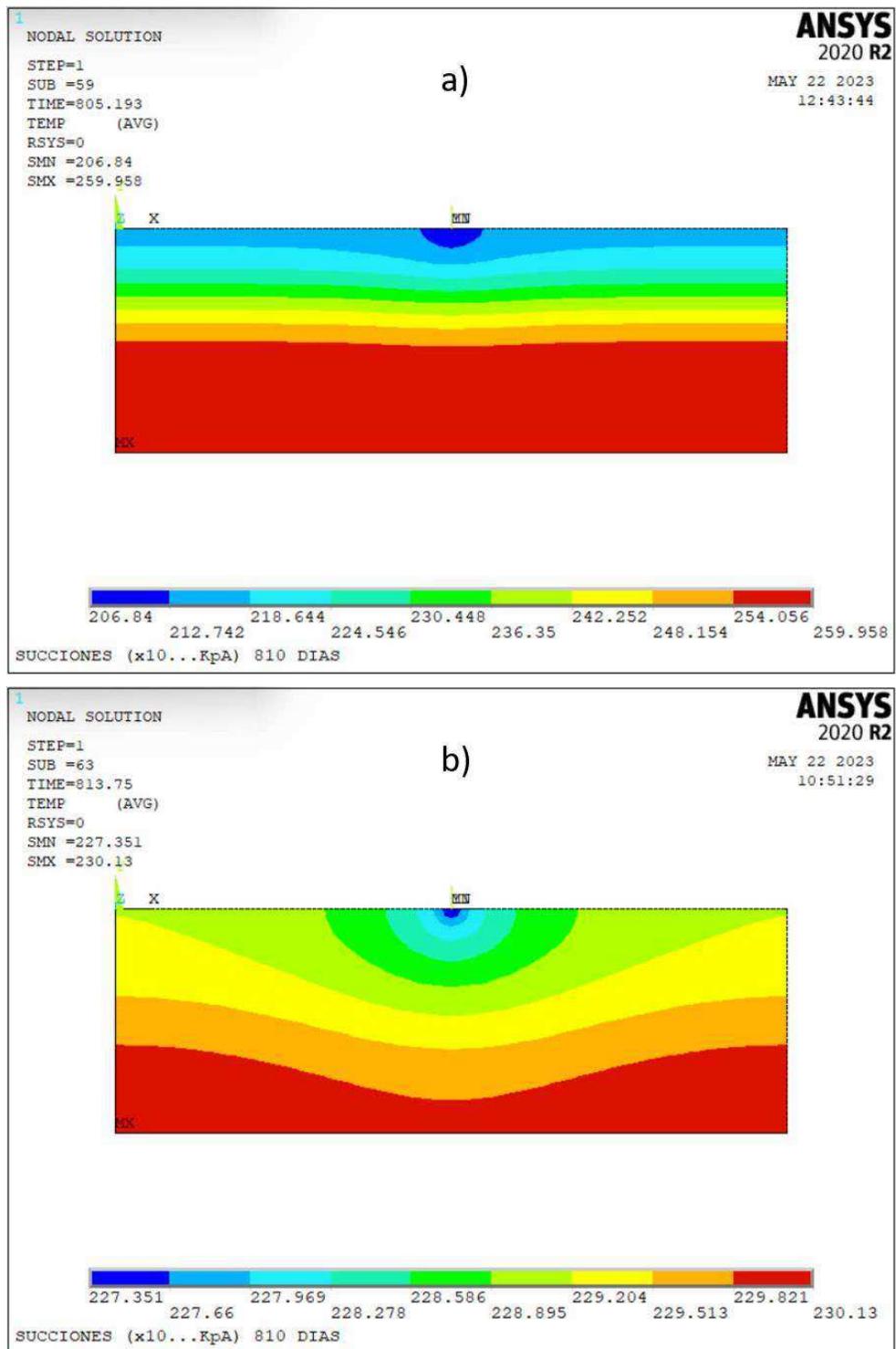


Figura 83. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 810 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 810 días

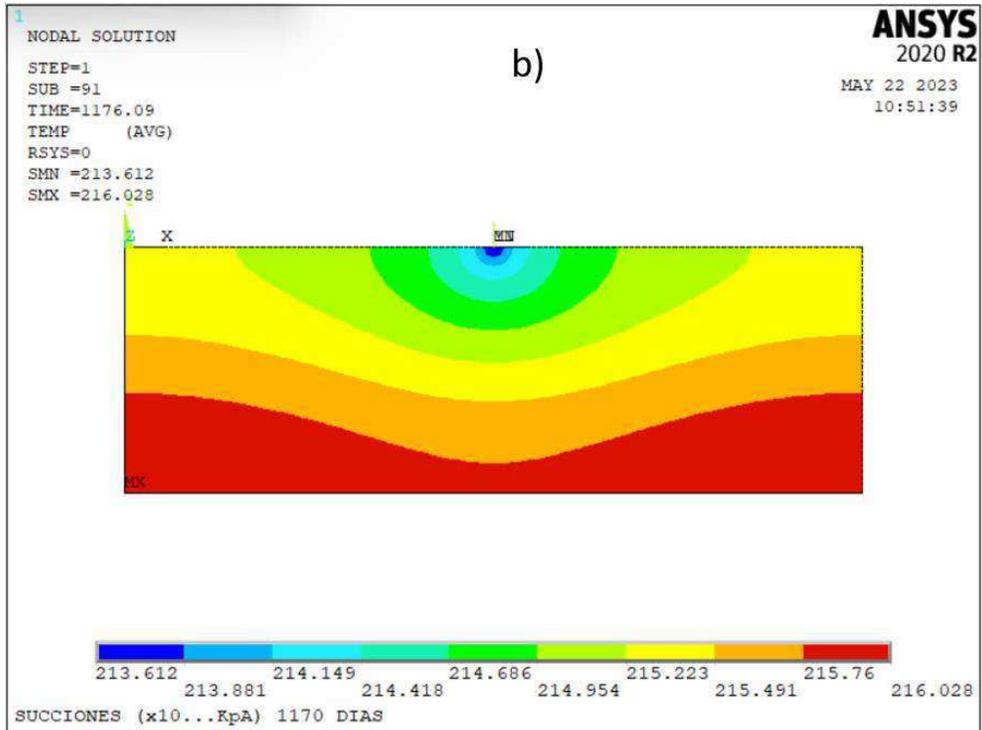
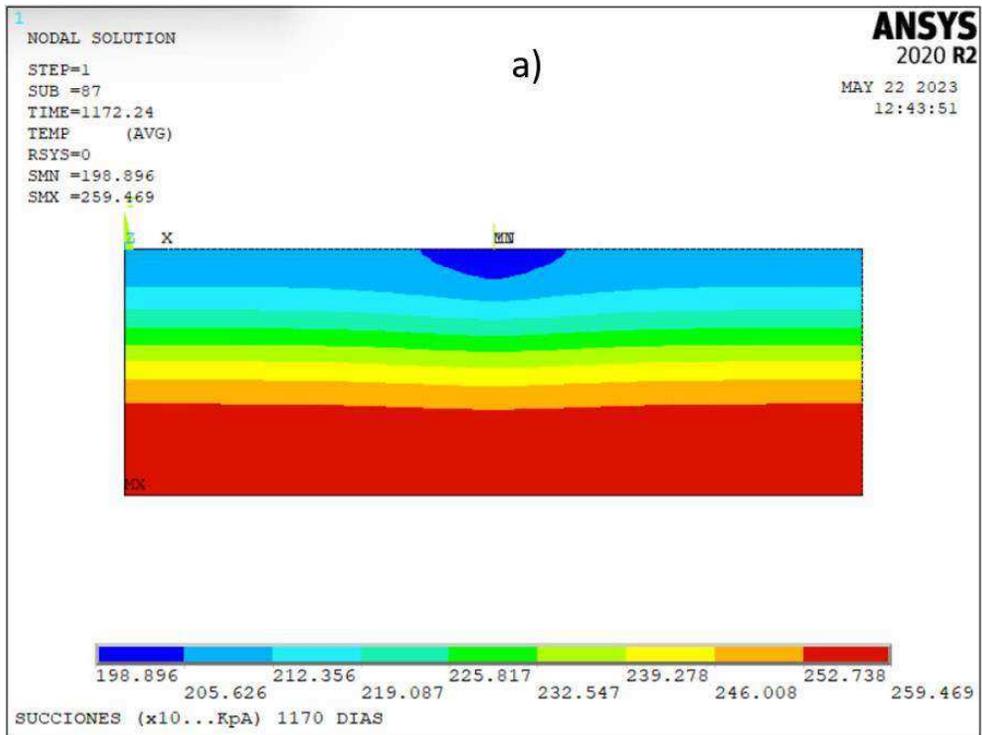


Figura 84. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 1170 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 1170 días

Finalmente, el tiempo $t = 1350$ días presenta un comportamiento similar en ambas concentraciones, mostrando en el centro, una profundidad de estabilización de ψ_t de 2.62 m para 0 mg/kg (Figura 85a) y 2.81 m para 25 mg/kg (Figura 85b), lo que representa un aumento del 7.2%, comportamiento asociado a la estructura del suelo, puesto que el estado natural representa un suelo fino, y la profundidad de estabilización se mantiene en aumento constante, mientras que el suelo con 25 mg/kg simula un suelo más grueso, lo cual hace que el líquido atraviese y afecte en consecuencia una profundidad mayor, exhibiendo un comportamiento cíclico. Estos resultados sugieren que en periodos de tiempo mayores a 1440 días el suelo natural exhibirá profundidades de estabilización de ψ_t cada vez más cercanas a la concentración de 25 mg/kg.

Estudios previos propusieron evaluar la importancia de estudiar el transporte de contaminantes en un medio saturado acoplado el fenómeno de consolidación (debido al peso propio del suelo y la colocación de rellenos), los análisis no dependen del grado de contaminación y dependían del contenido de agua, por lo que este estudio fue diseñado para determinar la zona afectada de suelo al contaminarse el suelo en la zona no saturada tomando en consideración que el suelo ha sufrido una modificación en su estructura al contaminarse, situación que ha sido demostrada y observada en los análisis mostrados anteriormente, siendo este punto en el que convergen los resultados de la caracterización geotécnica (Alshawabkeh & Rahbar, 2006; Zhang *et al.*, 2012; Li *et al.*, 2019).

Aunque otros estudios han hecho uso de la ley de Richards para la condición no saturada del suelo (Fityus *et al.*, 1999; Abbasi Maedeh *et al.*, 2017), no se tomaba en cuenta la variación del perfil de humedad ni una variación en el coeficiente de difusión para realizar un modelado realista en la zona no saturada, por lo que en este estudio se implementó la variación en el contenido de líquidos (difusividad, conductividad hidráulica y SWRC) y los resultados han reforzado el punto de vista sobre el uso de las características hidro-mecánicas del suelo no

saturado en el transporte de contaminantes, es decir, el uso de la SWRC, FCH y la función de difusividad.

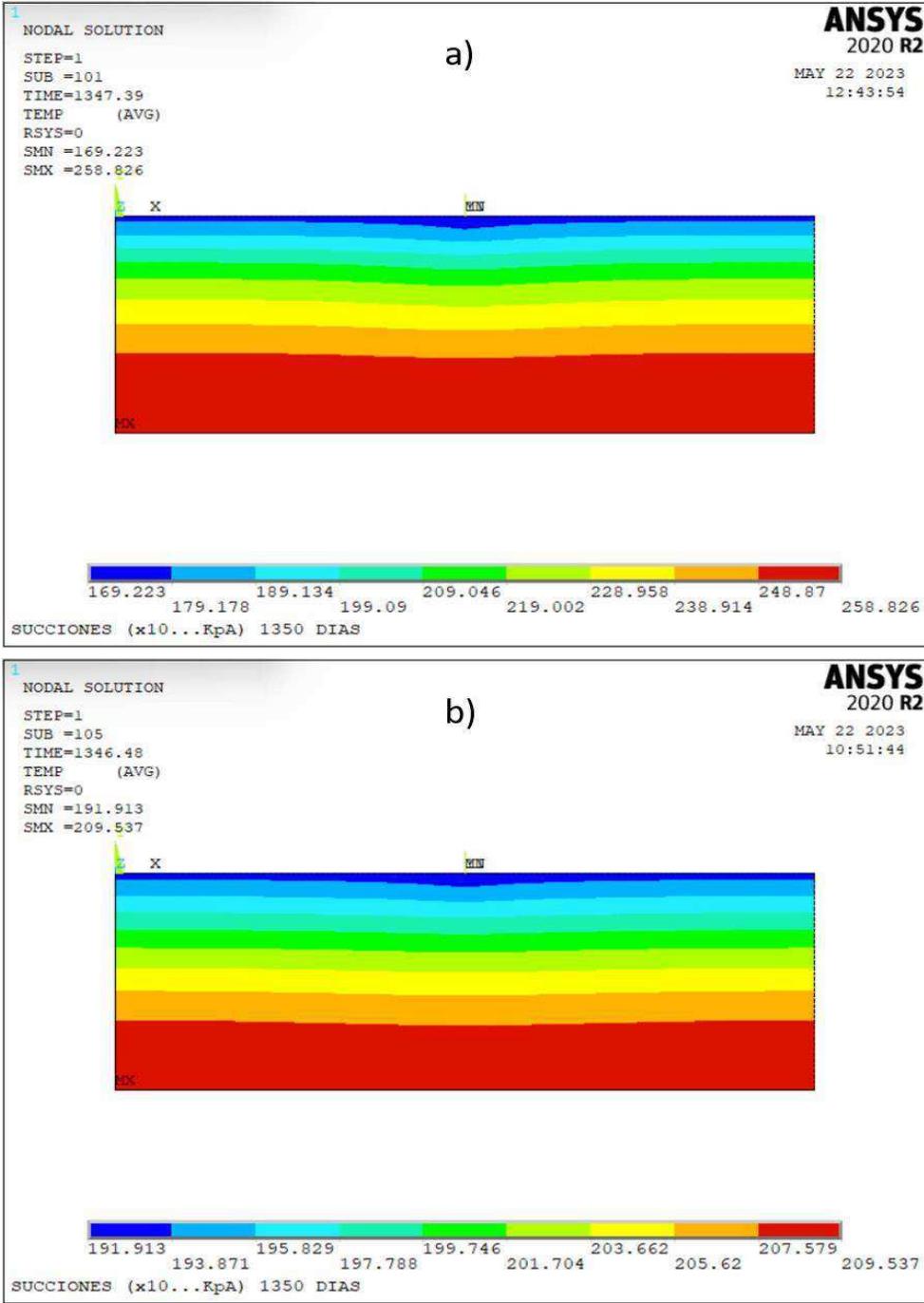


Figura 85. Modelo discreto de flujo: a) suelo natural a 1350 días, y b) suelo contaminado con 25 mg/kg de As a 1350 días

4.17.5 FLUJO DEL ARSÉNICO EN EL SUELO

Los cambios en la concentración con la profundidad de afectación se compararon en el tiempo con el fin de observar la distribución de la concentración del arsénico en la zona no saturada del suelo. Debido a que el contaminante no solo puede llegar hacia la zona saturada del suelo por medio de la velocidad de flujo (conductividad hidráulica), sino que también influye el flujo generado por una descarga continua o discontinua (derrame en tuberías y descarga en la superficie).

