



Universidad Autónoma de Querétaro

Facultad de Química

Maestría en Ciencia y Tecnología Ambiental

MODELACIÓN DE LA TRANSFERENCIA DE AGUA Y TRANSPORTE DE  
CROMO (Cr) EN SUELO.

**Tesis**

Que como parte de los requisitos para obtener el grado de Maestro en Ciencia y  
Tecnología Ambiental

**Presenta**

I.BQ. Samantha de Jesús Rivero Montejo

**Dirigido por**

Dr. Carlos Alberto Chávez García

Querétaro, Qro.  
Diciembre, 2017



Universidad Autónoma de Querétaro  
Facultad de Química  
Maestría en Ciencia y Tecnología Ambiental

**Modelación de la transferencia de agua y el transporte de cromo (Cr) en suelo.**

Opción de titulación

**Tesis**

Que como parte de los requisitos para obtener el Grado de  
Maestro en Ciencia y Tecnología Ambiental

Presenta:

**I.BQ. Samantha de Jesús Rivero Montejo**

Dirigido por:

**Dr. Carlos Alberto Chávez García**

Dr. Carlos Alberto Chávez García

Director

  
Firma

M. en C. Beatriz del Rocío Verduzco Cuellar

Secretario

  
Firma

Dr. Miguel Ángel Rico Rodríguez

Vocal

  
Firma

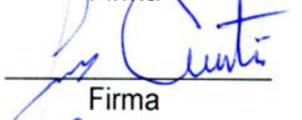
Dr. Juan Ramiro Pacheco Aguilar

Suplente

  
Firma

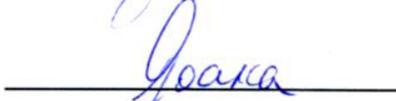
M. en C. Jorge Antonio López Ortiz

Suplente

  
Firma



M.S.P Sergio Pacheco Hernández  
Director de la Facultad



Dra. Ma. Guadalupe Flavia Loarca-Piña  
Director de Investigación y Posgrado

Centro Universitario  
Querétaro, Qro.  
Diciembre, 2017

## RESUMEN

El desarrollo y la aplicación de modelos matemáticos, para la predicción y simulación de la transferencia de agua y el transporte de contaminantes, representan una herramienta que permite prever tiempo y esfuerzo para predecir el comportamiento de un contaminante, como el cromo, a partir de ecuaciones que describan los fenómenos de advección y dispersión de los metales pesados en suelo. El objetivo del presente trabajo fue describir y analizar la transferencia de agua y el transporte de cromo hexavalente, Cr (VI), en un suelo franco-arenoso, mediante la ecuación de Richards para describir la transferencia de agua, y la ecuación advección-dispersión para el transporte de cromo (VI) obteniendo gradientes de concentración en el suelo, así como el coeficiente de dispersión ( $\lambda$ ). Los parámetros  $\psi_d$  y  $K_s$  se obtuvieron a partir de la prueba de infiltración y la dimensión fractal ( $s$ ), en función de la porosidad ( $\Phi$ ) del suelo, y los parámetros de forma  $m$  y  $n$  se obtuvieron de la prueba granulométrica. Para el presente estudio se empleó un suelo franco-areno al cual se le determinaron las características fisicoquímicas e hidráulicas. Los lixiviados recolectados se analizaron por una adaptación del método difenilcarbohidróxido y los segmentos de suelo obtenidos de la prueba de infiltración se analizaron por ICP-Masas, introduciendo los datos reportados en este trabajo para su simulación utilizando la ecuación de advección-dispersión con las condiciones de hipótesis establecidas. Se obtuvieron coeficientes de dispersión entre 0.0038-0.0006 para cada columna empleando el modelo de la media geométrica, ya que este modelo fue óptimo en las reproducciones de los datos experimentales del suelo con una concentración de Cr inicial presente en el suelo de  $36.1 \text{ mg kg}^{-1}$ . La modelación del transporte de Cr permitió conocer que en condiciones de cargas constantes del contaminante se desplaza a niveles inferiores.

**(Palabras claves:** contaminación suelo, ecuación de Richards, advección-dispersión, simulación, características fisicoquímicas, características hidráulicas)

## ABSTRACT

The development and application of mathematical models, for predictions and simulations of water transfer and contaminants transport, represent a tool that allows to anticipate time and effort in designing process systems to be able to predict the behavior of a contaminant, such as chromium, by using equations that describe the advection and dispersion phenomena of the heavy metals in soil. The objective of the present work is to describe and analyze water transfer and the transport of hexavalent chromium, Cr (VI), in loamy sand soil, through the Richards equation to explain the water transfer, and the advection-dispersion equation for the transport of chromium (VI) obtaining gradients of concentration in soil as well as the dispersion coefficient ( $\lambda$ ). The parameters  $\psi_d$  and  $K_s$ , were obtained through infiltration test and de fractal dimension ( $s$ ), as a function of porosity ( $\Phi$ ) of the soil, and the shape parameters were obtained of the granulometric test. For the present study, a loamy sand soil were used, to which the physicochemistry and hydraulic characteristics were determined. The leachates recollected were analyzed through an adaption of the diphenilcarbohidoxy method and the soil segments obtained at the infiltration test were analyzed with ICP-Mass, introducing the reported data in this work for the simulation using the advection-dispersion equation with the hypothesis conditions established. Dispersion coefficients between 0.0038-0.0006 were obtained for each column using the geometric mean model, since this model was optimal in the reproductions of the experimental data of the soil with a concentration of Cr present in the soil of  $36.1 \text{ mg kg}^{-1}$ . The modeling of the transport of Cr allowed to know that in conditions of constant loads of the pollutant it moves to lower levels.

**(Key words:** soil contamination, Richards's equation, advection-dispersion, simulation, physicochemistry characteristics, hydraulic characteristics

## DEDICATORIA

A mis padres Olga Lidia y Gerardo de Jesús por su apoyo incondicional dándome ánimos y brindándome sus sabios consejos

A Dios

A mí querida sobrina Celeste que nunca deja de maravillarme y mi hermano Luis Gerardo por ser parte de mi vida.

A la M.C. Beatriz del Rocío Verduzco Cuellar, una persona con la que siempre se puede contar.

A Oscar de los Ángeles Rocha por estar a mi lado brindándome su fuerza y apoyo

A todas esas personas que formaron parte de este proyecto.

Y por supuesto recordar un fragmento el poema de Mario Benedetti “No te rindas” que tan gustosamente mis padres siempre me hicieron recordar

*No te rindas que la vida es eso,  
continuar el viaje,  
perseguir tus sueños,  
destrabar el tiempo,  
correr los escombros y destapar el cielo.*

Mario Benedetti

Gracias.

## **AGRADECIMIENTOS**

A todo el personal docente y administrativo Universidad Autónoma de Querétaro por su apoyo y colaboración en la culminación de esta tesis.

Agradezco a mi director de tesis, al comité de tesis y a todos los investigadores que han aportado y enriquecido este trabajo de investigación.

A la Universidad Nacional Autónoma Nacional, Campus Juriquilla, Facultad de Geociencias por su disposición y colaboración al análisis de las muestras de suelo para la determinación de Cr.

A todos mis compañeros de la Maestría en Ciencia y Tecnología Ambiental por su apoyo durante toda la duración de este programa, pero sobre todo a Isaac Aguilar Clemente, Alejandra Contreras Gutiérrez, Lourdes Romero y Carolina Espinoza por su apoyo brindado durante la experimentación de este proyecto.

A la coordinación de Campus Aeropuerto, en especial a la M.C. Beatriz Verduzco Cuéllar, la M.C. Yadira Ortega Silva y a Miguel Ángel Almaguer Linares por el apoyo brindado tanto personal como material, así como su conocimiento y disposición de recursos para llevar a término este proyecto

Al M.C. Juan Carlos Mota Escamilla por su apoyo en la programación de los modelos empleados en este proyecto.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT), por el apoyo brindado durante el desarrollo de la maestría y por impulsar la ciencia y la tecnología.

# ÍNDICE

<b>CONTENIDO</b>	<b>PÁGINA</b>
<b>RESUMEN</b> .....	<b>i</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>ii</b>
<b>DEDICATORIA</b> .....	<b>iii</b>
<b>AGRADECIMIENTOS</b> .....	<b>iv</b>
<b>ÍNDICE</b> .....	<b>v</b>
<b>ÍNDICE DE CUADROS</b> .....	<b>ix</b>
<b>ÍNDICE DE FIGURAS.</b> .....	<b>ix</b>
<b>1. INTRODUCCIÓN</b> .....	<b>1</b>
<b>2. MOTIVACIÓN</b> .....	<b>3</b>
<b>3. FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA</b> .....	<b>5</b>
<b>3.1 Suelo</b> .....	<b>5</b>
<b>3.2 Características de los suelos</b> .....	<b>5</b>
<b>3.3 Contaminación de los suelos.</b> .....	<b>8</b>
<b>3.4 Elementos tóxicos en los suelos</b> .....	<b>9</b>
<b>3.4.1 Cromo</b> .....	<b>9</b>
<b>3.5 Teoría de la infiltración</b> .....	<b>10</b>
<b>3.5.1 Ley de Darcy</b> .....	<b>11</b>
<b>3.5.2 Ecuación de la transferencia de agua</b> .....	<b>12</b>
<b>3.5.3 Ecuación de Richards</b> .....	<b>12</b>
<b>3.6 Características hidrodinámicas del suelo</b> .....	<b>13</b>
<b>3.6.1 Curva de retención de humedad</b> .....	<b>14</b>

3.6.2	Curvas de ajuste para obtención de curvas de retención .....	15
3.6.3	Curva de conductividad hidráulica.....	16
3.6.4	Métodos de ajuste para la obtención de las curvas características	18
3.7	Métodos de obtención de las características hidrodinámicas .....	19
3.7.1	Métodos directos.....	19
3.7.2	Métodos indirectos .....	20
3.7.3	Métodos inversos.....	20
3.8	Métodos numéricos .....	21
3.9	Transporte de solutos .....	21
3.9.1	Advección-dispersión.....	22
4.	HIPÓTESIS .....	24
5.	OBJETIVOS.....	25
5.1	Objetivo general.....	25
5.2	Objetivos específicos .....	25
6 .	METODOLOGÍA.....	26
6.1	Determinación de las características fisicoquímicas del suelo. ....	26
6.1.1	Muestreo de suelo.....	26
6.1.2	Caracterización fisicoquímica del suelo. ....	27
6.1.3.	Curva granulométrica y textura. ....	28
6.1.4	Determinación de cromo (Cr) presente en suelo.....	28
6.2	Determinación de las propiedades hidrodinámicas del suelo.....	29
6.2.1	Preparación del experimento.....	29
6.2.2	Prueba de infiltración .....	31
6.2.3	Determinación de la curva de retención de humedad. ....	32
6.2.4	Determinación de la curva de conductividad hidráulica .....	32

6.3	Modelación de la transferencia del agua y el transporte de Cr en los tiempos largos y cortos usando las ecuaciones de Richards y advección-dispersión.....	33
6.3.1	Obtención de la concentración de cromo (Cr) en suelo a diferentes profundidades, y en los lixiviados de las columnas. ....	33
6.3.1.2	Análisis de Cr en suelo.....	33
6.3.2	Análisis de Cr en lixiviados.....	33
6.3.2	Reproducción de los datos experimentales.....	34
6.3.4	Simulaciones. ....	34
7.	RESULTADOS.....	36
7.1	Características fisicoquímicas del suelo.....	36
7.1.1	Suelo recolectado .....	36
7.1.2	Caracterización fisicoquímica del suelo. ....	36
7.1.3.	Curva granulométrica y textura. ....	39
7.1.4	Determinación de la concentración Cromo (Cr) presente inicial en suelo.....	41
7.2	Determinación de las propiedades hidrodinámicas del suelo.....	42
7.2.1	Preparación del experimento.....	42
7.2.2	Prueba de infiltración .....	43
7.2.3	Determinación de la curva de retención de humedad .....	45
7.2.4	Determinación de la curva de conductividad hidráulica .....	48
7.3	Modelación de la transferencia del agua y el transporte de Cr en los tiempos largos y cortos usando las ecuaciones de Richards y advección-dispersión.....	51
7.3.1	Obtención de la concentración de cromo (Cr) en suelo a diferentes profundidades, y en los lixiviados de las columnas .....	51
7.3.1.1	Análisis de Cr en suelo.....	51

7.3.1.2	Análisis de Cr en lixiviados.....	54
7.3.2	<b>Reproducción de los datos experimentales.....</b>	<b>57</b>
7.3.3	<b>Simulaciones.....</b>	<b>59</b>
	<b>CONCLUSIONES .....</b>	<b>66</b>
	<b>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>68</b>

## ÍNDICE DE CUADROS

CUADRO	PÁGINA
Cuadro 7-1. Caracterización fisicoquímica del suelo.....	36
Cuadro 7-2. Diámetro y frecuencia acumulada obtenida para la curva granulométrica.....	39
Cuadro 7-3. Valores obtenidos de Dd, m y n para los modelos de conductividad: Poro grande, neutral y media geométrica .....	40
Cuadro 7-4. Parámetros físicos del suelo .....	41
Cuadro 7-5. Valores obtenidos del contenido de humedad ( $\theta_0$ ) .....	42
Cuadro 7-7. Valor del parámetro de ajuste para la curva de humedad .....	46
Cuadro 7-8. Valor del parámetro de ajuste para la curva de conductividad hidráulica .....	49
Cuadro 7-9. Concentraciones de cromo hexavalente en suelo. Columna A .....	52
Cuadro 7-10. Concentraciones de cromo hexavalente en suelo. Columna B .....	52
Cuadro 7-11. Concentraciones de cromo hexavalente en suelo. Columna C .....	53
Cuadro 7-12. Valores del coeficiente de dispersividad ( $\lambda$ ) .....	60

## ÍNDICE DE FIGURAS.

**FIGURA****PÁGINA**

Figura 3.1. Triángulo de textura de suelo (USDA, 1999).....	6
Figura 6.1. Localización de la zona de estudio.....	26
Figura 6.2. Vista aérea de la zona de muestreo. San Juan del Río, Qro .....	26
Figura 6.3. Vista frontal de la zona de muestreo. San Juan del Río, Qro.....	27
Figura 6.4. Columna para la prueba de infiltración: a) Columna de acrílico y b) Soporte de acetato .....	29
Figura 6.5. Columnas preparadas para la prueba de infiltración .....	30
Figura 6.6. Módulo de la prueba de infiltración: columna B.....	31
Figura 7.1. Curva granulométrica ajustada con los modelos de poro.....	40
Figura 7.2. Lámina infiltrada acumulada: Columna A.....	43
Figura 7.3. Lámina infiltrada acumulada: Columna B.....	44
Figura 7.4. Lámina infiltrada acumulada: Columna C.....	45
Figura 7.5. Curva característica de humedad con tres modelos de poro: Columna A.....	47
Figura 7.6. Curva característica de humedad con tres modelos de poro: Columna B.....	47
Figura 7.7. Curva característica de humedad con tres modelos de poro: Columna C.....	48
Figura 7.8. Curva de conductividad hidráulica obtenida con tres modelos de poro: Columna A.....	49
Figura 7.9. Curva de conductividad hidráulica obtenida con tres modelos de poro: Columna B.....	50
Figura 7.10. Curva de conductividad hidráulica obtenida con tres modelos de poro: Columna C.....	50
Figura 7.11. Concentraciones de cromo a diferentes profundidades del suelo. ....	54
Figura 7.12. Concentraciones de Cr obtenidas de lixiviados: Columna A.....	54
Figura 7.13. Concentraciones de Cr obtenidas de lixiviados: Columna B.....	55
Figura 7.14. Concentraciones de Cr obtenidas de lixiviados: Columna C.....	56

Figura 7.15. Lámina infiltrada con tres modelos de poro: Columna A.....	57
Figura 7.16. Lámina infiltrada con tres modelos de poro: Columna B.....	58
Figura 7.17. Lámina infiltrada con tres modelos de poro: Columna C.....	59
Figura 7.18. Simulaciones del fenómeno de advección-dispersión del Cr: Columna A.....	61
Figura 7.19. Simulaciones del fenómeno de advección-dispersión del Cr: Columna B.....	62
Figura 7.20. Simulaciones del fenómeno de advección-dispersión del Cr: Columna C.....	63
Figura 7.21. Ejemplo de un lavado de suelo .....	64

## 1. INTRODUCCIÓN.

La contaminación de suelos por metales pesados es una problemática de gran impacto debido a los riesgos de alcance que representan este problema ambiental, por la contaminación de suelo y su alcance en determinadas matrices como el agua y el aire (Tiruta-Barna, 2008; Torres *et al.*, 2012). Para estimar el riesgo ambiental se considera la concurrencia de tres factores: la concentración de contaminantes en el suelo, la exposición a la contaminación por diferentes vías y la toxicidad de las sustancias (Brizuela y Jiménez, 2012).

La contaminación del suelo por metales incluido el plomo, cromo, arsénico, zinc, cobre y mercurio, es un problema de gran relevancia, ya que pueden causar un daño significativo a la salud humana y ambiental, resultado de la movilidad y la solubilidad de estos metales generando una contaminación difusa, es decir, que involucra el transporte y transformación de desechos a través de varios medios como puede ser la lixiviación de estos metales y con ello la posible contaminación de los mantos freáticos, los cuales son una fuente importante de agua potable para más de 127.5 millones de mexicanos (Gleeson *et al.*, 2010; Bravo-Inclán *et al.*, 2013).

La contaminación de cromo en suelo, aguas profundas y superficiales es un problema mundial creciente causado usualmente principalmente por el inadecuado del manejo y/o disposición industrial de compuestos de cromo (Cr) (Villalobos-Aragón *et al.*, 2012; Wang *et al.*, 2015; Kazakis *et al.*, 2017). En México, algunas áreas están altamente contaminadas con este metal pesado, siendo las más afectadas Tultitlán en el Estado de México y el estado de Guanajuato con concentraciones superiores a los 1 000 ppm de Cr (Morton-Bermea *et al.*, 2010; Ballesteros *et al.*, 2017).

Debido a los procesos de lixiviación de cromo en suelo que representan un peligro potencial debido a su toxicidad sobre la biota y la salud humana, se debe estudiar el proceso de infiltración con el propósito de conocer el posible destino de estos

metales en los suelos contaminados. La curva infiltración puede ser obtenida de tres maneras: la teoría de infiltración no saturada, la teoría de infiltración saturada y la teoría de infiltración empírica (Zhang *et al.*, 2013) y esta puede ser modelada siguiendo dos enfoques: a) basada en observaciones empíricas y directamente tratados (ej. Kostiakov (1931) y Horton (1940)) y b) dado de principios primero y de observaciones propias (ej. Ley de Green y Ampt (1911) y Darcy (1856)).

La dinámica del agua puede ser descrita empleando ecuaciones diferenciales para describir estos procesos como la ley de Darcy, la cual es ampliamente utilizada para el estudio del movimiento del agua y el medio poroso. Por otra parte, el transporte de solutos es modelado por la ley de Fick y junto con la ley de Darcy y el principio de conservación de masa son una base fundamental para describir la transferencia de agua y transporte de solutos

Las ecuaciones de la transferencia de agua y transporte de solutos son ampliamente estudiadas en la agricultura y el ambiente (Wang *et al.*, 2013). La modelación matemática de estos fenómenos es una representación simplificada que representan procesos con ecuaciones, propiedades físicas como coeficientes en las ecuaciones, y que calculan el estado o el potencial del sistema como variables (Konikow y Reilly, 1999).

Los modelos matemáticos varían las variables en función de sus propiedades macroscópicas o microscópicas, con base en el perfil de la matriz para su aplicación (Zataráin *et al.*, 1998). Con la aplicación de los modelos se puede estimar la distribución del agua y la redistribución de diversos solutos, como el cromo (Cr), en el perfil del suelo.

Considerando la suma importancia del suelo, el presente trabajo tiene como objetivo describir y analizar la transferencia de agua y el transporte de solutos del Cr, en el suelo, utilizando la ecuación de advección-dispersión y la ecuación de Richards.

## 2. MOTIVACIÓN.

La contaminación de suelos principalmente por hidrocarburos y metales pesados, derivada de distintas fuentes como la industria, agricultura y disposición de desechos, así como de la contaminación difusa originada del almacenamiento de contaminantes y movilización en suelo, y sedimentos ocasiona un incremento potencial en la contaminación en el ambiente como la exposición de la contaminación de aguas subterráneas y los efectos a la salud humana provocada por estos contaminantes (De Lannoy *et al.*, 2006; Gómez-Puentes *et al.*, 2014; Nizzetto *et al.*, 2016).

Por otra parte, estos contaminantes presentes en el suelo como el cromo hexavalente (Cr (VI)), un metal pesado, son altamente resistentes y pueden causar efectos nocivos principalmente por su alta toxicidad. Tal es el caso de la contaminación de suelos por el uso de aguas de jales mineros, aguas de desechos industriales y aguas no tratadas para el riego, ocasionando grandes concentraciones en suelo, sedimentos y acuíferos (Su *et al.*, 2005; Méndez-Ortiz *et al.*, 2012).

Debido a la alta toxicidad de Cr (VI) el Departamento de Salud y Servicios Humanos (DHHS, por sus siglas en inglés), la Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer (IARC, por sus siglas en inglés) y la Agencia de Protección Ambiental (EPA, por sus siglas en inglés) han determinado efectos nocivos tanto agudos como crónicos del cromo hexavalente que afectan a diferentes sistemas del organismo humano, además de que la exposición a cromo hexavalente se asocia al riesgo de padecer cáncer, lo cual representa un riesgo a la población expuesta (ATSDR, 2012 y ATSDR, 2007).

La presencia de estos metales pesados es diversa en los Estados Unidos Mexicanos en donde se han presentado derrames en el suelo, por ello el riesgo de contaminación del perfil de esta matriz y de aguas subterráneas ha requerido el uso de modelos que permitan estimar la transferencia de agua y el transporte del cromo, en la distancia, gradiente de concentración y tiempo. Esto con la finalidad, de aplicar

tratamientos de remediación que induzcan a disminuir el riesgo de dispersión del contaminante en estas matrices a profundidades mayores (Gueting *et al.*, 2015; Nizzetto *et al.*, 2016).

Debido a esta necesidad de poder conocer y predecir el comportamiento del cromo, los modelos matemáticos han sido aceptados como una práctica científica que puede proveer mecanismos y procesos básicos que pueda describir un mecanismo de liberación de masa (contaminante) y su dispersión, con lo cual permita entender un sistema (Mirbagheri, 2004).