La concentración de arsénico se calcula al considerar que el flujo depende del grado de saturación del suelo, el cual resulta afectado por el flujo puntual y las condiciones ambientales (función de precipitación) acompañado de cambios en el perfil de succión. Dicho de otra manera, la concentración del arsénico en la condición no saturada dependerá de la saturación suelo y la profundidad, debido a que, aunque en suelos saturados la concentración depende del área de la sección (Lemaire *et al.*, 2020) y de la velocidad del flujo (Ciriello & de Barros, 2020), en la zona no saturada se presentan conductividades hidráulicas menores a k_{sat} .

La primera condición que se presenta es la de una descarga discontinua, asociada únicamente a una función de precipitación. Los resultados se presentan a través de unas barras paralelas en escala de colores que representan el cambio en la concentración de arsénico en el suelo. El primer periodo de tiempo es de $t = 150$ días (correspondiente al mes de mayo, en donde se inicia la época de lluvias) y se presenta en la Figura 86a) (considerando que el suelo no ha sufrido un cambio en su estructura) y Figura 86b) (considerando la modificación de estructura).

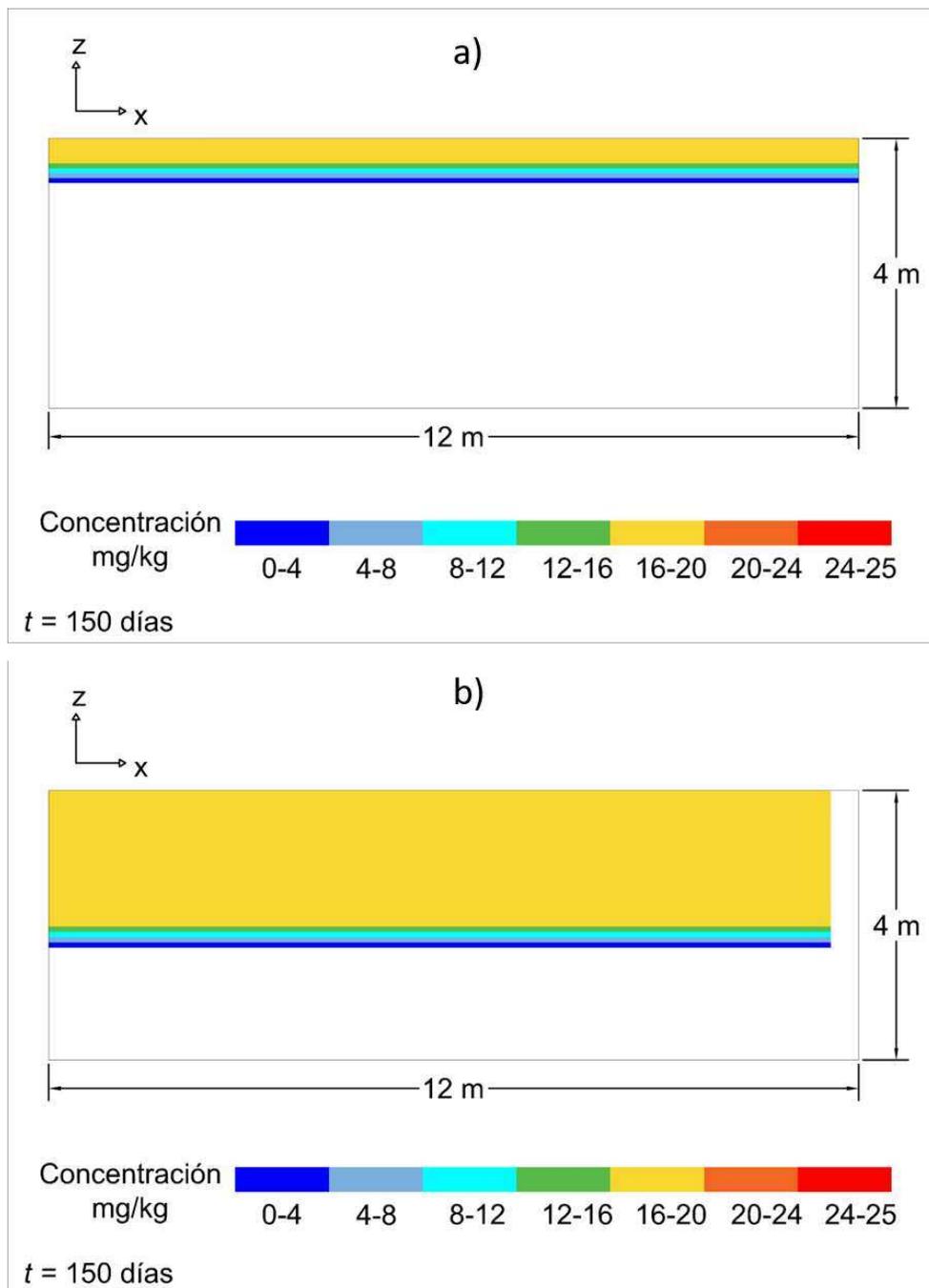


Figura 86. Distribución de la concentración de As para una descarga transitoria considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 150 días

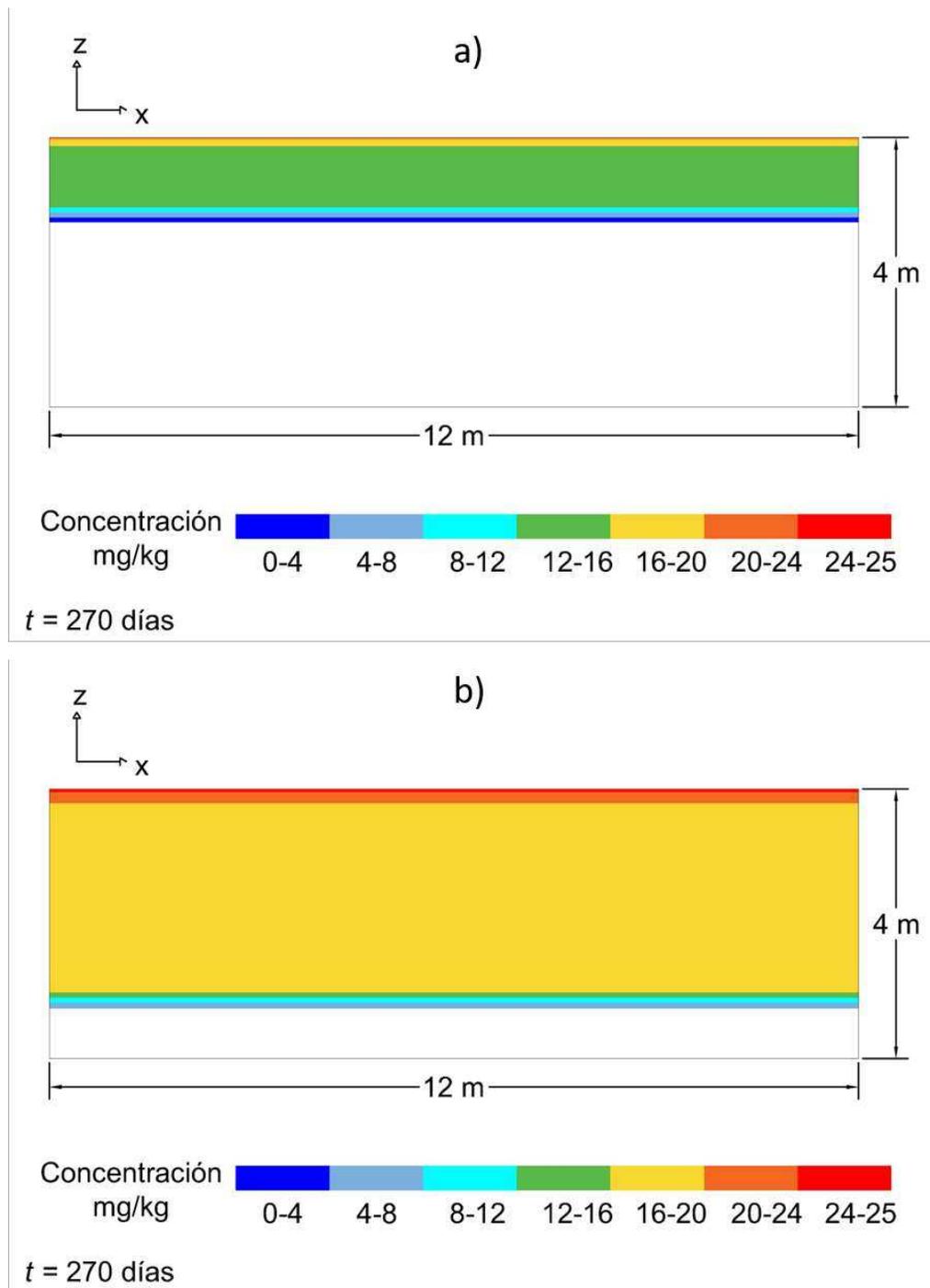


Figura 87. Distribución de la concentración de As para una descarga transitoria considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 270 días

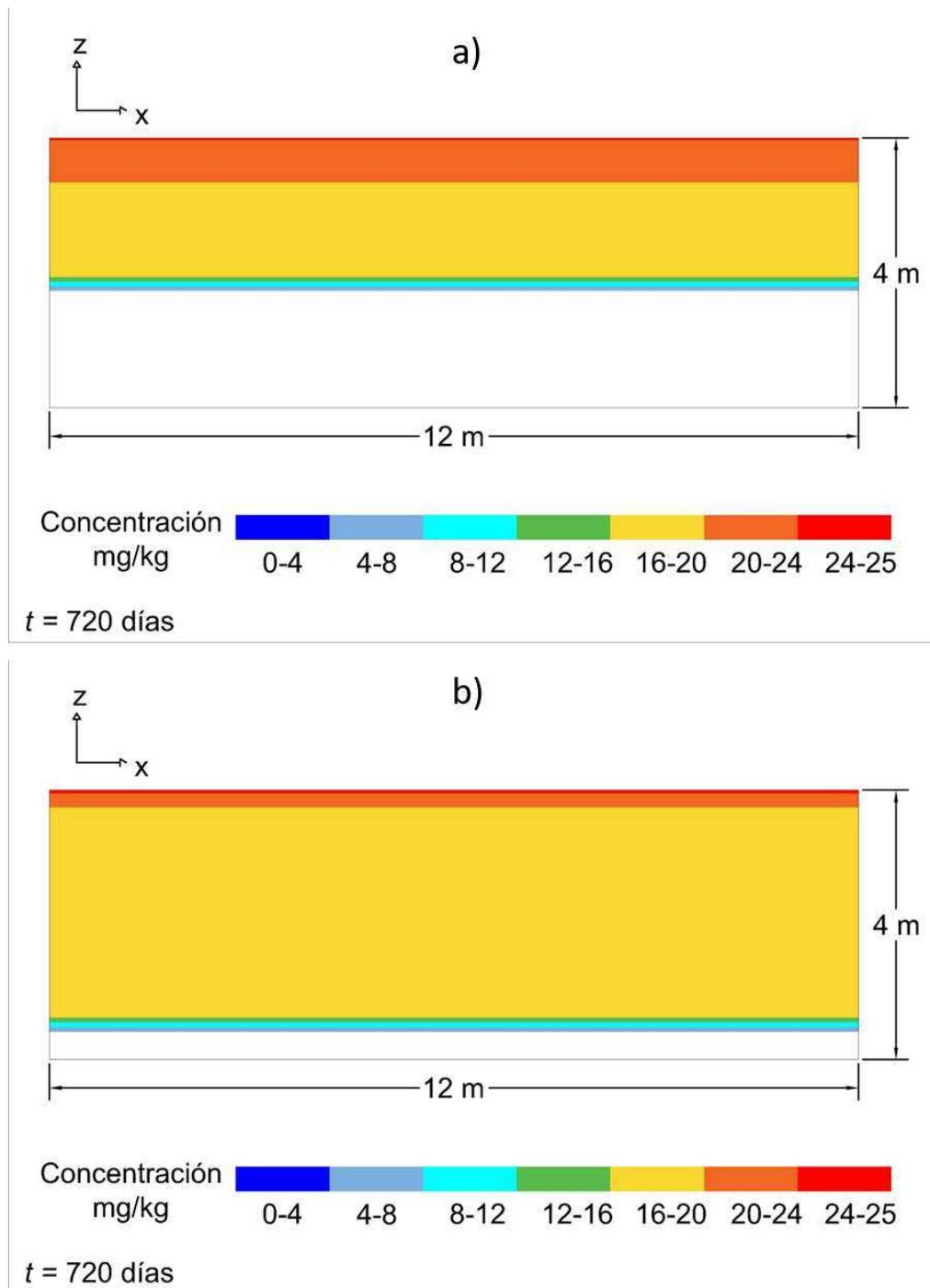


Figura 88. Distribución de la concentración de As para una descarga transitoria considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 720 días

Es posible observar un aumento en la zona afectada (desde la superficie hasta alcanzar la concentración mínima) al considerar que el suelo cambia sus propiedades geotécnicas, aumentando de 0.66 m a 2.33 m (lo que se traduce en un aumento de 3.53 veces), comportamiento asociado al cambio en las propiedades hidromecánicas mostradas en el Capítulo 4.12 CARACTERIZACIÓN GEOTÉCNICA, el cual hace que cualquier líquido (en esta condición se refiere a la función de precipitación) atraviese más rápido la masa de suelo y en consecuencia afectando un área mayor.

A continuación, se presenta el periodo de tiempo $t = 270$ días (correspondiente al mes de septiembre del primer año) en la Figura 87a) (sin considerar modificación de estructura) y Figura 87b) (considerando modificación de estructura), mostrando un cambio respecto al periodo de tiempo anterior, ya que, las profundidades de afectación (desde la superficie hasta llegar a la concentración mínima) cambia de 1.26 m hasta 3.25 m (aumento de 2.58 veces) en el suelo contaminado. Es natural que esta profundidad se incremente, debido a que el suelo ha estado expuesto a precipitaciones continuas y en este tiempo se encuentra en precipitación máxima, por lo cual el líquido atravesara la superficie contaminada y a su vez contaminando el suelo más profundo a su paso.

Es necesario mencionar, además, el periodo de tiempo $t = 720$ días (correspondiente al mes de enero del tercer año), debido a que representa la época de sequía de acuerdo a la función de precipitación. Los resultados se presentan a través de la Figura 88a) (sin estructura modificada) y la Figura 88b) (estructura modificada), donde es posible observar que a pesar de no contar con precipitación la profundidad afectada sigue en aumento, esto se explica a través del hecho de que si no consideramos la modificación de la estructura del suelo producto de la contaminación, el líquido permanecerá por más tiempo en la estructura interna, puesto que se está atravesando un suelo fino y los cambios en succión (debido a las variaciones en el contenido de líquidos) no se verán reflejados en profundidades lejanas a la superficie, por otra parte, al considerar la modificación de la estructura

del suelo, el líquido atravesará la superficie contaminada y seguirá afectando el suelo a su paso con una mayor velocidad debido al cambio en k_{sat} .

Los siguientes periodos de tiempo son $t = 1170$ días (Figura 89) correspondiente al mes de marzo del cuarto año y $t = 1440$ días (Figura 90) correspondiente al mes de diciembre del cuarto año, los cuales presentan resultados similares tratándose de trayectorias similares (secado), puesto que en ambos casos, el considerar el suelo sin modificar resulta en una profundidad para alcanzar la mínima concentración 3.26 m (Figura 89a) y Figura 90a)), mientras que el suelo modificado resulta en una profundidad de 3.60 m (Figura 89b) y Figura 90b)), lo que se traduce en un aumento de 10% respecto al suelo sin modificar. Estos resultados sugieren que tiempos de análisis mayores a 4 años considerando el suelo sin modificaciones resultarán en profundidades de concentración iguales o superiores al suelo modificado por acción del arsénico.

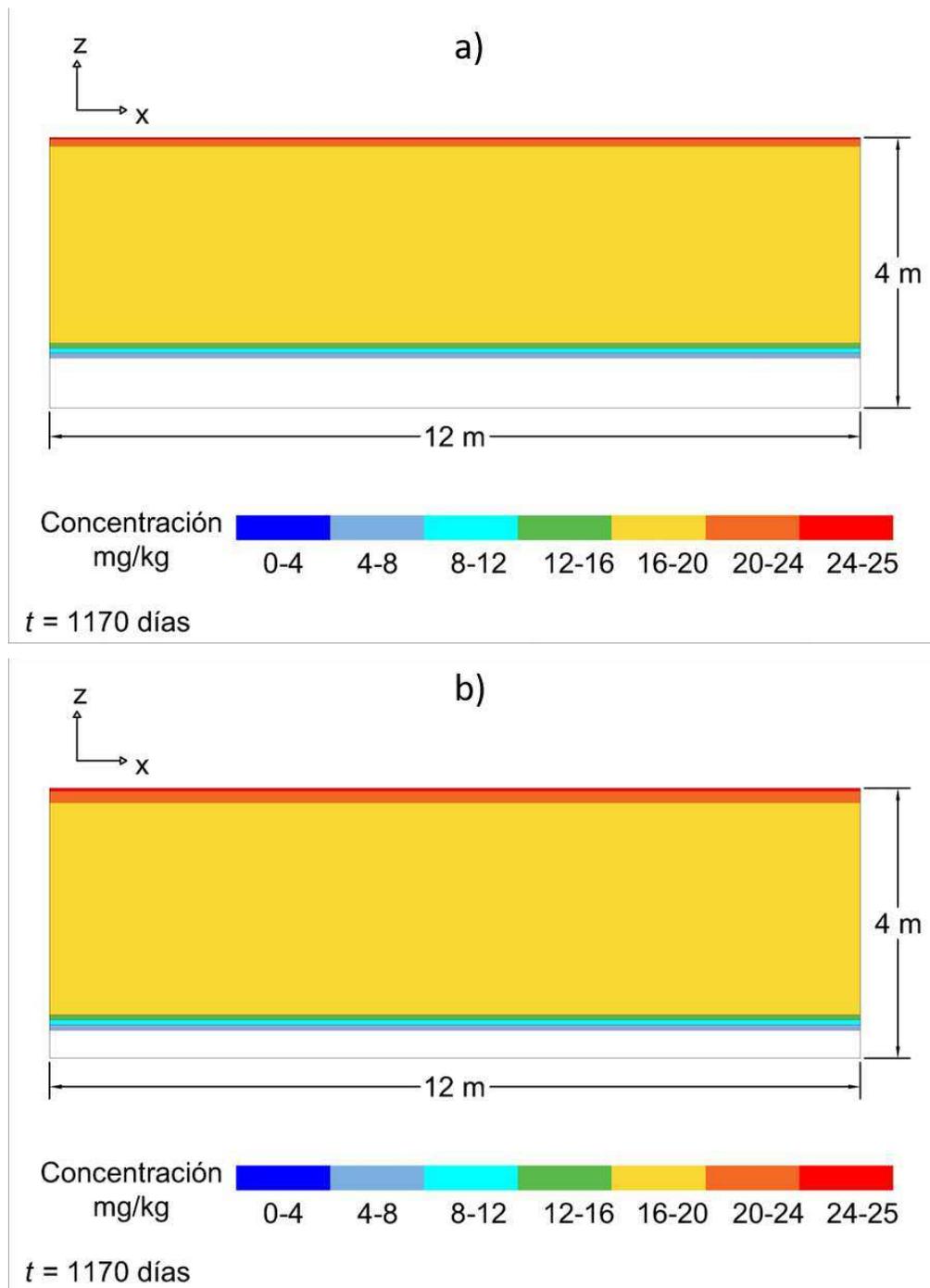


Figura 89. Distribución de la concentración de As para una descarga transitoria considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 1170 días

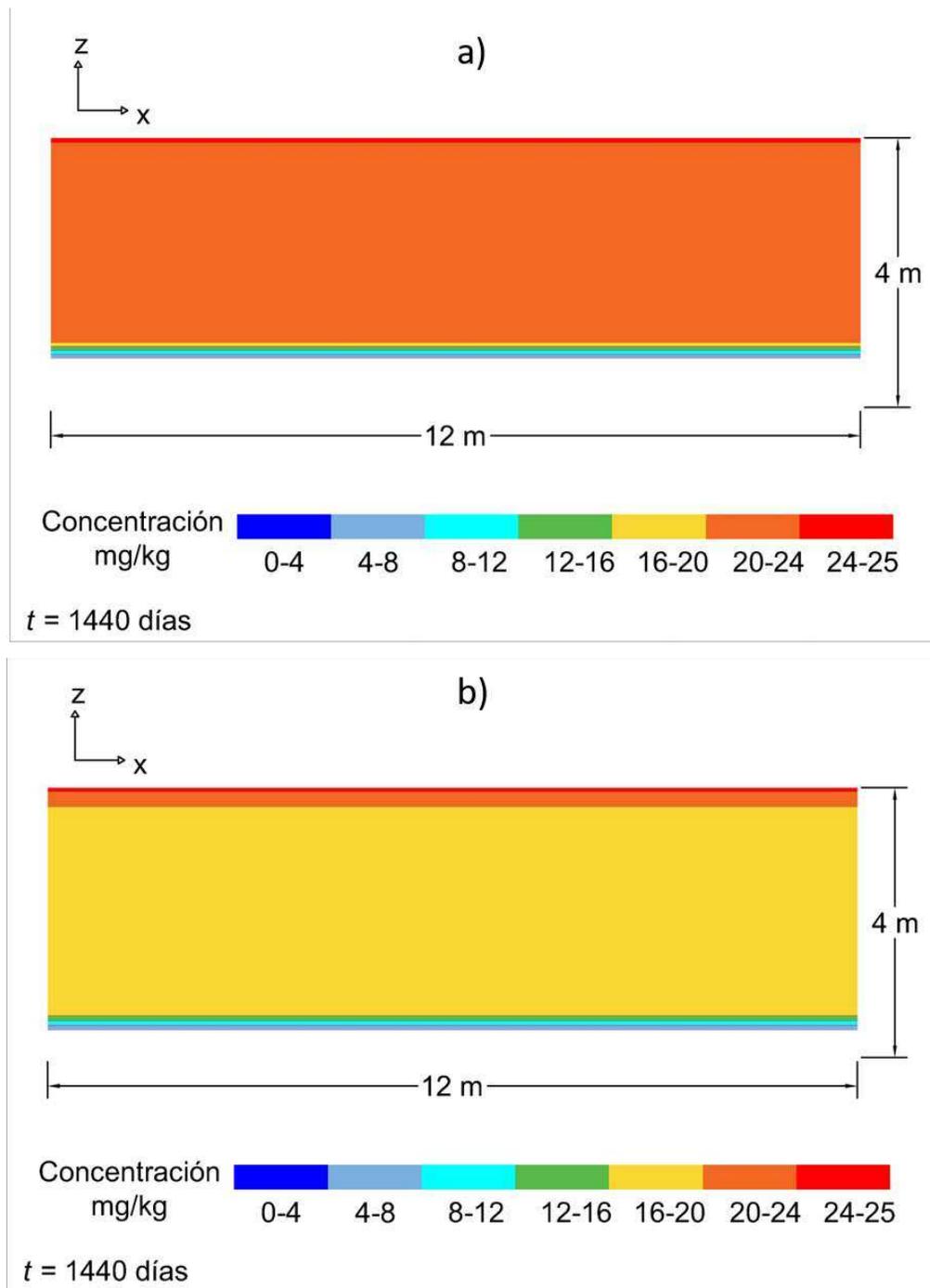


Figura 90. Distribución de la concentración de As para una descarga transitoria considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 1440 días

La segunda condición por analizar es la condición ambiental (a través de la función de precipitación) acoplado a una fuente continua, simulando una fuga de agua que atravesará el suelo contaminado. Los resultados de este análisis se presentan a través de distintos periodos de tiempo, tanto en época de sequía (precipitación = 0) como de humedecimiento.

La Figura 91a) presenta la concentración de arsénico considerando que el suelo no ha sufrido una modificación en su estructura, mientras que la Figura 91b) presenta el perfil de concentraciones considerando la modificación de la estructura del suelo una vez que se ha contaminado con arsénico, ambos perfiles en el tiempo $t = 150$ días (el cual corresponde al mes de mayo, en el cual inicia la época de humedecimiento).

Si no se considera la modificación del suelo (propiedades geotécnicas de 0 mg/kg) es posible observar que se forma un bulbo de concentraciones en la parte central donde se desarrolla un valor máximo de 25 mg/kg en la superficie (afectando 1.4 m de diámetro) hasta un valor mínimo de 0 mg/kg a 1 m de profundidad (afectando 2.15 m de diámetro). Por otra parte, al considerar los cambios en las propiedades geotécnicas es posible observar un aumento en el bulbo de concentraciones, cambiando de diámetro de 1.4 m a 3.3 m en la superficie, lo que se traduce en un aumento de 2.35 veces, mientras que el bulbo se desarrolla hasta una profundidad de 2.7 m y se proyecta a 7.0 m de diámetro.