Existen numerosos modelos analíticos o numéricos de la ecuación de transferencia de agua para predecir el comportamiento en el proceso de infiltración tanto en la zona saturada como en la no saturada, pero para ello es indispensable disponer de ecuaciones que representen las propiedades hidrodinámicas del suelo, que puedan relacionar la conductividad hidráulica ( $K$ ) y el potencial de presión ( $\psi$ ) como funciones del contenido volumétrico del agua ( $\theta$ ) (Pollacco, 2017)

Por ello, el uso de modelos predictivos de los procesos de transferencia de agua y transporte de soluto en el perfil del suelo requieren de conocer las características hidrodinámicas del suelo, fisicoquímicas y la interacción del cromo con el suelo. Estas características determinan la transferencia del agua y el alcance del transporte de especies químicas en el suelo, como el cromo. Para tal efecto, se emplearan la ecuación de Richards y advección-dispersión para transferencia y transporte solutos se podrá predecir dichos procesos.

### **3. FUNDAMENTACIÓN TEÓRICA**

#### **3.1 Suelo.**

El suelo está compuesto por tres fases: sólida, líquida y gaseosa en distintas proporciones conformado por el arreglo de partículas en las cuales se encuentran espacios vacíos de diferentes tamaños, los cuales pueden estar ocupados por agua y/o aire (Taylor, 1983).

Debido las diferentes proporciones de los compuestos presentes en el suelo, se considera mucho más complejo debido a los distintos horizontes conformados de minerales y materia orgánica que se presenta en distintos estados de desintegración, dando como resultado la formación de iones inorgánicos y orgánicos, agua y gases, generándose así las tres fases mencionadas (USDA, 2000; Gonzáles *et al.*, 2002; Conklin, 2014).

La matriz del suelo también provee funciones importantes como la capacidad de amortiguamiento y tratamiento de desechos sólidos, líquidos y gaseosos minimizando el impacto ambiental, regula el agua interviniendo en el transporte de agua y solutos disueltos, transformando y ciclando de nutrientes y principalmente en el sustento de la vida (USDA, 2000; Bohn *et al.*, 2001).

#### **3.2 Características de los suelos**

Está caracterizado por propiedades físicas (estructura, textura, porosidad, capacidad de retención de agua, densidad aparente), químicas y físico-químicas (pH, potencial redox, capacidad de intercambio catiónico) que los diferencian entre sí y del material original (Volke *et al.*, 2005). A continuación se presentan las propiedades consideradas en el transporte de solutos

##### **a) La Textura del suelo**

La textura se refiere a la cantidad de arena, limo y arcilla presentes en el suelo, y la proporción de estos componentes se utiliza como una herramienta para clasificar los suelos empleando el triángulo de textura (Figura 3.1) de la FAO.



#### c) Porosidad del suelo

El espacio poroso del suelo se refiere al porcentaje del volumen del suelo no ocupado por sólidos y es un factor de importancia en la obtención de las características hidráulicas y la dinámica del agua. Siendo estos espacios porosos los responsables de la retención del agua y nutrientes, del drenaje del suelo y la productividad de las plantas (Cássaro *et al.*, 2011; Rezanezhad *et al.*, 2016).

La distribución del tamaño de poro en el suelo es una herramienta que permite conocer los cambios en la estructura del suelo y provee información acerca de la calidad física del sistema de poros y textural (Moragues-Saitua *et al.*, 2017).

#### d) Densidad del suelo

La densidad se refiere al peso por volumen seco, determinando la densidad se puede obtener la porosidad total del suelo. Existen dos tipos: una densidad real, partículas densas del suelo y que generalmente tienen un valor de  $2.65 \text{ g cm}^{-3}$ ; y la densidad aparente la cual indica la presencia elevada de partículas granulares (Shahmohammadi-Kalalagh *et al.*, 2015 y Ren *et al.*, 2016).

#### e) Tamaño de partícula

Es una de las propiedades de importancia, ya que la distribución del tamaño de partícula influye en procesos y ciclos biogeoquímicos, como la retención y flujo del agua, transporte de solutos, características hidrodinámicas, sorción de nutrientes y erosión del suelo. Por lo cual la caracterización de los suelos es primordial para el estudio de los procesos en la dinámica del agua en el suelo (Yu *et al.*, 2015; Yu *et al.*, 2017).

#### f) Materia orgánica

La materia orgánica afecta sobre las propiedades físicas del suelo formando agregados, estabilidad estructural, favorece la retención y filtración de humedad. También afecta las propiedades químicas del suelo aumentando la capacidad de intercambio catiónico y la reserva de nutrientes. Así también ejerce efecto en las

propiedades biológicas favoreciendo la mineralización y estimula el crecimiento vegetal (Julca-Otiniano *et al.*, 2006).

La materia orgánica (MO) es muy importante para la retención de los metales por sólidos del suelo mediante diversos mecanismos disminuyendo así la movilidad y la biodisponibilidad. Sin embargo, en la complejación de metales por MO soluble, la adición de MO puede resultar en la liberación de sólidos a la solución de suelo (Polubesova *et al.*, 2010; Porsch *et al.*, 2010).

#### g) Capacidad de Intercambio Catiónico (CIC)

La Capacidad de Intercambio Catiónico (CIC) está influenciada principalmente por arcillas y materia orgánica presente en los suelo. La CIC refleja la cantidad de cationes que pueden ser retenidos por el suelo, la disponibilidad y cantidad de nutrientes, pH e interviene en las reacciones del suelo con los solutos inorgánicos presentes (Méndez-Ortiz *et al.*, 2012).

### **3.3 Contaminación de los suelos.**

La contaminación de los suelos implica todo aquel proceso que provoca efectos negativos en la propiedades biológicas, físicas y químicas del suelos como puede ser la afectación en su capacidad biológica, pérdida de humus, compactación del suelo, aumento en su densidad aparente, disminución de la permeabilidad y cambios es la química de los suelos (Higueras *et al.*, 2016).

Esta contaminación puede ser originada de forma natural debido a la disponibilidad y el estado en que se encuentre los minerales, al igual que antropogénica ya sea debida a la industrialización, asentamientos humanos, mal manejo de residuos peligrosos, uso de plaguicidas y/o aguas residuales (Fernández, 2012).

Los agentes potencialmente contaminantes del suelo están fundamentalmente asociados a residuos derivados de actividades industriales, mineras, agrícolas y ganaderas (Ortiz-Bernad *et al.*, 2004).

### **3.4 Elementos tóxicos en los suelos**

Los metales pesados pueden ser tóxicos si sus iones, siendo los más comunes el mercurio, cadmio, plomo, níquel, cobre, zinc, cromo y magnesio, se encuentran disponibles para animales, plantas o en el manto freático cuando sus concentraciones son mayores a las permisibles (EPA, 1993; EPA, 1998; USDA, 2000; Bohn *et al.*, 2001).

#### **3.4.1 Cromo**

El cromo es un metal pesado que puede ser encontrado en tres estados de oxidación: cromo metálico ( $\text{Cr}^0$ ), cromo trivalente ( $\text{Cr}^{3+}$ ) y cromo hexavalente ( $\text{Cr}^{6+}$ ) siendo capaz de formar compuestos con otros elementos en estados de oxidación (II), (III) y (VI). El catión  $\text{Cr}^{3+}$  (crómico) es la forma más favorecida en el suelo en condiciones normales, carente de movilidad y generalmente no se encuentra disponible para las plantas mientras que el catión  $\text{Cr}^{6+}$  (cromato) es la forma más móvil y altamente tóxica (Guzmán y Barreto, 2011; ATSDR, 2012).

##### **3.4.1.1 Toxicología**

Los efectos a la salud por cromo son principalmente relacionados a los estados de valencia del metal y el tiempo de exposición. Los compuestos trivalente, Cr (III), y hexavalente, Cr (VI), son unos de los compuestos más biológicamente significantes. Cr (III) es un mineral esencial en la dieta en bajas dosis. Cr (VI) es generalmente considerado 1000 veces más tóxico que el Cr (III) (EPA 1998; ATSDR 2000; Dayan y Paine, 2001).

La exposición al cromo ocurre al ingerir alimentos o agua contaminados o al respirar aire contaminado en el trabajo. Niveles altos de cromo (VI) pueden dañar la nariz y producir cáncer e ingerir niveles altos de cromo (VI) puede producir anemia o dañar el estómago o los intestinos. Por otra parte, el cromo (III) es un elemento nutritivo esencial (ATSDR, 2012).

Otros problemas de salud que son causados por el cromo (VI) son:

- Erupciones cutáneas
- Malestar de estómago y úlceras
- Problemas respiratorios
- Debilitamiento del sistema inmune
- Daño en los riñones e hígado
- Alteración del material genético
- Cáncer de pulmón

#### 3.4.1.2 Normativa

De acuerdo con la Norma Oficial Mexicana NOM-141-SEMARNAT-2003, las concentraciones permisibles de cromo en suelo oscilan entre los rangos de 280 a 510 mg Kg<sup>-1</sup> y para contaminantes solubles en suelo oscila en una concentración de 1 mg L<sup>-1</sup>.

A nivel mundial se emplean distintos límites de concentraciones permisibles de cromo en suelos como se muestra a continuación:

- Rango medio a nivel mundial: 7 a 221 ppm
- Rango medio en E.U.A: 20 a 85 ppm

### 3.5 Teoría de la infiltración

La infiltración se refiere al proceso en el cual la humedad va de la superficie al suelo y penetra las capas inferiores debido a una precipitación o irrigación, siendo un componente fundamental en el ciclo hidrológico y domina la cantidad de escurrimiento, la humedad del suelo y la recarga de aguas subterráneas (Zhang *et al.*, 2013). Durante este proceso se alcanza un balance mecánico que comprende fuerzas gravitacionales, moleculares y capilares.

el valor de la conductividad el valor de inidraulica es alto al inicio del proceso de filtración, y este valor disminuya con orme el contenido de humedad va aumentando

en el suelo hasta llegar a un valor constante que es conocido como la conductividad hidráulica saturada. La velocidad de infiltración depende de diversos factores como la altura de la carga empleada, la temperatura, la estructura y compactación del suelo, la textura, contenido de humedad, etc., estos factores afectan no solo la dinámica del agua en el suelo si no también la características el suelo (Estevez *et al.*, 2004).

El fenómeno de initración se puede modelar con la ecuación de Green y Amp (1911) y la ecuación de Richards (1931).

### 3.5.1 Ley de Darcy

La ley de Darcy (1856) establece que el caudal unitario es proporcional al producto del área transversal al flujo y el gradiente hidráulico, es decir:

$$q = -K(\psi) \nabla(\psi + z) \quad (3.1)$$

donde el potencial hidráulico se ha sustituido por la suma del potencial de presión ( $\psi$ ) expresada como una altura equivalente de columna de agua (L), y el potencial gravitacional asimilado a la coordenada vertical ( $z$ ) (L)  $K(\psi)$ ; es la conductividad hidráulica ( $LT^{-1}$ ) expresada como una función de la presión del agua.

La ecuación de Darcy (1856) parte de dos hipótesis fundamentales:

1. La conductividad hidráulica de un suelo no saturado es función del contenido de agua o del potencial de presión.
2. La fuerza que provoca el flujo de agua en un suelo rígido y no saturado, es la suma del potencial de presión y el potencial gravitacional.