Estos resultados indican que al existir mayor disponibilidad de agua en el medio y, en consecuencia, una mayor velocidad de flujo cuando se considera la modificación del suelo, el líquido atravesará una profundidad mayor y permanecerá menor tiempo en la masa de suelo, lo que se traduce en un aumento del área afectada por el arsénico.

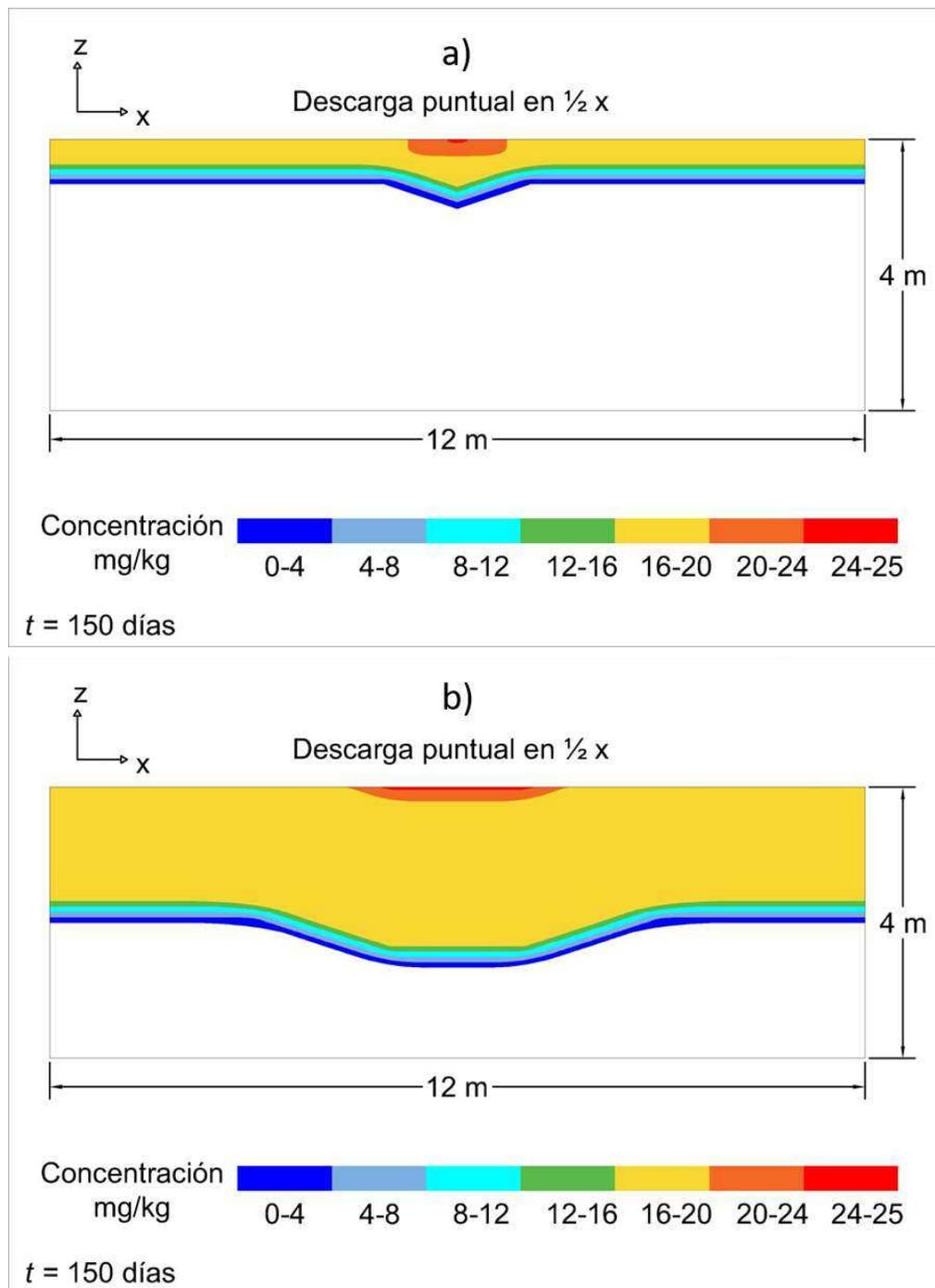


Figura 91. Distribución de la concentración de As considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 150 días

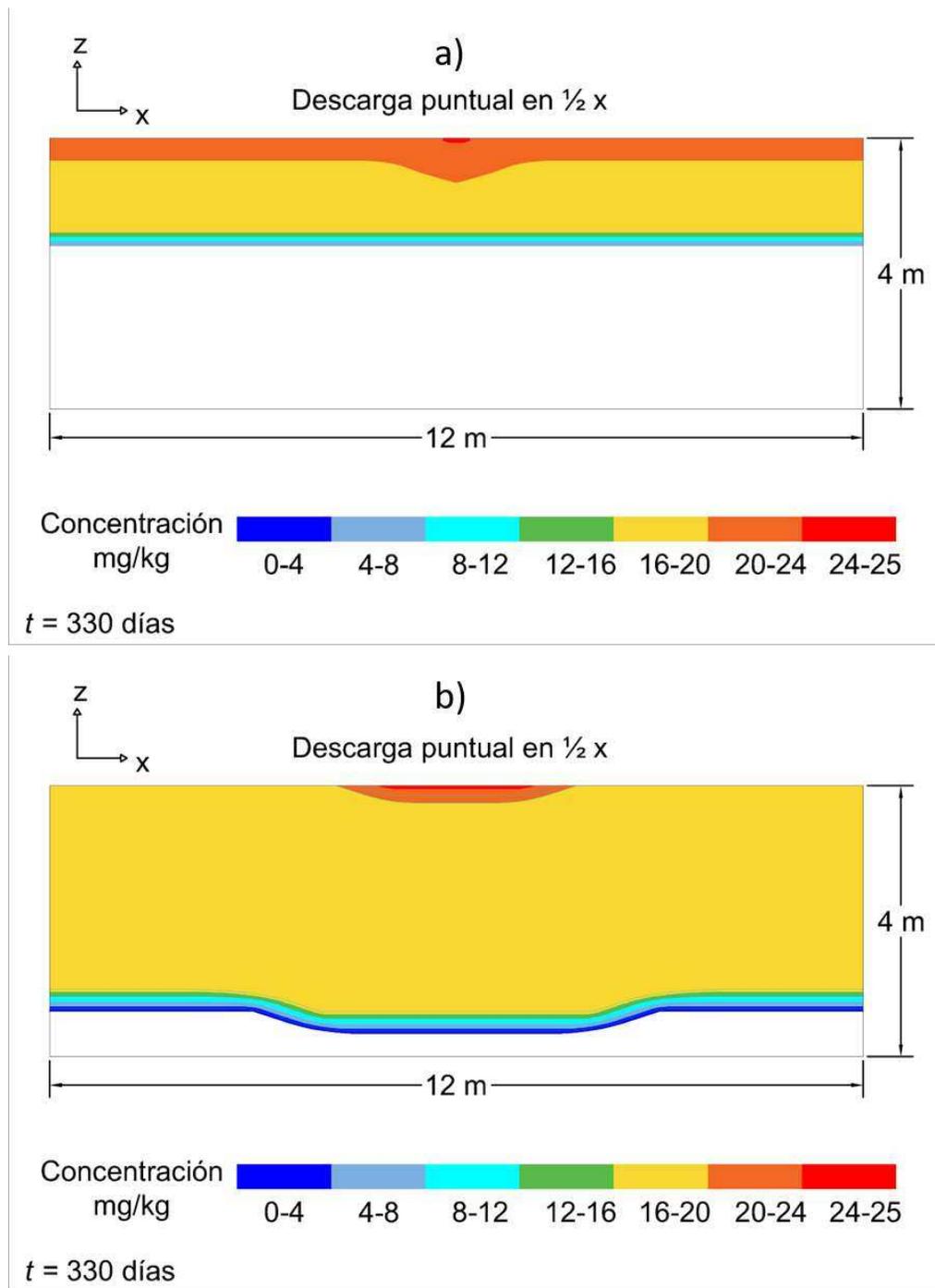


Figura 92. Distribución de la concentración de As considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 330 días

El siguiente periodo de tiempo analizado es el de $t = 330$ días (correspondiente al mes de noviembre del primer año en época de precipitación = 0), el cual se presenta en la Figura 92a) (considerando que no se modifica la estructura) y la Figura 92b) (que considera la modificación de la estructura).

Los resultados presentan un aumento en el bulbo de concentraciones máximas en la parte central (de 2.60 m aumentando a 3.60 m) en la superficie, mientras que las concentraciones menores se presentan a 1.60 m (sin modificar la estructura) y 3.70 m (modificando la estructura). Al no haber disponibilidad de agua en el medio (precipitación), el líquido solo avanza por la fuente puntual y permanecerá un mayor tiempo en la masa de suelo, lo que se traduce en un aumento en la zona contaminada por arsénico.

Analizando el siguiente periodo de tiempo ($t = 510$ días) en la función de precipitación correspondiente al mes de mayo del segundo año (mes donde se inicia la precipitación), podemos observar que el suelo sin modificar (Figura 93a)) presenta un bulbo de afectación de 1.60 m de diámetro en la superficie, el cual se prolonga hasta 0.70 m de profundidad (mínima concentración).

Por otra parte, al considerar las modificaciones en el comportamiento del suelo (Figura 93b)), el bulbo de afectación es notablemente más grande (3.17 m de diámetro en la superficie, lo que se traduce en un aumento de 1.9 veces) no solo en la superficie, si no que, este se desarrolla hasta alcanzar una concentración mínima en la profundidad de 3 m, la cual presenta una afectación de 10 m de diámetro.

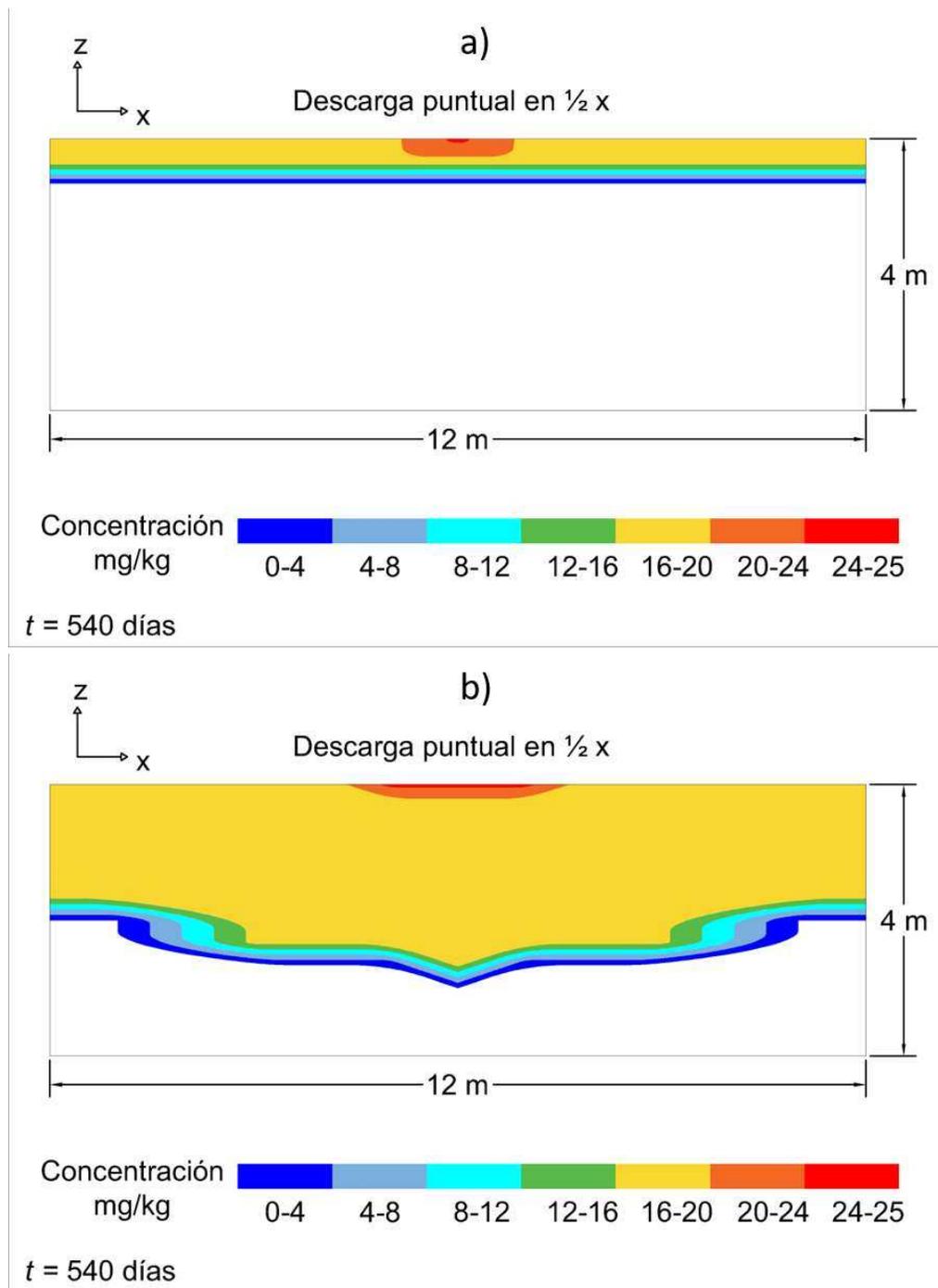


Figura 93. Distribución de la concentración de As considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 540 días

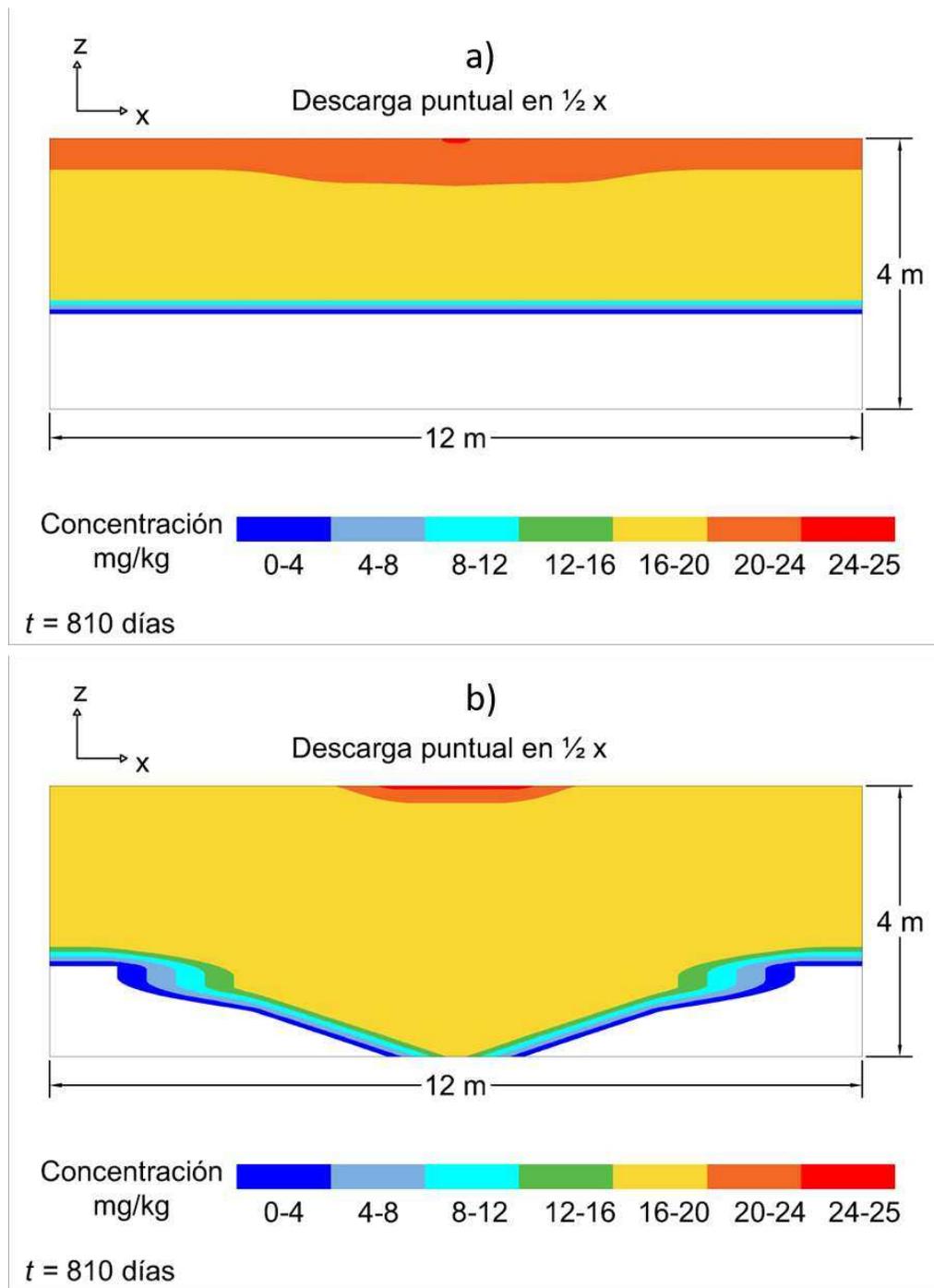


Figura 94. Distribución de la concentración de As considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 810 días

El periodo de tiempo $t = 810$ días (mes de marzo del tercer año de análisis) es donde se presenta la mayor afectación con los valores de ψ_t y en consecuencia mayor afectación de las concentraciones de arsénico en ambas condiciones de cambios físicos, para el estado no modificado (Figura 94a)) este bulbo de afectación alcanza un diámetro máximo de 6.6 m en la parte central y una profundidad de 2.60 m para alcanzar la mínima concentración, mientras que el estado modificado (Figura 94b)) presenta un bulbo de afectación que alcanza un diámetro máximo de 10 m (1.52 veces más grande) alcanzando la concentración mínima a una profundidad de 4.0 m (aumento de 1.54 veces).

Para dar más claridad a lo anterior el siguiente periodo de tiempo analizado es $t = 1170$ días (mes de marzo del cuarto año de análisis), en el cual, podemos observar que el bulbo de afectación para el suelo sin modificar (Figura 95a)) alcanza los 3.33 m de profundidad (aumento de 28% respecto a $t = 810$ días), mientras se desarrolla a 4.73 m de diámetro. Por otra parte, considerando la modificación del suelo (Figura 95b)) encontramos que el bulbo de afectación alcanza 10.22 m de diámetro (2.16 veces más grande que la condición anterior). Este bulbo se presenta en dimensiones similares en tiempos recurrentes (mes de marzo) antes del inicio de precipitación como se ha observado en los resultados anteriores.

Finalmente, el último periodo analizado es $t = 1350$ días (mes de septiembre del cuarto año), en el cual, de manera similar al bulbo de ψ_t , encontramos bulbos de concentraciones de 3.33 m para ambas condiciones, sin embargo, la diferencia radica en que para el suelo sin modificar (Figura 96a)) se desarrolla en un diámetro de 4.90 m, mientras que el suelo modificado (Figura 96b)) alcanza 10.30 m (2.1 veces más grande). Este resultado indica que, el suelo sin modificar tardó 45 meses en alcanzar resultados de afectación similares al del suelo modificado, el cual los alcanzó a los 15 meses y se presentó recurrente en el mes de marzo, lo cual significa que, la máxima afectación se presentará 3 veces más rápido que el suelo sin modificar, debido principalmente a los cambios hidromecánicos que presenta el suelo contaminado.

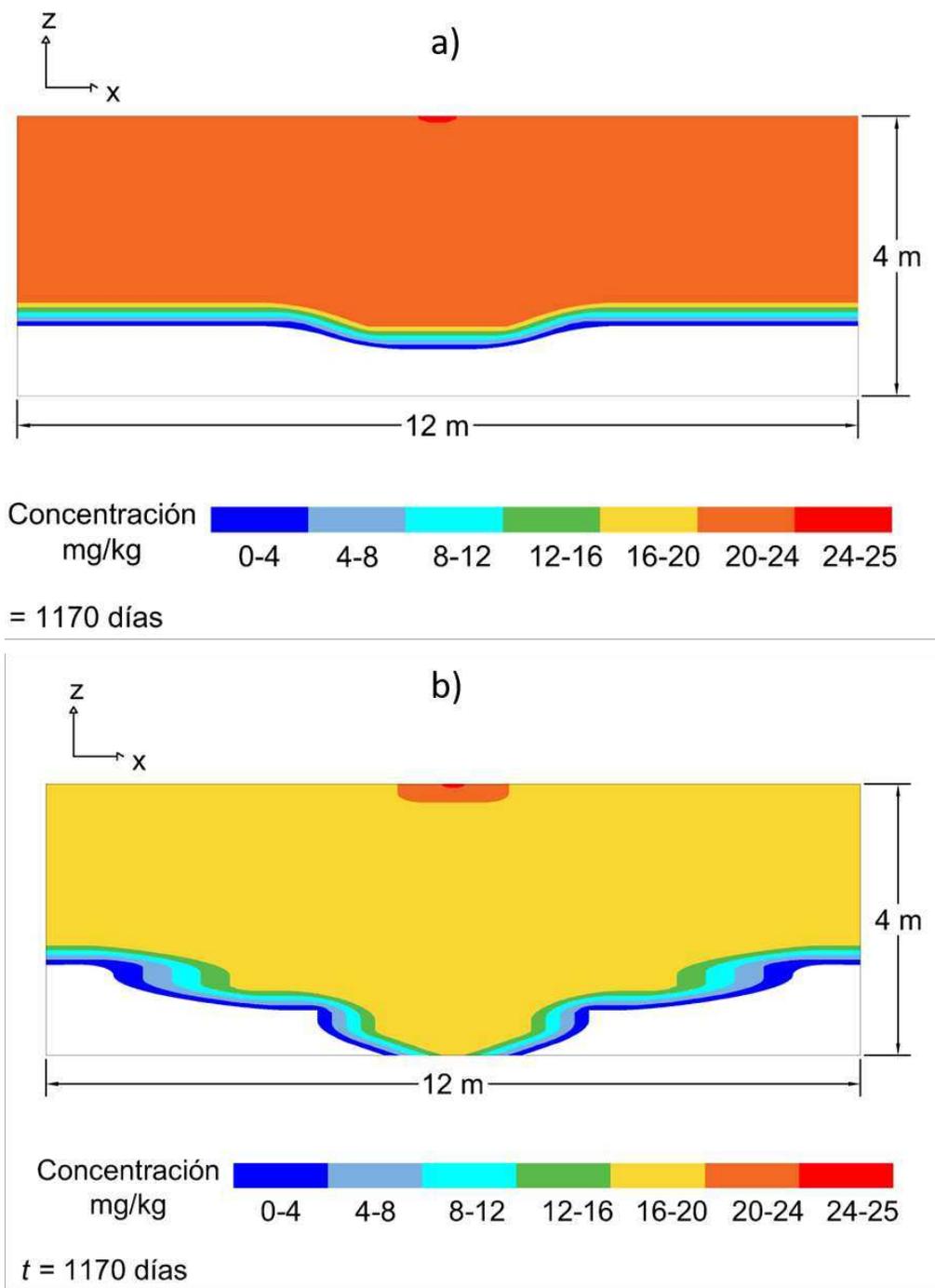


Figura 95. Distribución de la concentración de As considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 1170 días

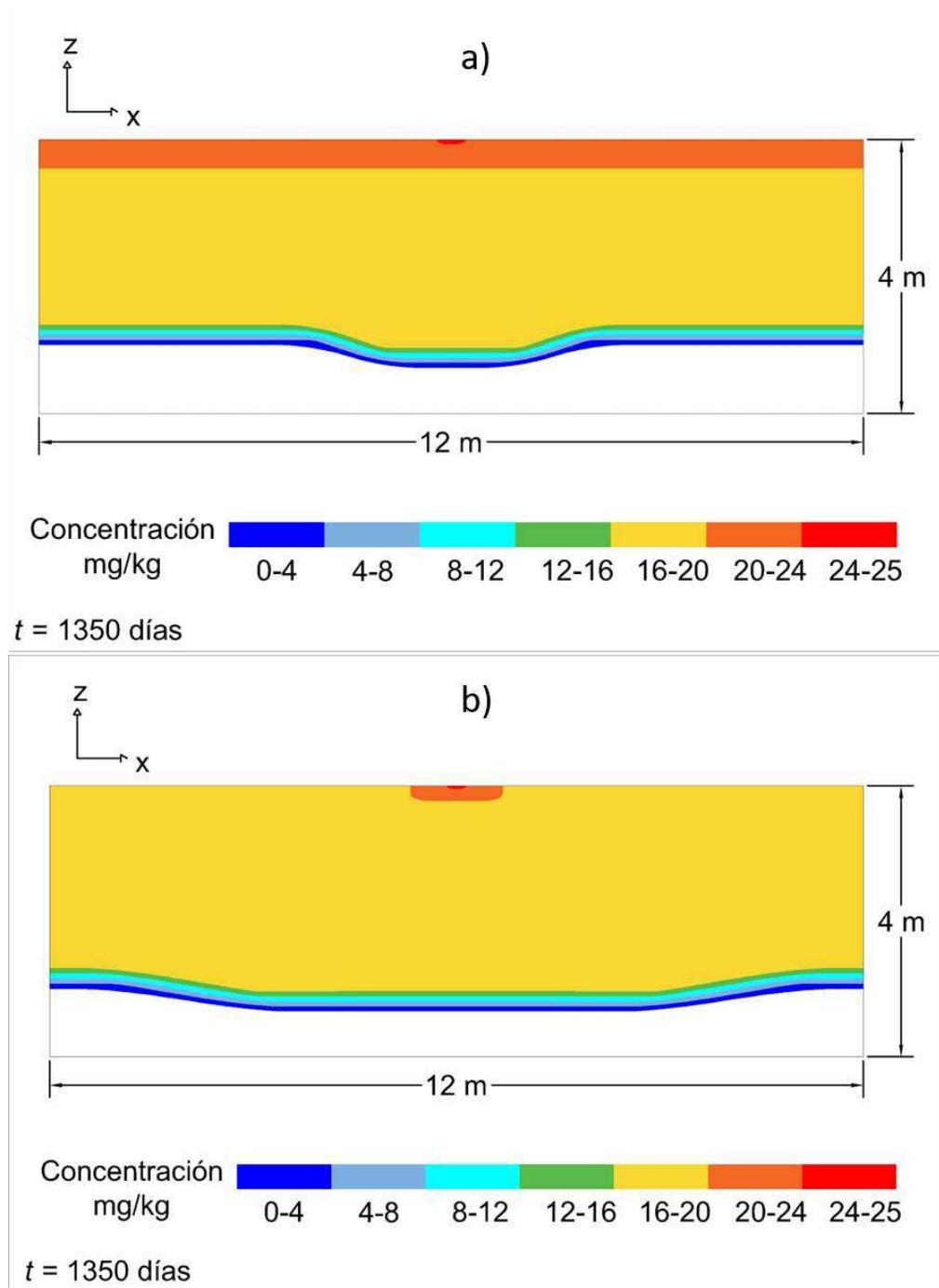


Figura 96. Distribución de la concentración de As considerando que el suelo: a) no sufre modificación de su estructura, y b) sufre modificación de su estructura (25 mg/kg) en 1350 días

Estos resultados indican, que los valores de concentración dependen de los ciclos de humedecimiento-secado y de la magnitud de los cambios hidromecánicos en el suelo contaminado, esto se explica debido al hecho de que el suelo contaminado exhibe un aumento en contenido de arenas y gravas, disminuye el valor de succión de acuerdo a la ecuación de Laplace y aumenta directamente el valor de conductividad hidráulica en la zona no saturada, lo que ocasiona que el arsénico se distribuya en una zona más grande.