### 3.5.2 Ecuación de la transferencia de agua

La ecuación de Transferencia permite modelar el flujo de agua en el suelo considerando los siguientes argumentos bajo los cuales se justifica su validez:

- 1) Asume que el suelo es isotrópico, homogéneo y rígido
- 2) El agua es incompresible
- 3) El flujo es isotérmico
- 4) El efecto de la fase de aire en el flujo de agua es insignificante
- 5) Es aplicada sólo a suelos no expansivos, es decir, suelos indeformables
- 6) No existe histéresis

### 3.5.3 Ecuación de Richards

La ecuación de Richards se utiliza ampliamente para estudiar la transferencia de agua en el suelo, que en su forma unidimensional en la transferencia es descrita en la siguiente ecuación

$$C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right] - \frac{dK}{d\psi} \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad (3.2)$$

la cual es resultante de la ecuación de continuidad, deducida a partir de la aplicación del principio de conservación de la masa

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\partial q}{\partial z} \quad (3.3)$$

y de la ley de Darcy generalizada a los suelos no saturados

$$q = -K(\psi) \frac{\partial H}{\partial z}; \quad H = \psi - z \quad (3.4)$$

donde  $t$  es el tiempo (h);  $H$  el potencial hidráulico (cm) igual a la suma del potencial de presión ( $\psi$ ) y del potencial gravitacional ( $z$ ) asimilado a la coordenada vertical orientada positivamente hacia abajo ( $J \text{ Kg}^{-1}$ );  $q$ , el flujo ( $\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}$ );  $K(\psi)$ , la conductividad hidráulica ( $\text{cm h}^{-1}$ ) como una función de la presión;  $\theta$ , el contenido

volumétrico de humedad ( $\text{cm}^3 \text{ cm}^{-3}$ );  $\theta(\psi)$ , la curva de retención de humedad, y su derivada  $C(\psi) = d\theta/d\psi$  es la capacidad específica.

### 3.6 Características hidrodinámicas del suelo

Las características hidrodinámicas juegan un papel importante en las dinámicas de los procesos de infiltración y flujo de agua en suelos (Augenstein *et al.*, 2015). Durante el proceso de infiltración, varios parámetros hidrodinámicos pueden influenciar el movimiento del agua, como son la capacidad del campo, heterogeneidad, subcapas, potencial de la matriz, conductividad, rutas preferenciales de flujo, textura, potencial hidráulico y conectividad de poro (Zhang *et al.*, 2013; Zhou *et al.*, 2015).

La curva de retención de humedad  $\theta(\psi)$  y conductividad hidráulica  $K(\theta)$ , son importantes características hidrodinámicas en la modelación de la transferencia del agua, irrigación y transporte de nutrientes y contaminantes a través de la zona no saturada del suelo. Estas características determinan la distribución de las precipitaciones entre la infiltración y los escurrimientos (Antinoro *et al.*, 2017; Pollacco *et al.*, 2017).

Las características hidrodinámicas de los suelos son de gran importancia en el estudio de la transferencia del agua debido a la relación del contenido volumétrico del agua ( $\theta$ ) con el potencial de presión ( $\psi$ ) del medio poroso, es decir, la curva de retención de humedad (Moragues-Saituana *et al.*, 2017). Así también relaciona la conductividad hidráulica con el contenido del agua ( $\theta$ ) o con el potencial de presión ( $\psi$ ) (Fuentes *et al.*, 1992, 2012). De acuerdo con las relaciones basadas en sus variables dependientes son agrupadas en cuatro grupos:

- 1)  $\theta(\psi)$ : Brooks y Corey (1964), King (1965), Brutsaert (1966), Farrel y Larson (1972), Van Genuchten (1980), Haverkamp y Vauclin (1981), Haverkamp y Parlange (1986)

- 2)  $K(\theta)$ : Averyanov (1950), Irmay (1954), Books y Corey (1964), Simmon *et al.*(1979), Van Genuchten (1980), Broadbridge y White (1988), Sander *et al.* (1988)
- 3)  $K(\psi)$ : Wind (1955), Rijtema (1965), Gardner (1958)
- 4)  $D(\theta)$ : Fujita (1952), Gardner y Mayhugh (1958)

Para la solución de la ecuación de transferencia se requiere de dos relaciones funcionales de las características hidrodinámicas, pero el número adecuado de parámetros involucrados dependerá de la relación escogida. Para solucionar este problema se desarrolló una relación entre los parámetros usados en  $\theta(\psi)$  y  $K(\theta)$  (Fuentes *et al.*,1992). Las propiedades hidrodinámicas de los suelos no saturados son estrechamente complejas, debido a ello se necesitan de soluciones simples que permitan describir los procesos de infiltración. Los conceptos clásicos de Darcy (1856), Boltzmann (1894) y Buckingham (1907) permitieron desarrollar ecuaciones de estimación de la infiltración del agua en suelo como la ecuación de Green y Ampt (1911) y Richards (1931), las cuales están sujetas a condiciones iniciales y de frontera (Reichardt *et al.*, 2016).

### **3.6.1 Curva de retención de humedad**

La curva formada cuando en un medio no saturado varía el potencial de presión ( $\psi$ ) con respecto al contenido de humedad ( $\theta$ ) es llamado curva de retención de humedad en la cual releja la capacidad de cualquier medio poroso para retener el agua y determina la porción de humedad disponible en el suelo.

La curva de retención de humedad es afectada por la textura principalmente por arcillas debido a la capacidad de retención de agua para un valor de presión; otra característica de los suelos por la cual se ve influenciada es la estructura donde afecta los valores altos de la presión debido a los efectos de capilares predominantes.

Una de las características de la curva de retención de humedad es su dependencia al tipo de proceso utilizado para su determinación: humedecimiento o mojado (sorción) o por secado (desorción). Las curvas de frontera obtenidas presentan un fenómeno llamado histéresis debido a que no coinciden (Poulovassilis, 1962).

La histéresis de los suelos puede ser atribuida a la homogeneidad geométrica de los poros individuales y sus interconexiones. En rango de potenciales altos, el efecto de histéresis se ve pronunciado por una textura gruesa.

El incremento de histéresis en la curva de retención (Bauters *et al.*, 2000), reduce la capacidad relativa de infiltración de los suelos (Ritsema *et al.*, 1993; Ritsema *et al.*, 1997; Wang *et al.*, 2000), generando flujos inestables e induce mejores escurrimientos superficiales y erosión (Bughic y Wallach, 2016).

### **3.6.2 Curvas de ajuste para obtención de curvas de retención**

La curva de retención de agua en el suelo, es una relación con respecto a la distribución del tamaño de poro, considerada una de las características hidrodinámicas importantes. Estas han sido utilizados en la simulación de poro medio y las características hidrodinámicas (Ghanbarian-Alavijeh *et al.*, 2011).

Los parámetros de los ajustes matemáticos para las curvas de retención de agua en suelo son usados para describir la estructura del suelo. Se han propuesto en la literatura distintas ecuaciones para describir las curvas de retención de agua en suelo como son: Gardner, 1958; Brooks y Corey, 1964; Campbell, 1974; van Genuchten, 1980; Fredlund y Xing, 1994; Kosugi, 1996; Kutílek, 2004; Groenevelt y Grant, 2004, siendo los más comúnmente usados para la obtención de las curvas los modelos de Van Genuchten (1980) y Brooks y Corey (1964) (Pollacco *et al.*, 2017). Todos estos modelos asumen las características del suelo como una distribución unimodal del tamaño del poro del suelo, siendo el poro dominante el que sea continuo (Antinoro *et al.*, 2017).

Los modelos más recientes empleados se explican a continuación:

Brooks y Corey (1964) proponen una curva una función compuesta:

$$\theta(\psi) = \begin{cases} \theta_r + (\theta_s - \theta_r) \left( \frac{\psi_b}{\psi} \right)^\lambda & ; -\infty < \psi < \psi_b \\ \theta_s & ; \psi_b \leq \psi \end{cases} \quad (3.5)$$

donde  $\lambda$  es un parámetro de forma adimensional y positivo, definido como índice de distribución del tamaño de los poros,  $\psi_b$  es definido como la presión de burbuja [kPa].

Van Genuchten (1980) propone un modelo de curva de retención de humedad a partir de la curva de Brooks y Corey (1964), siendo el modelo empleado para este trabajo, expresada como se muestra en la ecuación:

$$\theta(\psi) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{\left[ 1 + \left( \frac{\psi}{\psi_d} \right)^n \right]^m} \quad ; \quad m \geq 0 \quad ; \quad n \geq 0 \quad (3.6)$$

donde  $\psi_d$  es un valor característico de la presión (cm); m y n son parámetros de forma de la curva; adimensionales y positivos;  $\theta_s$  es el contenido de humedad a saturación ( $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$ ) y  $\theta_r$  el contenido de humedad residual ( $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$ )

### 3.6.3 Curva de conductividad hidráulica

Las propiedades hidráulicas como la conductividad hidráulica saturada ( $K_s$ ) y el contenido de humedad del suelo ejercen una fuerte influencia en el drenaje profundo, escurrimiento e infiltración, siendo parámetros de importancia en el

balance de agua, principalmente en efectos de evapotranspiración y modelos de transporte de solutos (Gwenzi *et al.*, 2011; Montzka *et al.*, 2017).

Los suelos con una alta conductividad hidráulica son menos factibles de erosiones, escurrimientos e inundaciones de los campos (Moragues-Saitua *et al.*, 2017). En la literatura se pueden encontrar diversos modelos para estimación de la conductividad hidráulica ( $K_s$ ), siendo comúnmente estimada por parámetros determinados que se ajustan a ecuaciones matemáticas como las de los modelos de Brooks y Corey (1964), Van Genuchten (1980) o modelos fractales (Ghanbarian y Hunt, 2017; Soto *et al.*, 2017).

La histéresis se presenta en la relación  $\psi(\theta)$  a un potencial dado el contenido de humedad puede tener diferentes valores de acuerdo a la forma de secado o mojado del suelo. En general, el efecto de la histéresis en relación  $K(\theta)$  es menos significativa que en la relación  $K(\psi)$  (Childs, 1969).

El modelo de conductividad hidráulica utilizado es un modelo basado en la geometría fractal propuesto por Fuentes *et al.*, (2003), el cual se obtuvo de formas analíticas cerradas de la conductividad hidráulica introduciendo la curva de retención de Van Genuchten al imponer relaciones entre  $m$  y  $n$  como se muestra en modelos siguientes:

$$K(\theta) = K_s \left[ 1 - \left( 1 - \theta^{1/m} \right)^{sm} \right]^2 \quad ; \quad 0 < sm = 1 - 2s/n < 1 \quad (3.7)$$

$$K(\theta) = K_s \theta^s \left[ 1 - \left( 1 - \theta^{1/m} \right)^{sm} \right] \quad ; \quad 0 < sm = 1 - 4s/n < 1 \quad (3.8)$$

$$K(\theta) = K_s \left[ 1 - \left( 1 - \theta^{1/m} \right)^{2sm} \right] \quad ; \quad 0 < 2sm = 1 - 4s/n < 1 \quad (3.9)$$

donde  $K_s$  es la conductividad hidráulica saturada ( $\text{cmh}^{-1}$ );  $s$  es una dimensión fractal relativa definida por  $s = D; / E$ ;  $D$  es la dimensión fractal del suelo y  $E$  es la dimensión de Euclides del espacio físico, y  $\theta$  el grado efectivo de saturación

definido como  $\Theta = \theta - \theta_r / \theta_s - \theta_r$  el cual es la relación entre la porosidad efectiva y la total. La dimensión fractal relativa está relacionada con la porosidad volumétrica total del suelo ( $\Phi$ ) definida de manera implícita por:

$$(1 - \Phi)^s + \Phi^{2s} = 1 \quad (3.10)$$

### 3.6.4 Métodos de ajuste para la obtención de las curvas características

Los modelos que relacionan la conductividad hidráulica con la geometría del medio poroso se basan en la ley de Poiseuille para la escala microscópica y la ley de Darcy para la escala macroscópica, además de la ley de Laplace para definir el tamaño del capilar que interviene.