Hay evidencia limitada del análisis del transporte de contaminantes en la zona no saturada del suelo debido, principalmente, a los datos requeridos para el análisis (que dependen del tipo de contaminante). Estudios como Abbasi Maedeh *et al.* (2017) proporcionan resultados interesantes, ya que considera el uso de ψ_m y distintas conductividades hidráulicas encontrando que la concentración de solutos (hidrocarburos) es casi 10 veces más pequeña en el suelo no saturado en comparación con la condición saturada, debido a los cambios en la ψ_m , además de que la conductividad hidráulica saturada no tiene un efecto en el patrón de dispersión

Sin embargo, Abbasi Maedeh *et al.* (2017) solo utilizan una de las trayectorias de la SWRC y no consideran que el suelo ha sufrido una modificación en sus propiedades, lo cual difiere con los resultados encontrados en la presente investigación. Por lo tanto, podemos decir que, a pesar de que se requiere una serie de pruebas en un modelo físico simulando precipitación y flujo puntual durante periodos de tiempo elevados, estos resultados demuestran que considerar los mecanismos por los que opera el suelo no saturado (succión, grado de saturación, difusividad, conductividad hidráulica) son necesarios para proporcionar un análisis geoambiental que pueda ser utilizado en suelos no saturados expuestos a contaminantes como el arsénico.

CONCLUSIONES

En este trabajo se ha analizado el papel del Arsénico (As) en el comportamiento geotécnico e hidromecánico del suelo, permitiendo obtener la concentración de As a diferentes profundidades (profundidad de afectación) en distintos tiempos al considerar que se presenta una modificación de la estructura una vez se ha contaminado, y a partir de estos resultados se han extraído las siguientes conclusiones:

Las propiedades geotécnicas se modificaron a medida que el As interactuó con la masa de suelo, en primer lugar, se observó un aumento aparente de tamaño de gravas, a través de los resultados de granulometría; respecto a la morfología, el As modificó demostró la aglomeración de las partículas. En segundo lugar, el pH del suelo sufrió una disminución (0.9% para la concentración de 25 mg/kg y 2.6% para la concentración de 50 mg/kg) al contaminarse con As, debido a que, al momento de ingresar el As en el suelo se incrementó la concentración de iones de hidrógeno y ocurrió un desequilibrio de las fuerzas electrostáticas, promoviendo la reducción del espesor de la doble capa difusa. Tomados en conjunto, los resultados anteriores resultaron en un incremento aparente de gravas y la reducción de finos en el suelo.

En tercer lugar, el cambio en el comportamiento mecánico del suelo mostró dos efectos: la fricción interna presentó un aumento de 229% en 25 mg/kg (aumentando de 13.40° a 30.79°) y 259% (aumentando de 13.40° a 34.73°) en 50 mg/kg en comparación al estado no contaminado, lo cual se asocia a que el suelo se comporta como un material más grueso y por tanto presenta una mayor fricción mientras que la cohesión del suelo contaminado muestra una disminución del 49% respecto al suelo natural, asociado con la reducción del contenido de material arcilloso, debido a la aglomeración (obtenido a través del porcentaje de fases en la mineralogía del suelo).

En cuarto lugar, el As aumentó el valor de la conductividad hidráulica en dos órdenes de magnitud, en escala natural, respecto al estado no contaminado utilizando el método de carga variable, esto indica que el suelo contaminado se

comportó como un suelo granular; con base en los resultados se demuestra que un líquido atraviesa más rápido la masa de suelo en comparación al estado no contaminado, estos resultados se fundamentan con la DTP exponiendo que el diámetro se modifica hacia poros de mayor tamaño. Adicionalmente, al comparar los coeficientes de permeabilidad por los métodos de carga variable y el de consolidación, se encontró que los valores ya no reflejan las modificaciones físicas que sufre el suelo cuando se considera el análisis de consolidación, pudiendo llevar a resultados inadecuados cuando se consideran muestras contaminadas.

Respecto al comportamiento hidromecánico, se concluye que las SWRC del suelo contaminado con As fueron influenciadas por la curva de calibración del papel filtro Whatman No. 42, y los resultados demostraron que considerar un cambio en la ecuación de calibración resulta en valores menores de succión, por lo que, para evitar una mala interpretación del comportamiento del suelo contaminado, es necesario considerar una curva de calibración para el tipo de contaminante utilizado. Se demostró una fuerte disminución de la componente mátrica de la succión del suelo contaminado, la cual se observó a través de la distribución de tamaño de poro y se explicó a través del uso de la ecuación de Laplace. Si bien los resultados de esta investigación cumplen con los objetivos propuestos al inicio, hay líneas de oportunidad que pueden ser investigadas a futuro, tal es el caso de la modificación de la ecuación de Richards que liga la humedad relativa con la succión en soluciones de agua y contaminante.

Adicionalmente, se evaluaron distintos métodos para generar las SWRC y las FCH por el modelo de van Genuchten, demostrando que, aunque se utilice un modelo fractal para estimar las SWRC (Modelo de Fuentes), los resultados no representan el comportamiento del suelo contaminado, resultando en una sobreestimación de la ψ_m para $s_r > 65\%$ en 50 mg/kg, mientras que los valores de la FCH utilizando modelos fractales son mayores que al método de papel de filtro para obtener las SWRC, y requieren análisis adicionales para garantizar que los modelos fractales representan adecuadamente el comportamiento del suelo

contaminado. Además, como recomendación para investigaciones futuras, se sugiere, investigar la influencia de la succión osmótica en el flujo de agua, la cual requiere una validación con otro método diferente a alguno que solo considere la succión mátrica (por ejemplo, el método de van Genuchten).

Finalmente, la evaluación del modelo de analogía térmica por medio del MEF demostró la necesidad de utilizar la SWRC en ambas trayectorias, ya que los modelos disponibles a pesar de ser capaces de explicar el transporte de líquidos en la zona saturada por medio de diversos casos hipotéticos, el transporte de contaminantes se inicia en la zona no saturada, y se encontraba limitado por la falta de información respecto a los cambios en el comportamiento hidromecánico una vez que se contamina el suelo. Las condiciones de lluvias y descarga continua, además permitieron evaluar la zona de afectación, siendo el resultado más llamativo, la forma ovalada de afectación en los perfiles de succión en el suelo, la cual está relacionada directamente a los cambios en el comportamiento hidromecánico del suelo. Estos resultados permiten concluir que, la analogía térmica permite analizar el medio una vez que se obtienen las SWRC y las FCH para el suelo contaminado con As en 25 mg/kg, además de que, el uso de cualquier otro contaminante y concentración requiere su propio análisis.

REFERENCIAS

- Abbasi, M. P., Nasrabadi, T., Wu, W. and Al Dianty, M. 2017. Evaluation of oil pollution dispersion in an unsaturated sandy soil environment. *Pollut.* 3(4):701-711.
- Ahmadi, M., Huvaj, N. and Toker, N. K. 2014. Effects of the Size of Particles on Rainfall-Induced Slope Instability in Granular Soils. In: *Geo-Congress 2014: Geo-characterization and Modeling for Sustainability*. p 4027-4036. ASCE.
- Alshawabkeh, A. N. and Rahbar, N. 2006. Parametric Study of One-Dimensional Solute Transport in Deformable Porous Media. *J. Geotech. Geoenviron.* 132(8):1001-1010.
- Amin, M. G., Pedersen, C., Forslund, A., Veith, T. and Leagdsmand, M. 2016. Influence of soil structure on contaminant leaching from injected slurry. *J. Environ. Manage.* 184(2):289-296
- Anh, B. T. K., Minh, N. N., Ha, N. T. H., Kim, D. D., Kien, N. T., Trung, N. Q., Cuong, T. T. and Danh L. T. 2018. Field Survey and Comparative Study of *Pteris Vittata* and *Pityrogramma Calomelanos* Grown on Arsenic Contaminated Lands with Different Soil pH. *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 100:720-726.
- Ansys Mechanical. 2017. Theory Reference for the Mechanical APDL and Mechanical Applications. Ansys Inc., Canonsburg, Pennsylvania.
- Aoda, M. I. and Younan, T. F. 2010. Calculation of Soil Water Diffusivity Using a Model for Soil Moisture Profile under different Salinity conditions. *J. Eng.* 16(1):4569-4579.
- Armienta, M. A. and Segovia, N. 2008. Arsenic and fluoride in the groundwater of Mexico. *Environ. Geochem. Health.* 30:345–353.
- Bakhat, H. F., Zia, Z., Abbas, S., Hammad, H. M., Shah, G. M., Khalid, S., Shahid, N., Sajjad, M. and Fahad, S. 2019. Factors controlling arsenic contamination and

potential remediation measures in soil-plant systems. *Groundw. Sustain. Dev.* 9:100263.

Barrera, M. and Garnica, P. 2002. *Introducción a la mecánica de suelos no saturados en vías terrestres*. Publicación técnica.

Barsotti, E., Tan, S., Saraji, S., Piri, M. and Chen, J. 2016. A review on capillary condensation in nanoporous media: Implications for hydrocarbon recovery from tight reservoirs. *Fuel*. 184:344-361.

Bell, F. G. 2005. *ENGINEERING GEOLOGY | Problematic Soils*. En: *Engineering Geology (1st ED.)*. Elsevier, Amsterdam.

Biel-Maeso, M., González, C., Lara, P. and Corada, C. 2019. Sorption and degradation of contaminants of emerging concern in soils under aerobic and anaerobic conditions. *Sci. Total Environ.* 666:662-671.

Brusseau, M., Pepper, I. and Gerba, C. 2019. *Environmental and Pollution Science*. (3rd Ed.). Sci. (In press).

Cabello, L. Y., Pérez-Rea, M. L., Galaviz-González, R., Rojas, E. and Hernández-Mendoza, C. E. 2017. Impact of diesel contamination on the compressibility of a clayey soil. In: *Proceedings of the 2017 XIII International Engineering Congress (CONIIN)*. Santiago de Querétaro.

Cabello, L. Y., 2015. *Análisis comparativo de curvas de retención de suelos contaminados con gasolina y diesel*. U.A.Q.

Cao, L. F., Teh, C. I. and Chang, M. F. 2001. Undrained cavity expansion in modified Cam clay I: Theoretical analysis. *Geotechnique*.51(4):323-334.

Carbonell-Barrachina, A. A., Jugsujinda, A., Burlo, F., Delaune, R. D. and Patrick Jr, W. H. 2000. Arsenic chemistry in municipal sewage sludge as affected by redox potential and pH. *Wat. Red.*, 34(1):216-224.

- Castañeda, L. F., Coreño, O. and Nava, J. L. 2019. Arsenic and hydrated silica removal from groundwater by electrocoagulation using an up-flow reactor in a serpentine array. *J. Environ. Chem. Eng.* 7(5):103353.
- Cebrian, M. E., Coreño, O. and Nava, J. L. 1983. Chronic Arsenic Poisoning in the North of Mexico. *Hum. Toxicol.* 2(1):121-133.
- Chen, H., Li, L., Li, J. and Sun, D. 2021. A rigorous elastoplastic load-transfer model for axially loaded pile installed in saturated modified Cam-clay soils. *Acta Geotech.* 17(2):635-651.
- Chen, H., Li, L., Li, J. and Sun, D. 2021. A rigorous elastoplastic load-transfer model for axially loaded pile installed in saturated modified Cam-clay soils. *Acta Geotech.* 17(2):635-651.
- Chen, P., Zhang, H., Yang, G., Guo, Z. and Yang, G. 2022. Thermo-Hydro-Mechanical Coupling Model of Unsaturated Soil Based on Modified VG Model and Numerical Analysis. *Front. Earth Sci.*10:947335.
- Chu, Y., Wang, F., Cai, G. and Bian, H. 2017. Estimation of heavy metal-contaminated soils' mechanical characteristics using electrical resistivity. *RCH Environ. Sci. Pollut. Res.*24(15) :13561-13575.
- Chu, Y., Liu, S., Bian, H. and Cai, G. 2018. Electric conductance response on engineering properties of heavy metal polluted soils. *J. Environ. Chem. Eng.* 6(4) :5552-5560.
- Ciesla, J., Sokolowska, Z., Witkowska, B. and Skic, K. 2018. Adsorption of water vapour and the specific surface area of arctic zone soils (Spitsbergen). *Int. Agrophys.* 32:19-27.

Ciriello, V. and de Barros, F. P. J. 2020. Characterizing the Influence of Multiple Uncertainties on Predictions of Contaminant Discharge in Groundwater Within a Lagrangian Stochastic Formulation. *Water Resour. Res.*56(10).

Climate. 2022. Climate Data.Org., Santiago de Querétaro.

Condon, J. B., 2006. *Surface Area and Porosity Determinations by Physisorption Measurements and Theory | An Overview of Physisorption*. Elsevier, Tennessee.

Crawford, J. W., Pachepsky, Y. A. and Rawls, W. J. 2000. Integrating processes in soils using fractal models. *Dev. Soil Sci.* 27:1-5.

Da Silva , E. C., Martins, G. C., de Oliveria Wadt, L. H., da Silva, K. E., Bezerra de Lima, R. M., Dias Batista, K., Carneiro, M., de Oliveira Junior, R. C., Rodrigues Reis, A., Lopes, G., Duarte de Menezes, M., Broadley, M. R., Young, S. D. and Guimaraes L. R. 2019. Natural variation of arsenic fractions in soils of the Brazilian Amazon. *Sci. Total Environ.* 687:1219-1231.

De Gisi, S., Lofrano, G., Grassi, M. and Notarnicola, M. 2016. Characteristics and adsorption capacities of low-cost sorbents for wastewater treatment: A review. *Sustain. Mater. Techno.* 9:10-40.

Espejo, A. Giráldez, J. V., Vanderlinden, K., Taguas, E. V. and Pedrera, A. 2014. A method for estimating soil water diffusivity from moisture profiles and its application across an experimental catchment. *J. Hydrol.* 516: 161-168.

Farouk, A., Lamboj, L. and Kos, J. 2004. A Numerical Model to Predict Matric Suction Inside Unsaturated Soils. *Acta Polytech.* 44(4):3-10.

Feng, J. and Zhang, G. 2021. Study on Soil Water and Suction Stress Characteristics for Unsaturated Clay Soil of Airport Engineering Based on Laboratory tests. *Geofluids.* 2021.

Fityus, S. G., Smith, D. W. and Booker, J. R. 1999. Contaminant transport through an unsaturated soil liner beneath a landfill. *Can. Geotech. J.*36(2).330-354.

Francisca, F. M., Carro, M. E., Glatstein, D. A. and Montoro, M. A. 2012. *Horizons in Earth Science Research | Contaminant transport and fluid flow in soils*. Nova Science Publishers, New York.

Fredlund, D. G. and Rahardjo, H. 1993. *Soil mechanics for unsaturated soils*. John Wiley and Sons.

Fredlund, D. G., Xing, A. and Huang, S. 1994. Predicting the permeability function for unsaturated soils using' the soil-water characteristic curve. *Can. Geotech. J.*31(4):533-546.

Fuentes, C., Chávez, C. and Brambila, F. 2020. Relating Hydraulic Conductivity Curve to Soil-Water Retention Curve Using a Fractal Model. *Math.*8(12):2201.

Gaxiola, S. 2017. Efecto en las propiedades geotecnicas de una arcilla expansiva contaminada con vinazas tequileras y aguas residuales municipales. Universidad Autónoma de Querétaro., Santiago de Querétaro.

Gibson, R. E., Schiffman, R. L. and Cargill, K. W. 1981. The theory of one-dimensional consolidation of saturated clays. II. Finite nonlinear consolidation of thick homogeneous layers. *Can. Geotech. J.* 18(2):280-293.

González, R., Marín, L. E. and Córdova, G. 1997. Hydrogeology and groundwater pollution of Yaqui Valley, Sonora, Mexico. *Geofis. Int.*36(1):49-54.

Graham, J., Tanaka, N., Crilly, T. and Alfaro, M. 2001. Modified Cam-Clay modelling of temperature effects in clays. *Can. Geotech. J.* 38(3):608-621.

GWRTAC. 1997. *Remediation of Metals-Contaminated Soils and Groundwater*. Department of Civil and Environmental Engineering. Pittsburg.

- Han, Y., Park, J., Kim, S. and Jeong, H. Y. 2019. Redox transformation of soil minerals and arsenic in arsenic-contaminated soil under cycling redox conditions. *J. Hazard. Mater.* 378:120745.
- Hernández, G., Segura, M. A., Álvarez, L. C., Aldaco, R. A., Fortis, M. and González, G. 2013. Comportamiento del arsénico en suelos de la región lagunera de Coahuila, México. *Terr. Latinoam.* 31(4):295-303.
- Huang, G., Sun, J. and Zhang, Y. 2011. Distribution of arsenic in sewage irrigation area of Pearl River Delta, China. *J. Earth Sci.* 22:396-410.
- Huffer, T., Metzelder, F., Sigmund, G., Slawek, S., Schmidt, T. C. and Hofmann, T. 2019. Polyethylene microplastics influence the transport of organic contaminants in soil. *Sci. Total Environ.* 657:242-247.
- Ikeagwuani, C. C. and Nwonu, D. 2019. Emerging trends in expansive soil stabilisation: A review. *J. Rock Mech. Geotech. Eng.* 11(2):423-440.
- Jahangir, E., Deck, O. and Masrouri, F. 2013. An analytical model of soil–structure interaction with swelling soils during droughts. *Comput Geotech.* 54:16-32.
- Jáuregui-Medina, C., Ramírez-Hernández, S., Espinosa-Rodríguez, M. A, Tovar-Rodarte, R., Quintero-Hernández, B. and Rodríguez-Castañeda, I. 2007. Impacto de la descarga de aguas residuales en la calidad del río Molola (Nayarit, México) y propuestas de solución. *Rev. Latinoam. Recur. Nat.* 3(1):65-73.
- Jeong, S., Kyung, J., Jho, E. and Nam, K. 2019. Interaction among soil physicochemical properties, bacterial community structure, and arsenic contamination: Clay-induced change in long-term arsenic contaminated soils. *J. Hazard. Mater.* 378: 120729.
- Jiménez-Córdova, M. I., Sánchez-Peña, L. C., Barrera-Hernández, A., González-Horta, C., Barbier, O. C. and Del Razo, L. 2019. Fluoride exposure is associated with

altered metabolism of arsenic in an adult Mexican population. *Sci. Total Environ.* 684: 621-628.

Joshi, A., Patel, S., Hiwale, V. and Khairnar, C. 2019. Effect of Zinc Contamination on Engineering Properties of Clayey Soils. In: *Lecture Notes in Civil Engineering*. p 85-92. Springer, Singapore.

Juárez, E. y Rico, A. 2005. *Mecánica de suelos*. Tomo I. (3rd Ed.). Limusa., México.

Karkush, M. and Ali, S. D. 2020. Impacts of Lead Nitrate contamination on the geotechnical properties of clayey soil. *J. Eng. Sci. Technol.* 15(2):1032-1045.

Kaya, A. and Fang, H. 2000. The effects of organic fluids on physicochemical parameters of fine-grained soils. *Can. Geotech. J.* 34(5):943-950.

Khan, M. N., Mobin, M. and Abbas, Z. K. 2018. Fertilizers and Their Contaminants in Soils, Surface and Groundwater. *Encyclopedia of the Anthropocene*. 5:225-240.

Klute, A. and Dirksen, C. 1986. Hydraulic Conductivity and Diffusivity: Laboratory Methods. In: A. Klute, (Ed.). *Methods of Soil Analysis: Part 1 Physical and Mineralogical Methods*. p 687-734. American Society of Agronomy., Michigan.

Lemaire, G. G., McKnight, U. S., Schulz, H., Roost, S. and Bjerg, P. L. 2020. Evidence of Spatio-Temporal Variations in Contaminant Discharge to a Peri-Urban Stream. *Ground Water Monit. Remediat.* 40(2):40-51.

Lemon, E. R. 1956. The Potentialities for Decreasing Soil Moisture Evaporation Loss. *Soil Sci Soc Am J.* 20(1):120-125.

Li, J. 2006. Two Dimensional Simulation of a Stiffened Slab on Expansive Soil subject to a Leaking Underground Water Pipe. In: *Unsaturated Soils 2006*. p 2098-2109. ASCE., Carefree, Arizona.

Li, J., Xue, Q., Wang, P. and Li, Z. 2015. Effect of lead (II) on the mechanical behavior and microstructure development of a Chinese clay. *Appl. Clay Sci.* 105-106:192-199.

Li, Z., Zhou, Z., Dai, Y. and Dai, B. 2019. Contaminant transport in a largely-deformed aquitard affected by delayed drainage. *J. Contam. Hydrol.* 221:118-126.

Liu, P. S. and Chen, G. F. 2014. Characterizations Methods: Basic Factors. In: *Porous Materials Processing and Applications*. p 411-492. Elsevier.

López-Guzmán, M., Alarcón-Herrera, M. T., Irigoyen-Campuzano, J. R., Torres-Castañón, L. A. and Reynoso-Cuevas, L. 2019. Simultaneous removal of fluoride and arsenic from well water by electrocoagulation. *Sci. Total Environ.* 678:181-187.

López-Lara, T. 2002. Estudio Fisicoquímico de la modificación de suelos arcillosos. Universidad Autónoma de Querétaro. Santiago de Querétaro.

López Ramírez, M. A., Aburto, Y. A., Ocaña, K. E., Olaya, C. O., Lango, F. and López, M. 2022. Caracterización fisicoquímica y biológica de los lixiviados procedentes del sitio de disposición final no controlado en Tlapacoyan, Veracruz, México. *Enfoque UTE*, 13(3):1-13.

Lu, N. and Likos, W. J. 2006. Suction Stress Characteristic Curve for Unsaturated Soil. *J. Geotech. Geoenviron. Eng.* 132(2):131-142.

Markiewicz-Patkowska, J., Hursthouse, A. and Przybyla-Kij, H. 2005. The interaction of heavy metals with urban soils: sorption behaviour of Cd, Cu, Cr, Pb and Zn with a typical mixed brownfield deposit. *Environ. Int.* 31(4): 513-521.

Masscheleyn, P. H., Delaune, R. D. and Patrick Jr, W. H. 1991. Effect of redox potential and pH on arsenic speciation and solubility in a contaminated soil. *Environ. Sci. Technol.* 25(8):1414-1419.

McBride, M. B. 1989. Reactions Controlling Heavy Metal Solubility in Soils. In: *Advances in Soil Science*. pp. 1-56. Springer., New York.

Moghal, A., Ashfaq, M., Shamrani, A. and Mahbashi, A. 2020. Effect of Heavy Metal Contamination on the Compressibility and Strength Characteristics of Chemically Modified Semiarid Soils. J. Hazard. 24(4):04020029.

Mohamed, A. and Paleologos, E. 2017. Fundamentals of geoenvironmental engineering: understanding soil, water, and pollutant interaction and transport. Butterworth-Heinemann.

Moran, J. 2016. Perspectiva epidemiológica, ambiental y de salud. (1st Ed.). Distribuciones Fontamara.

Negahdar, A. and Nikghalpour, M. 2020. Geotechnical properties of sandy clayey soil contaminated with lead and zinc. SN Appl. Sci. 2:1331-1343.

Nayak, S., Sunil, B. M. and Shrihari, S. 2007. Hydraulic and compaction characteristics of leachate-contaminated lateritic soil. Eng. Geol. 94(3-4): 137-144.

Nelson, J. D., Overton, D. D. and Durkee, D. B. 2001. Depth of wetting and the active zone. In: Expansive clay soils and vegetative influence on shallow foundations. p 95-109. ACE Library., Houston, Texas.

NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004. Que establece criterios para determinar las concentraciones de remediación de suelos contaminados por arsénico, bario, berilio, cadmio, cromo hexavalente, mercurio, níquel, plata, plomo, selenio, talio y/o vanadio. Disponible en: <https://www.gob.mx/profepa/documentos/norma-oficial-mexicana-nom-147-semarnat-ssa1-2004>.

NOM-021-SEMARNAT-2000. Que establece las especificaciones de fertilidad, salinidad y clasificación de suelos. Estudios, muestro y análisis. Disponible en: <https://biblioteca.semarnat.gob.mx/janium/Documentos/Ciga/libros2009/DO2280n.pdf>.

NOM-127-SSA1-2021. Agua para uso y consumo humano. Límites permisibles de la calidad del agua. Disponible en:

https://dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5650705&fecha=02/05/2022#gsc.tab=0.

Oburger, E., Vergara, C., Schwertberger, D., Roschitz, C. and Wenzel, W. W. 2020. Response of tungsten (W) solubility and chemical fractionation to changes in soil pH and soil aging. *Sci. Total Environ.* 731:139224.

Oh, S., Kim, Y. K. and Kim, J. W. 2015. A Modified van Genuchten-Mualem Model of Hydraulic Conductivity in Korean Residual Soils. *Water.* 7:5487-5508.

Paul, T. and Saha, C. M. 2019. Environmental Arsenic and Selenium Contamination and Approaches Towards Its Bioremediation Through the Exploration of Microbial Adaptations: A Review. *Pedosphere.* 29:554-568.

Pérez, M., Ayala, T., Galaviz, J. y Rojas, E. 2012. El cambio volumétrico en la predicción de asentamientos, análisis y diseño de cimentaciones. *XXVI RNMSelG.* 14-16: 277-283.

Puppala, A. J., Manosuthikij, T. and Chittoori, C. S. 2013. Swell and shrinkage characterizations of unsaturated expansive clays from Texas. *Eng. Geol.* 164:187-194.