El objetivo principal de los métodos de ajustes de curvas es encontrar soluciones aproximadas a problemas complejos utilizando operaciones más simples. Entre los métodos numéricos que se emplean se encuentran los siguientes:

- a) Método de los mínimos cuadrados, en el cual se intenta encontrar la función más simple que se ajuste a los datos, intentando minimizar las sumas de los cuadrados de las diferencias generados por la función y los datos obtenidos. Este método solo se puede emplear en modelos lineales y con un número de datos mayores a 10 (Mathews *et al.*, 2000).
- b) El método de la secante se puede definir como: el cual es un método iterativo en el que se calcula una solución aproximándose por una recta secante a la curva, cuya pendiente es aproximada a la derivada en el punto inicial. Se puede definir como

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n) * \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \quad (3.11)$$

- c) El método de Newton-Raphson o método de Newton-Fourier, es el método más usado y eficiente que consiste en encontrar aproximaciones de las raíces o los máximos y mínimos a partir de los ceros de una derivada de una

función real y siempre converge en una función polinomial. En este método hay que determinar el número máximo e iteraciones, se considera una tolerancia y si no hay una raíz real el método oscila (Chapra *et al.*, 2007)

### **3.7 Métodos de obtención de las características hidrodinámicas**

El éxito de un modelo de predicción dependerá de la representación espacial y variabilidad temporal calculada mucho más extensa que el uso del suelo y propiedades hidrodinámicas (Libohova *et al.*, 2016). Varios métodos relativamente sencillos han sido desarrollados para determinar las características hidrodinámicas que se basan en las propiedades del suelo como son la densidad aparente, la textura, contenido de arcilla, materia orgánica (Nakano y Miyazaki, 2005; Costa, 2006; Ghanbarian-Alavijeh *et al.*, 2010) hasta más complejos que requieren la determinación de la propiedades hidráulicas del suelo experimentalmente usado dispositivos de medición (permeámetro, placa de succión. Membrana de presión, etc.). Los métodos usados para la determinación de las características hidrodinámica son: los métodos directos, indirectos e inversos.

#### **3.7.1 Métodos directos**

Existen muchos métodos de laboratorio y de campo que han sido desarrollados para la obtención de las características hidrodinámicas (Reynolds y Elrick, 1985). Algunas de las mediciones de estos métodos incluyen tensiómetros y permeámetros (Barkle *et al.*, 2011). Estos métodos poseen limitantes relacionadas a la determinación representativa apropiada de un volumen de suelo, por lo que, para que la muestra sea representativa se necesita reducir la variabilidad de la medición debido al flujo preferencia y las condiciones de frontera de mojado/secado (Bouma *et al.*, 1989; Mohanty y Mousli, 2000). Por otro lado métodos como la tomografía computarizada con rayos X ha sido empleada para la predicción de las características del suelo como son sus propiedades hidráulicas.

La mayoría de estos métodos y técnicas son caros, tardados y requieren de muchas mediciones sobre áreas grandes y periodos muy extensos.

### **3.7.2 Métodos indirectos**

Existen diversos métodos indirectos para la obtención de los parámetros de las funciones hidráulicas de los suelos no saturados que pueden variar en términos de complejidad y metodología para la generación de las propiedades hidráulicas del suelo, dentro de los cuales se pueden distinguir métodos basados en la distribución del tamaño de poro y las funciones de pedotransferencia usados frecuentemente en la estimación de las curva de retención de humedad y conductividad utilizando las ecuaciones de Brook y Corey o de Van Genuchten (Zimmermann y Basile, 2011).

### **3.7.3 Métodos inversos**

La solución del problema inverso requiere determinar las causas desconocidas basándose sus efectos (Hopmans y Simunek, 1999). El método inverso puede ser utilizado para la estimación de los parámetros hidrodinámicos mediante la suma cuadrada de la desviación minimizando así las variables obtenidas de la observación y la predicción del flujo.

Los métodos inversos presentan mayores beneficios en el: 1) cálculo de los valores de parámetros con lo cual se produce un mejor ajuste entre los valores observados y simulados, 2) se cuantifica el límite de confianza de los parámetros y predicciones estimadas, 3) provee un diagnostico estadístico que cuantifica y cualifica la calibración y datos y 4) no está restringido a las condiciones iniciales y de frontera del flujo, las relaciones constitutiva o el tratamiento de heterogeneidad (Zhang *et al.*, 2003).

### 3.8 Métodos numéricos

El uso de modelos matemáticos nos permite el entendimiento básico de un proceso describiendo un sistema, lo cual permite construir modelos que representen mejor sistemas naturales con la finalidad de permitir mejorar las prácticas actuales y estudios futuros.

La discretización espacial y temporal de la ecuación de Richards se realiza a través del esquema de diferencias finitas o elementos finitos. Mediante diferencias finitas es posible establecer soluciones adecuadas a la mayoría de los problemas planteados, pero presenta limitaciones cuando la geometría del dominio es compleja y cuando las propiedades de los elemento no presentan un comportamiento homogéneo en todas las direcciones, por otro lado el método de elementos finitos, permite ajustar la geometría a cualquier tipo a partir de una discretización adecuada (Hernández y Muñoz, 2009).

### 3.9 Transporte de solutos

El transporte de contaminantes es de fundamental importancia en aplicaciones ambientales como el tratamiento de aguas residuales y remediación ecológica (Wu *et al.*, 2015). El transporte de iones metálicos que probablemente sean contaminantes en las partículas del suelo se debe a la solubilidad de los iones del contaminante que pueden estar definidos por el producto de la solubilidad, que estará en función de sus fracciones molares y una menor o mayor solubilidad de los productos de hidróxidos (Bohn *et al*, 2001).

Para el transporte de solutos se involucran tres componentes: 1) el flujo por convección (flujo másico); 2) Flujo por dispersión hidrodinámica (dispersión mecánica); y 3) Flujo por difusión debido al movimiento molecular aleatorio. Bajo ciertas hipótesis los dos últimos puntos siguen una ley matemáticamente similar, agrupándolas en un solo término:

$$q_d = q_w C_d - D_{dh} \frac{\partial C_d}{\partial z} - D_d^s \frac{\partial C_d}{\partial z} = q_w C_d - D_e \frac{\partial C_d}{\partial z}$$

(3.11)

donde  $C_d$  es la concentración del soluto en la solución del suelo ( $\text{mg kg}^{-1}$ ),  $D_e$  es el coeficiente efectivo de difusión-dispersión ( $\text{cm}^2 \text{ ha}^{-1}$ ) definido por la suma del coeficiente de difusión del soluto en el suelo  $D_d^s$ .

Los modelos matemáticos deben tomar en cuenta estos procesos básicos: a) la advección, la cual representa el transporte del contaminante originado por la velocidad del flujo; b) la difusión, que representa el movimiento de la sustancia en el gradiente de concentración; de regiones de alta concentración hacia regiones de baja concentración el cual puede ser por un movimiento aleatorio de moléculas (difusión molecular) o por el aire o agua (difusión turbulenta) o por ambas, y c) la reacción del contaminante. Varios autores han propuesto e implementado modelos numéricos para simular el transporte de contaminantes (Tzatchkov *et al.*, 2000; Oyarzún, 2007).

El transporte de solutos en el medio saturado dependerá principalmente de los fenómenos de advección y dispersión, donde la dispersión es el proceso que distribuye al soluto más allá de lo que considera la advección, ya que este parámetro contempla el esparcimiento del soluto con respecto de la fuente de origen (Oyarzún, 2007; Grondona *et al.*, 2013).

### 3.9.1 Advección-dispersión

La ecuación advección-dispersión es comúnmente utilizada en modelos matemáticos para el transporte químico en el cual el flujo químico puede ser asumido como la suma en términos advectivos y dispersos. El flujo disperso es descrito por la ley de Fick de difusión como el producto de un vector de gradiente de concentración y un tensor de dispersión, con el cual se intenta describir la combinación de los efectos moleculares de difusión y los efectos hidrodinámicos de dispersión (Parker y Kim, 2015). El transporte advectivo del soluto es representado por el flujo del contaminante así aguas subterráneas inclusive cuando la dispersión actúa como un reductor y distribuidor de la concentración (Orywall *et al.*, 2015).

El transporte de solutos en un medio poroso saturado depende fundamental de los fenómenos de advección y dispersión, proceso que distribuye los contaminantes respecto a su fuente de origen.

Se asume que es instantánea la distribución tanto entre la fase particulada y la disuelta en agua debido al proceso de advección y dispersión, representado por mecanismo difusivo entre los gradientes de concentraciones dado debido a la interacción entre el agua y el lecho (Álvarez y Trento, 2007).

La ecuación advección-dispersión es usada para el estudio del transporte de solutos (Cardini *et al.*, 2004; Zerihun *et al.*, 2005; Trento y Álvarez, 2013 y Chávez *et al.*, 2014) como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial(HC_T)}{\partial t} + \frac{\partial(HqC)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ vH Da \frac{\partial C}{\partial x} \right] + R_S \quad (3.12)$$

donde  $Da$  es el coeficiente de difusión en agua ( $L^2T^{-1}$ ),  $C_T$  es la concentración total del soluto en el suelo ( $ML^{-3}$ ),  $C$  es la concentración del soluto en agua ( $ML^{-3}$ ),  $R_S$  es el término que incluye las ganancias o pérdidas debido a las reacciones químicas y la extracción de plantas ( $m$ );  $q$  y  $v$  son obtenidas del modelo del flujo del agua.

El coeficiente de difusión en el agua es calculado por  $Da = \lambda v$ , donde  $\lambda$  es la dispersividad ( $L$ ) y  $v$  la velocidad intercalada del agua calculada por  $v = q/v$  ( $LT^{-1}$ ).

En la literatura, numerosas soluciones han sido formuladas para una y tres dimensiones de problemas de transporte basadas en la ecuación de advección-dispersión para medios homogéneos (Leij and Dane, 1990; Wexler, 1992; Batu, 1996; Guyonnet and Neville, 2004; Falta *et al.*, 2005) al igual que para casos específicos de medios heterogéneos ((Tang *et al.*, 1981; Gillham *et al.*, 1984; Barker, 1985; Starr *et al.*, 1985; Barry and Parker, 1987; Liu *et al.*, 2000)

#### **4. HIPÓTESIS**

La transferencia de agua y el transporte del cromo (Cr) en el suelo se pueden describir acoplando las soluciones numéricas de las ecuaciones de Richards y la ecuación advección-dispersión, considerando que el suelo es un medio poroso isotrópico, homogéneo e indeformable que no presenta histéresis.

## **5. OBJETIVOS.**

### **5.1 Objetivo general**

Describir y analizar la transferencia de agua y el transporte de cromo, Cr(VI), en suelo, utilizando las ecuaciones de Richards y advección-dispersión.