Rahardjo, H., Kim, Y. and Satyanaga, A. 2019. Role of unsaturated soil mechanics in geotechnical engineering. *Int. J. Geo. Engin.* 10(8):1-23.

Raju, N. J. 2022. Arsenic in the geo-environment: A review of sources, geochemical processes, toxicity and removal technologies. *Environ. Res.* 203:111782.

Rangel, E. A., Montañez, L. E., Luévanos, M. P. and Balagurusamy, N. 2015. Impacto del arsénico en el ambiente y su transformación por microorganismos. *Terr. Latinoam.* 33(2):103-118.

Razo, I., Carrizales, L., Castro, J., Díaz-Barriga, F. and Monroy, M. 2004. Arsenic and Heavy Metal Pollution of Soil, Water and Sediments in a Semi-Arid Climate Mining Area in Mexico. *Water Air Soil Pollut.*152:129-152.

Rieu, M. and Perrier, E. 1998. Fractal Models of Fragmented and Aggregated Soils. In: *Fractals in Soil Science*. (1st Ed.). p 169-202. Taylor & Francis., Boca Raton, Florida.

RLGPGIR. 2006. Reglamento De La Ley General Para La Prevención Y Gestión Integral De Los Residuos. Diario Oficial de la Federación.

Rosales, M., Coreño, O. and Nava, J. L. 2018. Removal of hydrated silica, fluoride and arsenic from groundwater by electrocoagulation using a continuous reactor. *Chemosphere*. 211:149-155.

Sämann, R., Graf, T. and Neuweiler, I. 2019. Modeling of contaminant transport during an urban pluvial flood event – The importance of surface flow. *J. Hydrol.* 301-310:568.

Sandoval, M. A., Fuentes, R., Nava, J. L., Coreño, O., Li, Y. and Hernández, J. 2019. Simultaneous removal of fluoride and arsenic from groundwater by electrocoagulation using a filter-press flow reactor with a three-cell stack. *Sep. Purif. Technol.* 208: 208-216.

Sarkar, A. and Paul, B. 2016. The global menace of arsenic and its conventional remediation - A critical review. *Chemosphere*. 158: 37-49.

Sdiri, A. and Higashi, T. 2013. Simultaneous removal of heavy metals from aqueous solution by natural limestones. *Appl. Water Sci.* 3(1): 29-39.

Seguel, O. and Orellana, I. 2008. Relación entre las propiedades mecánicas de suelos y los procesos de génesis e intensidad de uso. *Agro Sur*.36(2):82-92.

- Seyedpour, S. M., Kirmizakis, P., Brennan, P., Doherty, R. and Ricken, T. 2019. Optimal remediation design and simulation of groundwater flow coupled to contaminant transport using genetic algorithm and radial point collocation method (RPCM). *Sci. Total Environ.* 669:389-399.
- Smedley, P. L. and Kinniburgh, D. G. 2002. A review of the source, behaviour and distribution of arsenic in natural waters. *Appl. Geochem.* 17:517-568.
- Song, Y. S. 2014. Suction stress in unsaturated sand at different relative densities. *Eng. Geol.* 176:1-10.
- Sposito, G. 2008. *The chemistry of soils.* Oxford University Press.
- Su, C., Meng, J., Zhou, Y., Bi, R., Chen, Z., Diao, J., Huang, Z., Kan, Z. and Wang, T. 2022. Heavy Metals in Soils From Intense Industrial Areas in South China: Spatial Distribution, Source Apportionment, and Risk Assessment. *Front. Environ. Sci.* 10:820536.
- Sunil, B., Shrihari, S. and Nayak, S. 2009. Shear strength characteristics and chemical characteristics of leachate-contaminated lateritic soil. *Eng. Geol.* 106:20-25.
- Supreeth, M. and Raju, N. S. 2017. Biotransformation of chlorpyrifos and endosulfan by bacteria and fungi. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 101:5961-5971.
- Taban, A., Mirmohammad, M. and Rowshanzamir, M. A. 2018. Estimation of van Genuchten SWCC model for unsaturated sands by means of the genetic programming. *Int. J. Sci. Technol.* 25(4):2026-2038.
- Tavares, D. S., Lopes, C. B. and Coelho, J. P. 2012. Removal of Arsenic from Aqueous Solutions by Sorption onto Sewage Sludge-Based Sorbent. *Water Air Soil Pollut.* 223: 2311-2321.

Thommes, M., Kaneko, K., Neimark, A. V., Olivier, J. P., Rodriguez-Reinoso, F., Rouquerol, J. and Sing, K. S. W. 2015. Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report). *Pure Appl. Chem.* 87(9-10):1051-1069.

Twaddle, N. C., Vanlandingham, M., Beland, F. A. and Doerge, D. R. 2019. Metabolism and disposition of arsenic species from controlled dosing with dimethylarsinic acid (DMAV) in adult female CD-1 mice. V. Toxicokinetic studies following oral and intravenous administration. *Food Chem. Toxicol.* 130:22-31.

Van Genuchten, M. T. 1980. A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44(5):892-898.

Van Genuchten, M. T., Leiji, F., Yates, S. and Williams, J. 1991. The RETC Code for Quantifying the Hydraulic Functions of Unsaturated Soils. U.S. Department of Agriculture., Riverside, California.

Vásquez-Nogal, I. and Hernández-Mendoza, C. E. 2022. Evaluation of the Soil-Water Retention Curve of Arsenic-Contaminated Soil by the Filter Paper Method. *Appl. Sci.* 12(5): 2610.

Vásquez-Nogal, I., Hernández-Mendoza, C. E., Cárdenas, A. I. and Rojas, E. 2022. Estimating the Soil-Water Retention Curve of Arsenic-Contaminated Soil by Fitting Fuentes' Model and Their Comparison with the Filter Paper Method. *Appl. Sci.* 12(15): 7793.

Volke, T., Velasco, A. y De la Rosa, A. 2005. Suelos contaminados por metales y metaloides: muestreo y alternativas para su remediación. (1st Ed.). Instituto Nacional de Ecología (INE-Semarnat)., Ciudad de México.

White, P. J. and Brown, P. H., 2010. Plant nutrition for sustainable development and global health. *Ann. Bot.* 105: 1073-1080.

Wolfrom, R. 2012. Specifics on surface area. *GXP Compliance*, 16(2): 22.

- Xiangzeng , W. 2017. Lacustrine Shale Gas Reservoir in the Ordos Basin. In: Lacustrine Shale Gas Case Study from the Ordos Basi. p 93-178.Elsevier.
- Xu, T., Nan, F., Jiang, X., Tang, Y., Zeng, Y., Zhang, W. and Shi, B. 2020. Effect of soil pH on the transport, fractionation, and oxidation of chromium(III). *Ecotox. Environ. Safe.* 195: 110459.
- Yue, E., Bulut, R., Yue, E., and Bulut, R. 2014. Equilibrium Matric Suctions in Subgrade Soils in Oklahoma Based on Thornthwaite Moisture Index (TMI). In: R. Bulut & S. Hsu, edits. *Advances in Transportation Geotechnics and Materials for Sustainable.* p 17-24. ASCE.,Yichang,Hubei.
- Zavala, M., Saucedo, H. and Fuentes, C. 2018. Modelos análiticos fractales para las propiedades hidráulicas de suelos no saturados. *Agrociencia.* 52(8):1059-1070.
- Zepeda, J. A., Pérez, M. and Cortez, J. 1992. Expansive soil properties in the Queretaro Valley. *Intl. Conf. Expansive Soils.*1:45-50.
- Zhang, H. J., Jeng, D. S., Barry, D. A., Seymour, B. R. and Li. L. 2013. Solute transport in nearly saturated porous media under landfill clay liners:A finite deformation approach. *J. Hydrol.* 479: 189-199.
- Zhang, H. J., Jeng, D. S., Seymour, B. R., Barry, D. A. And Li, L. 2012. Solute transport in partially-saturated deformable porous media: Application to a landfill clay liner. *Adv. Water Resour.* 40:1-10.
- Zhang, X. 2004. Consolidation theories for saturated-unsaturated soils and numerical simulation of residential buildings on expansive soils. A&M University., Texas.
- Zotarelli, L., Dukes, M. D., Romero, C. C., Migliaccio, K. W. and Morgan, K. T. 2010. Step by Step Calculation of the Penman-Monteith Evapotranspiration (FAO-56 Method). *Inst. Food and Agric. Sci.* 8.

ABREVIATURAS Y SIGLAS

SWRCAs	Curvas de Retención Suelo-Agua-Contaminante
SWRC	Curva de Retención Agua-Suelo
ψ_t	Succión total
ψ_m	Succión matricial
ψ_o	Succión osmótica
ψ_d	Inversa del valor de entrada de aire
θ_r	Contenido volumétrico de agua
θ_s	Contenido volumétrico saturado de agua
m, n y α	Parámetros de ajuste de la curva de retención
k_r	Conductividad hidráulica en función de la succión
k_s	Coefficiente de permeabilidad saturado
k_{sc}	Coefficiente de permeabilidad saturado calculado
s	Dimensión relativa
D_g	Diámetro geométrico
D	Diámetro de la curva granulométrica
i	Número de intervalos que divide la SWRC
T_s	Tensión superficial
ρ_w	Densidad del agua
μ_w	Viscosidad absoluta del agua

As (III)	Arsenito
As (V)	Arseniato
H ₃ As	Arsina
As (0)	Arsénico elemental
Fe	Hierro
S	Sulfuro
nm	Nanómetro
μM	Micra
DTP	Distribución de tamaño de poro
N ₂	Nitrógeno
IUPAC	Unión Internacional de Química Pura y Aplicada
BET	Método de Brunauer-Emmet-Teller
BJH	Método de Barrett-Joyner-Halenda
<i>R</i>	Constante de los gases ideales
<i>V_m</i>	Volumen molar del adsorbato líquido
<i>T</i>	Temperatura de ebullición del líquido
<i>p</i>	Presión de equilibrio del gas en sorción y desorción
<i>p₀</i>	Presión de vapor del líquido adsorbato
<i>r_k</i>	Radio de poro con condensación del adsorbato
atm	Atmósfera

CO ₂	Dióxido de carbono
NLDFT	Teoría de densidad funcional no local
1D	Uni-dimensional
h_e	Exceso de carga hidráulica
h_s	Carga hidráulica en estado estable
h	Carga hidráulica total
c_v	Coefficiente de consolidación
t	Tiempo
J	Vector de flujo de masas
D^*	Coefficiente de difusión
n	Porosidad
m_v	Coefficiente de cambio de volumen
γ_w	Peso específico del fluido
c_0	Concentración inicial
T	Factor tiempo
P^*	Número de Peclét
P_c	Número de consolidación advectiva
L	Espesor de la capa de arcilla
H_s	Carga estable normalizada
H_e	Exceso de carga

v_s	Velocidad del sólido
ρ_s	Densidad de sólidos
ρ_f	Densidad del fluido
K_{w0}	Módulo volumétrico del agua de poro
r_h	Fracción volumétrica de aire
P_a	Presión de aire del manómetro
σ	Esfuerzo normal del suelo
α_v	Coefficiente de compresibilidad del suelo
DOV	Compuestos orgánicos volátiles
$f'_{a \rightarrow s}$	Rasa de pérdida de soluto en la fase líquida
c_f	Concentración de soluto en el poro
J_f	Flujo de soluto en la fase líquida
D_m	Coefficiente de dispersión mecánica
D	Coefficiente de dispersión hidrodinámica
α_L	Coefficiente de dispersión
v_f	Velocidad de fluido en el poro
K_d	Coefficiente de partición
α_v	Coefficiente de compresibilidad
G_s	Gravedad específica de las partículas de suelo
u_{hs}	Presión hidrostática de agua de poro

u_h	Salida a largo plazo en la presión del poro
p	Exceso de presión de agua
k_v	Coefficiente de permeabilidad vertical de la arcilla
e	Relación de vacíos
σ'_0	Esfuerzo efectivo inicial
D_{mo}	Difusividad limitante
ε	Deformación
E	Módulo de Young
M	Relación de Poisson
C_w	Capacidad específica de agua
C_T	Capacidad específica de calor
h_i	Índice de calor mensual
t_i	Temperatura promedio mensual
H_y	Índice de calor anual
PE	Potencial de evapotranspiración
d_i	Factor de corrección para la longitud diaria
ET	Tasa de evapotranspiración
u_2	Velocidad del viento
R_n	Radiación neta en la superficie del cultivo
G	Densidad de flujo de calor del suelo

q	Tasa de generación de calor
h_f	Coeficiente de transferencia de calor
T_B	Temperatura interna del fluido adyacente
σ'_s	Esfuerzo de succión
p'_c	Carga de preconsolidación
η_0	Relación de esfuerzo inicial
p'_{c0}	Máximo esfuerzo de preconsolidación
p'_0	Esfuerzo promedio <i>in-situ</i>
MEF	Método de elemento finito
PCA	Pozo a cielo abierto
CIC	Capacidad de intercambio catiónico
γ_m	Peso específico de la masa del suelo
h_1	Carga hidráulica en cm al inicio de la medición
h_2	Carga hidráulica en cm al término de la prueba
HR	Humedad relativa
NaCl	Sal
XRD	Difracción de rayos X
λ	Longitud de onda de los rayos X
MEB	Microscopio Electrónico de Barrido
EMA	Estación meteorológica automática

LL	Límite líquido
IP	Índice de plasticidad
MH	Limo de alta compresibilidad
CH	Arcilla de alta compresibilidad
LP	Límite plástico
DDL	Doble capa difusa
FCH	Función de conductividad hidráulica