### **5.2 Objetivos específicos**

5.2.1. Determinar las características fisicoquímicas del suelo.

5.2.2. Determinar las características hidrodinámicas del suelo: Curva de retención de humedad y Curva de conductividad hidráulica.

5.2.3. Predecir, con los datos experimentales, la transferencia de agua y el transporte de Cr usando las ecuaciones de Richards y advección-dispersión.

## 6 . METODOLOGÍA.

### 6.1 Determinación de las características fisicoquímicas del suelo.

#### 6.1.1 Muestreo de suelo

El suelo se obtuvo de la región agrícola de San Juan del Río, Querétaro, localizado en las coordenadas Latitud  $20^{\circ} 25' 32.505''$  Norte y Longitud  $100^{\circ} 5' 21.038$  Oeste. En donde se tomó una muestra de 20 kg del perfil del suelo. La muestra se secó en una superficie limpia a temperatura ambiente y posteriormente se tamizó con una malla de número 10 (2 mm).



Figura 6.1. Localización de la zona de estudio.



Figura 6.2. Vista aérea de la zona de muestreo. San Juan del Río, Qro

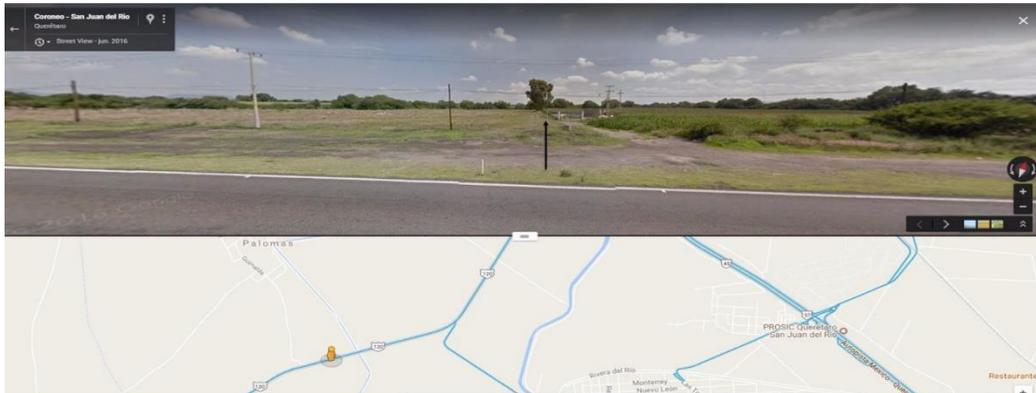


Figura 6.3. Vista frontal de la zona de muestreo. San Juan del Río, Qro

### 6.1.2 Caracterización fisicoquímica del suelo.

Se realizó el análisis fisicoquímico de pH, conductividad eléctrica, contenido de materia orgánica, densidad aparente, capacidad de intercambio catiónico (CIC) y textura del suelo según la NOM-021-SEMARNAT-2000, siguiendo los métodos presentados a continuación:

- Para la determinación del pH del suelo se realizó en la suspensión sobrenadante, que se obtuvo al mezclar suelo y agua, en una relación 1:2.
- El contenido de humedad se determinó por el método gravimétrico.
- La densidad aparente del suelo se realizó por el método AS-03.
- La cantidad de materia orgánica (MO) se determinó por el método de Walkley y Black.
- La determinación de la conductividad eléctrica se realizó en el extracto de saturación, que se midió con un conductivímetro.
- La capacidad de intercambio catiónico se determinó utilizando acetato de amonio para saturar.

### 6.1.3. Curva granulométrica y textura.

La determinación de la textura y curva granulométrica del suelo se realizó con el procedimiento de Bouyucos a través del método AS-09 siguiendo la norma NOM-021-RECNAT-2000. Para ello se separaron las partículas gruesas mediante tamices con aberturas de mallas estandarizadas, los cuales se pesaron para obtener las cantidades retenidas en los distintos tamices y para obtener la distribución de las partículas finas (limos y arcillas) se utilizó el método del hidrómetro de bouyucos.

La determinación de los porcentajes de limo, arcilla y arena permitió conocer su textura a partir del triángulo de texturas (Figura 3.1) establecido por el Departamento de Agricultura de los Estados Unidos (por sus siglas en inglés, USDA). Así mismo, se obtuvieron los parámetros de forma (m y n) estimadas de acuerdo con Fuentes *et al.* (1992).

La curva granulométrica total se representa en un gráfico donde el eje de las “x” tiene una escala logarítmica y el eje de las “y” una escala natural, la cual se obtiene a partir de la siguiente ecuación:

$$F(D) = \left[ 1 + \left( \frac{D_g}{D} \right)^N \right]^{-M} \quad (6.1)$$

donde F(D) es la frecuencia acumulada, basada en el peso de las partículas cuyos diámetros son inferiores o iguales a D; D<sub>g</sub> es un parámetro característico del tamaño de las partículas, M y N son dos parámetros de forma empíricos.

### 6.1.4 Determinación de cromo (Cr) presente en suelo.

El análisis de la concentración de Cr en suelo se realizó a través de la técnica de Espectrometría de Masas con Plasma Acoplado Inductivamente (ICP-MS), para ello las muestras previamente se digestaron siguiendo la metodología presentada en el apartado 6.3.1.

## 6.2 Determinación de las propiedades hidrodinámicas del suelo.

### 6.2.1 Preparación del experimento.

La prueba de infiltración se realizó en módulos de columnas de acrílico inactivadas de 5.2 cm de diámetro, de acuerdo a las características propuestas por Verduzco *et al.* (por publicar) como se muestra en Figura 6.4a. Cada una tiene una altura total de 14 cm y compone en cuatro secciones: las tres inferiores son de 2 cm y la superior de 8 cm de altura. Éstas cuentan con soportes de acetato en la parte superior e inferior de la matriz (Figura 6.4b). El soporte superior evita la deformación del suelo debido al flujo de entrada, y el inferior evita la pérdida del suelo y permite la lixiviación de la solución de cromo.

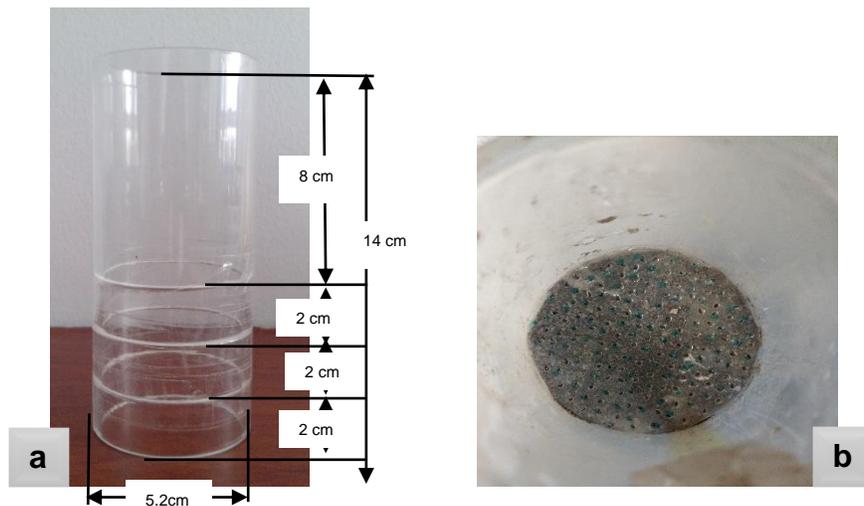


Figura 6.4. Columna para la prueba de infiltración: a) Columna de acrílico y b) Soporte de acetato

Cada módulo fue sometido a diversos tratamientos. Se lavaron con jabón en polvo, después con jabón libre de fosfatos, se enjuagaron con ácido nítrico al 4 % y se realizó un lavado final con agua tridestilada, para eliminar interferencias.

La unión de las cuatro secciones se realizó con cinta adhesiva coincidiendo cada una y evitando posibles fugas. Éstas se identificaron como: A1, A2, A3, A4; B1, B2, B3, B4; C1, C2, C3, y C4 (Figura 6.5). Posteriormente, fueron recubiertas con una

capa delgada de cera con la finalidad de evitar el flujo preferente y la interacción del metal pesado con el acrílico de la columna.

En cada columna se empacó 269.95 g de suelo. Este proceso se realizó colocando 33.74 g de suelo por cada centímetro de altura, obteniendo una densidad aparente de 1.37 g/cm<sup>3</sup> (Figura 6.5).



Figura 6.5. Columnas preparadas para la prueba de infiltración

Las columnas de acrílico con el suelo empacado, se colocaron en una base de madera con la finalidad de dar soporte y mantener su verticalidad, evitando el flujo preferencial. Éstas se fijaron al soporte con ligas y se colocó un soporte universal, con un embudo de plástico del tamaño de la columna, con el propósito de concentrar los lixiviados para su fácil recolección (Figura 6.6). Éste fue sometido a los mismos tratamientos que las columnas.



Figura 6.6. Módulo de la prueba de infiltración: columna B

### 6.2.2 Prueba de infiltración

Se usó una solución de cromo hexavalente (Cr (VI)) y agua tridestilada, obtenida a partir de un estándar de dicromato de potasio ( $K_2Cr_2O_7$ ) de la marca Hycel con una concentración certificada de 1000 ppm. La concentración de Cr (VI) fue  $171 \text{ ppm} \pm 7 \text{ ppm}$ .

La prueba de infiltración se realizó con una lámina de 5 cm (123.15 mL) de la solución de Cr (VI). Se utilizó una carga permanente y variable durante la prueba, siguiendo el procedimiento descrito por Zavala *et al.* (2003) y Chávez *et al.* (2010).

Durante el régimen permanente, la lámina de infiltración se restauró cada 0.5 cm (12.31 mL) con la solución de Cr, se registraron los tiempos hasta la primera gota de lixiviación y se procedió a cambiar la prueba al régimen de carga variable, registrando los tiempos de abatimiento de la lámina de infiltración. Durante la prueba se registraron los tiempos de lixiviación, cada 2 mL, de igual manera la humedad y temperatura presentada en el transcurso de la prueba.

Al finalizar la prueba de infiltración, se cortó cada sección de las columnas para analizar la concentración cromo hexavalente retenido en el suelo.

La duración de las pruebas de infiltración se determinó tomando el tiempo total de la prueba de infiltración de la columna A, duplicando en la columna B este tiempo y triplicándolo el tiempo de la columna A en la columna C.

### **6.2.3 Determinación de la curva de retención de humedad.**

Para la curva de retención de humedad se estimaron los parámetros de forma ( $m$ ) y ( $n$ ) obtenidos a partir de la curva granulométrica (ecuación. 6.1) de acuerdo con Fuentes (1992) y la porosidad total, empleados en la curva de retención de humedad de Van Genuchten.

Los parámetros de contenido de humedad a saturación y porosidad se determinaron usando la siguiente ecuación:

$$\Phi = 1 - \frac{\rho_t}{\rho_o} \quad (6.2)$$

donde  $\Phi$  es la porosidad total ( $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$ ),  $\rho_t$  es la densidad aparente del suelo ( $\text{g cm}^{-3}$ ) y  $\rho_o$  para muchos fines es tomada como la densidad de las partículas de cuarzo ( $2.65 \text{ g cm}^{-3}$ )

Para reducir los parámetros el contenido de humedad residual de acuerdo con Haverkamp *et al.* (2005) puede ser asumido igual a cero ( $\theta_r = 0$ ), el contenido de humedad a saturación puede ser considerado como la porosidad total ( $\theta_s = \Phi$ ).

Estos parámetros se calcularon para poder emplear el software para obtener los parámetros físicos de un medio poro, registrado por Chávez *et al.* (2016).

### **6.2.4 Determinación de la curva de conductividad hidráulica**

Las curvas de conductividad hidráulica se obtuvieron siguiendo los modelos de Fuentes *et al.*, (2003), basados en un modelo general de la geometría fractal descritas en el apartado 3.6.4 (ecuación 3.7, 3.8 y 3.9). De igual manera los parámetros implicados en la ecuación se obtuvieron de la manera descrita anteriormente en el apartado 6.2.3.

### **6.3 Modelación de la transferencia del agua y el transporte de Cr en los tiempos largos y cortos usando las ecuaciones de Richards y advección-dispersión.**

#### **6.3.1 Obtención de la concentración de cromo (Cr) en suelo a diferentes profundidades, y en los lixiviados de las columnas.**

Para poder aplicar la ecuación de advección y dispersión así como realizar las simulaciones se cuantificaron las concentraciones tanto en las cuatros secciones, como en los lixiviados recolectados en diferentes tiempos de cada columna.

##### **6.3.1.1 Preparación de la muestra.**

El método empleado en la digestión de sedimentos para la determinación Cr fue el método descrito en la NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004. Se utilizó un horno de microondas para la digestión del suelo y su posterior análisis.

##### **6.3.1.2 Análisis de Cr en suelo.**

Se analizaron las concentraciones de Cr de los diferentes segmentos de cada columna, por la técnica de Espectrometría de Masas con Plasma Acoplado Inductivamente (ICP-MS).

#### **6.3.2 Análisis de Cr en lixiviados.**

Se analizaron las concentraciones de Cr de los lixiviados recolectados de cada columna durante la prueba de infiltración, a diferentes tiempos mostrados en el apéndice B, utilizando un equipo portátil HI 723 Chromium VI High range de la marca HANNA, basado en la adaptación del método fotométrico de Difenilcarboxidaza del Manual of Water and Enviromental Tecchnology de la ASTM (método D1687-92). Utilizando una reacción entre el cromo hexavalente y un reactivo, disulfato de potasio (HI723-25 de la marca HANNA), causando un tinte morado en la muestra que es cuantificable en un rango de 10 nm a 54 nm.

### **6.3.2 Reproducción de los datos experimentales.**

Se reprodujeron los datos experimentales usando modelación inversa a partir de la información hidráulica (Fuentes, 1992; Zataráin *et al.*, 1998; Chávez *et al.*, 2010). La optimización de los parámetros hidráulicos se determinó mediante la implementación del método Marquardt-Levenberg el cual puede ordenar diferentes datos en la función objetivo.

Con la información recabada de la prueba de infiltración de las propiedades hidrodinámicas del suelo ( $K_s$  y  $\psi_d$ ) (Fuentes, 1992; Zataráin *et al.*, 1998; Chávez *et al.*, 2010), se procedió a analizar la transferencia de agua y el transporte de solutos en el suelo. Para ello, se utilizó la solución de la ecuación advección-dispersión. En cada una de las repeticiones del experimento se encontró el valor de la dispersividad del suelo ( $\lambda$ ), que será el que minimice la suma de los cuadrados de los errores para todo tiempo de simulación realizado. Este parámetro tiene la cualidad de ser único para cada suelo, y varía en función de las propiedades físicas del mismo.

### **6.3.4 Simulaciones.**

Se realizaron simulaciones con la finalidad de analizar el comportamiento del agua y el cromo (Cr) en suelo, en tiempos cortos y largos utilizando el método de Chávez *et al.*, (2011), el software para resolver la ecuación de Richards en 1D y el software para resolver la ecuación advección-dispersión 1D, registrado por Chávez *et al.*, (2016)

Con las características hidrodinámicas obtenidas y el coeficiente de dispersión, se realizaron las simulaciones con el fin de obtener los siguientes datos y características:

- 1) Generación de perfiles de humedad en tiempo cortos y largos en el perfil del suelo.
- 2) Generación de perfiles de concentración de Cr en tiempos cortos y largos en el perfil del suelo.

- 3) Tiempos estimados de llegada de una determinada concentración de Cr a una profundidad de interés, como puede ser la profundidad del manto freático.

## 7. RESULTADOS

### 7.1 Características fisicoquímicas del suelo.

#### 7.1.1 Suelo recolectado

La parcela utilizada para el muestreo se encuentra muy cerca de una carretera federal muy transitada, con lo que se ve expuesta a contaminación difusa, derivada a la exposición de los residuos de la combustión de gasolina y diésel de los autos.

#### 7.1.2 Caracterización fisicoquímica del suelo.

Los resultados obtenidos de la caracterización fisicoquímica del suelo obtenidos mediante la metodología presentada en el apartado 6.1.2 se presentan en el siguiente cuadro

Cuadro 7-1. Caracterización fisicoquímica del suelo

Parámetros fisicoquímicos			
Parámetros	Resultado	Unidades	Interpretación
pH	6.38	.....	Moderadamente ácido: 5.1 - 6.5
Textura	Franco- arenoso	.....	% Arena : 22.33 % Arcilla : 8 % Limo: 69.67
Densidad aparente (Da)	1.37	g cm <sup>-3</sup>	Suelos minerales: Arenosos: >1.32
Contenido de materia orgánica (MO)	1.87	%	Medio: 1.6 – 3.5
Capacidad de intercambio catiónico (CIC)	11.18	meq/100 g	Caolinitas: 3 -15 Micas hidratadas: 10 - 40 Cloritas: 10 – 40
Conductividad eléctrica (CE)	0.12	dS m <sup>-1</sup>	Efectos despreciables de la salinidad: <1.0

Como se observa en los datos del Cuadro 7.1, el suelo utilizado en las columnas presentó un pH moderadamente ácido, debido a esta acidez presente, se puede inferir el efecto en la movilidad de cromo (VI) en la matriz, ya que los metales pesados se transportan más rápidamente en condiciones ácidas facilitando así su movilidad y la biodisponibilidad del mismo exceptuando Cr, As, Mo y Se, los cuales son más móviles en pH alcalinos (Zhang, 2006; NOM, 2012; Khan *et al.*, 2016; Myangan *et al.*, 2017). Considerando lo anterior podemos concluir que la movilidad del Cr (VI) en el suelo utilizado será poca debido al pH presentado.

Por otra parte se observa en el Cuadro 7.1 que la cantidad de materia orgánica presente en el suelo según la NOM-021-SEMARNAT-2000 es considerada media, siendo otra variable que tiene influencia en el transporte de Cr (VI) en la matriz, ya que es un factor importante en la acumulación y disponibilidad de los metales pesados en esta matriz, acomplejando el Cr(VI), con lo cual se ve afectada su movilidad y transporte en suelo reportado también por otros autores como Guzmán y Barretos (2011) y Khan *et al.* (2016). Por lo tanto podemos decir, que tanto la movilidad como el acomplejamiento del cromo hexavalente dependerán del pH y de la cantidad y calidad de materia orgánica presente en el suelo (Khan *et al.*, 2015; Nawab *et al.*, 2016).

Diversos estudios han demostrado también la influencia de características básicas del suelo (textura, materia orgánica) y parámetros de porosidad o permeabilidad de modelos duales que pueden predecir el flujo preferencial tanto del agua así como el transporte de solutos en una escala macroscópica (Børgesen *et al.*, 2006; Jarvis, 2007; Jarvis, 2008; Ghafoor *et al.*, 2013), por lo cual podemos concluir que el cromo hexavalente se transportará preferentemente en suelos con texturas principalmente franco y suelos con muy poca materia orgánica, por lo tanto se considera óptimo para el transporte de cromo según lo descrito anteriormente.

De acuerdo con la clasificación de la USDA, el suelo utilizado es del tipo franco arenoso. La proporción de arcilla presente en el suelo, puede ser un factor

importante de inmovilización del Cr (VI) en el suelo. Por otra parte, el tamaño de poro que presenta el suelo utilizado puede determinar la velocidad de infiltración del Cr (VI) disuelto en la solución del suelo. Así mismo, este tamaño de poro influye en parámetros utilizados para la modelación del transporte del Cr (VI) en el suelo, como son el diámetro de partícula ( $D_d$ ) y los parámetros de forma (m) y (n).

Otro factor a considerar en el suelo es el contenido de humedad inicial, ya que durante el proceso de infiltración este puede afectar tanto el empacado de las columnas con el suelo, como el proceso de infiltración y la obtención de la presión característica y la curva de humedad.

El nivel de CIC indica la habilidad de suelos a retener iones, disponibilidad y cantidad de nutrientes a la planta, su pH potencial entre otras. Estos factores son indicativos de la fertilidad del suelo, como se muestra en el Cuadro 7.1 nuestro CIC es de 11.18 meq/100 g por lo cual se le considera un suelo con baja fertilidad.

Utilizando el CIC del suelo bajo la medición hecha por Grim (1953) en los silicatos laminares del tipo 1:1 y 2:1 empleando acetato de amonio 1N, pH 7.0 podemos determinar el tipo de arcilla presente en la matriz en base a la NOM-021-SERMARNAT-2000, con lo cual se puede inferir que el suelo está conformado de micas hidratadas y/o cloritas. Por otro lado la conductividad eléctrica nos indica los efectos de la salinidad, debido al valor presente en la matriz (Cuadro 7-1) se consideran que su efecto es despreciable.

Otro factor determinante tanto para la modelación matemática como para el suelo es su densidad aparente, ya que es un factor que influye en el flujo de agua en el suelo y el transporte de los contaminantes debido a su relación con la porosidad del suelo y a su vez con la compactación de este. También indica el tipo de suelo, y con los resultados obtenidos indican un suelo franco-arenoso.

### 7.1.3. Curva granulométrica y textura.

Del análisis de laboratorio utilizando el método del hidrómetro de Bouyoucos se obtuvieron los siguientes presentados en el Cuadro 7-2 y la Figura 7.1.

Cuadro 7-2. Diámetro y frecuencia acumulada obtenida para la curva granulométrica

<b>Diámetro (µm)</b>	<b>Frecuencia</b>
<b>2.6726</b>	0.0745
<b>3.7503</b>	0.0896
<b>5.2376</b>	0.1134
<b>7.3250</b>	0.1341
<b>9.9183</b>	0.2106
<b>12.7038</b>	0.3157
<b>16.2400</b>	0.4504
<b>18.3843</b>	0.4737
<b>21.1669</b>	0.5409
<b>26.1907</b>	0.6607
<b>29.5835</b>	0.7191
<b>38.9840</b>	0.7629
<b>74.0000</b>	0.9045
<b>105.0000</b>	0.9359
<b>140.0000</b>	0.9548
<b>250.0000</b>	0.9725
<b>420.0000</b>	0.9876
<b>880.0000</b>	1.0000

En la Figura 7.1 se presenta la curva granulométrica del suelo obtenida ajustada con tres modelos de poro.

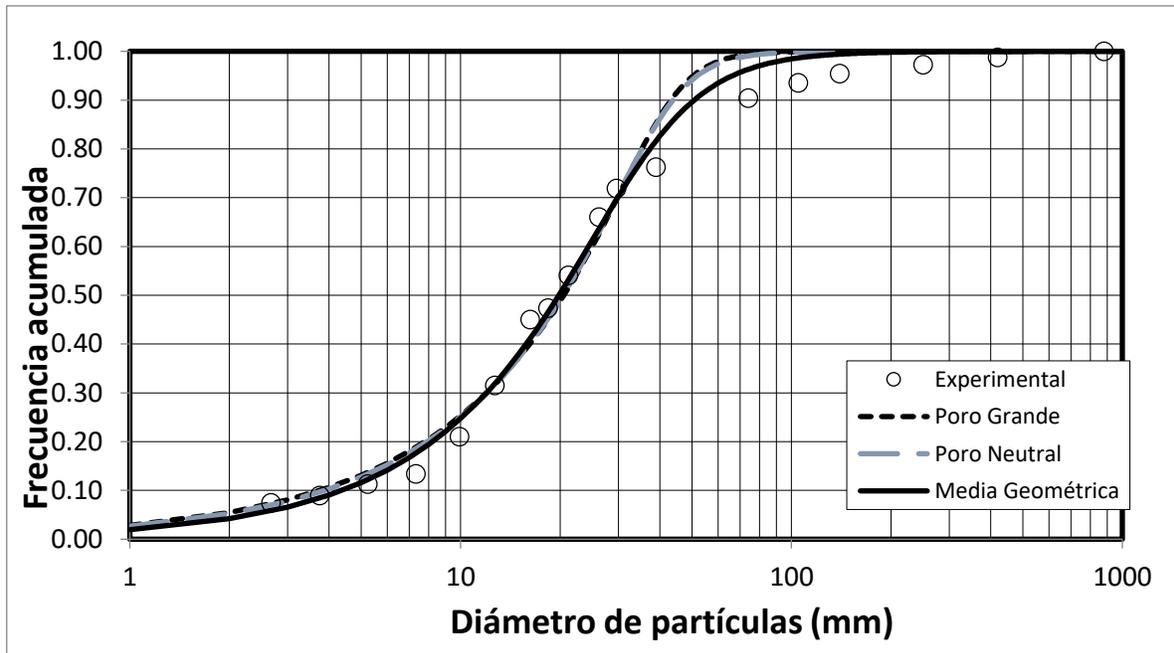


Figura 7.1. Curva granulométrica ajustada con los modelos de poro

De la curva granulométrica experimental se obtuvieron los parámetros de diámetro de partícula ( $D_d$ ), así como los parámetros de forma  $m$  y  $n$  (Cuadro 7-3). También se muestran los resultados del ajuste para los modelos de conductividad, utilizando para tal efecto la ecuación 3.16, 3.17 y 3.18.

Cuadro 7-3. Valores obtenidos de  $D_d$ ,  $m$  y  $n$  para los modelos de conductividad: Poro grande, neutral y media geométrica

Parámetro	Poro grande	Neutral	Media geométrica
$D_d$	42.389	41.348	<b>35.086</b>
$M$	0.1646	0.1896	<b>0.3692</b>
$N$	3.5754	3.1788	<b>1.8540</b>

Para la determinación de las características hidrodinámicas empleadas en el modelo matemático predictor, la cual considerara las pruebas de infiltración presentes en la sección 7.2 y 7.3, se presentan en el Cuadro 7-2, 7-3 y 7-4. El Cuadro 7-4 se presenta la densidad aparente ( $\rho_t$ ), la porosidad volumétrica  $\phi$  (ecuación 6.2) y la dimensión fractal relativa (s) (ecuación 3.9) calculada mediante iteraciones, introduciendo el valor de la porosidad total obteniendo los siguientes valores presentados

Cuadro 7-4. Parámetros físicos del suelo

Parámetro	Valor
$\rho_t$	1.37 g cm <sup>-3</sup>
$\phi$	0.48302 cm <sup>3</sup> cm <sup>-3</sup>
s	0.69063

#### 7.1.4 Determinación de la concentración Cromo (Cr) presente inicial en suelo.

La concentración de Cr (VI) se determinó en el suelo antes y después de la prueba de infiltración, en la cual se emplearon soluciones de estándar de Cr (VI), a través de las columnas, como se presenta en el apartado 6.3.1.

Utilizando la técnica de ICP-masas en las muestras de suelo antes de la prueba de infiltración se determinó si había presencia de Cr en la matriz obteniendo como resultado una concentración presente de 36.1 mg kg<sup>-1</sup> de Cr total. En consecuencia, el aporte del Cr en el suelo pudo haber interactuado con las concentraciones de Cr presentes inicialmente en el suelo durante la prueba de infiltración.

Gracias a la localización de la parcela donde se recolectó el suelo utilizado en el estudio podemos inferir que la contaminación por cromo y otros metales pudo provenir de la combustión de combustibles de automóviles y quema de carbón y transporte de partículas de estos contaminantes depositados en el suelo sobre todo debido a su localización muy próxima a una carretera. Esto ha sido ampliamente reportado por otros autores (Montoya *et al.*, 2010; Khan *et al.*, 2011; Vithanage *et al.*, 2014; Kierczak *et al.*, 2016) en estudios similares.

En el apartado 7.3 se muestran los resultados de las concentraciones de cromo hexavalente en las diferentes secciones de las columnas después de la prueba de infiltración.

## 7.2 Determinación de las propiedades hidrodinámicas del suelo.

### 7.2.1 Preparación del experimento.

La densidad aparente de  $1.37 \text{ g cm}^{-3}$  del suelo se consideró para el cálculo de masa de cada sección como se menciona en el apartado 6.2.1, en capas de 2 cm de suelo y compactadas con un mazo con un peso de 1.5 kg para cada columna. Se determinó el contenido de humedad inicial del suelo usado en cada columna durante la prueba de infiltración que se obtuvo se muestra en el siguiente Cuadro 7-5.

Cuadro 7-5. Valores obtenidos del contenido de humedad ( $\theta_0$ )

Columna	Contenido de humedad ( $\theta_0$ )
<b>A</b>	$0.04795 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$
<b>B</b>	$0.04658 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$
<b>C</b>	$0.04658 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$

Como se puede observar el contenido de humedad inicial de la columna A difiere de la columna B y de la columna C, esto debido a la humedad ambiental presente los días de análisis del contenido gravimétrico de humedad por cada columna

utilizada, por lo que se puede atribuir a que el suelo se humedece proporciones menores.

Los valores de los parámetros físicos del suelo: porosidad total del suelo ( $\Phi$ ), el contenido de humedad a saturación ( $\theta_s$ ), el contenido de humedad residual ( $\theta_r$ ), la dimensión fractal relativa del suelo ( $s$ ), los cuales fueron obtenidos para uso posterior en la determinación de las características hidrodinámicas del suelo y la modelación de la transferencia de agua y transporte de cromo en suelo.

### 7.2.2 Prueba de infiltración

El volumen calculado colocado de peso seco en columnas utilizadas durante la prueba de infiltración fue de  $197.0407 \text{ cm}^3$ . La prueba de infiltración se realizó siguiendo dos regímenes: carga variable y carga permanente con una lámina de 4.5 cm, utilizando el tiempo de duración de la prueba de la columna A que correspondió a un tiempo de 193 minutos, duplicando el tiempo de duración para la columna B y el triple para la columna C como se ilustra en la Figura 7.2, Figura 7.3 y Figura 7.4.

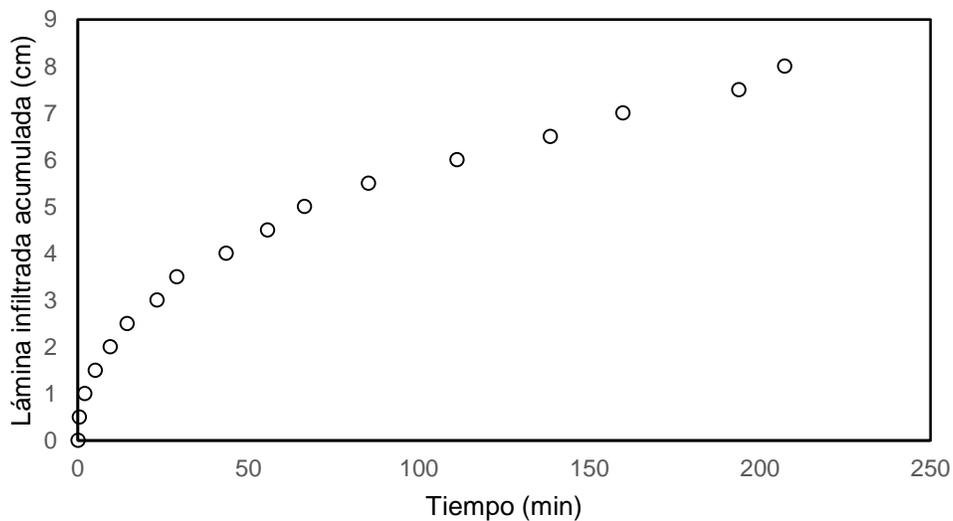


Figura 7.2. Lámina infiltrada acumulada: Columna A

Se puede observar en la Figura 7.2 el comportamiento de la solución de agua y cromo hexavalente en el suelo al ser transferida, en la cual podemos apreciar que

en los primeros 40 minutos se infiltra la solución rápidamente, es decir, en un periodo de tiempo corto se puede empezar a apreciar la velocidad de avance de cromo al infiltrarse en el suelo y después de un lapso de tiempo el suelo se empieza a saturar con la solución.

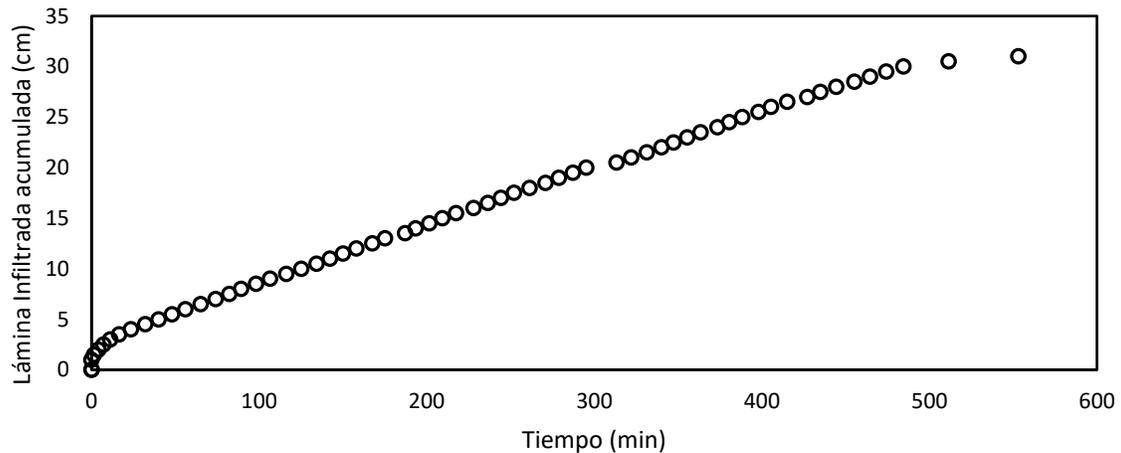


Figura 7.3. Lámina infiltrada acumulada: Columna B

En la Figura 7.3 y Figura 7.4 se puede observar a la columna B y C con suelo llegar a la saturación, también se muestra que después de un tiempo superior a los 100 minutos la velocidad de infiltración va disminuyendo hasta alcanzar un régimen permanente debido a la saturación del suelo de las columnas. En la Figura 7.3 se puede apreciar más claramente este fenómeno cuando los puntos después del minuto 480 empiezan a formar una recta y los tiempos entre dichos puntos son mayores.

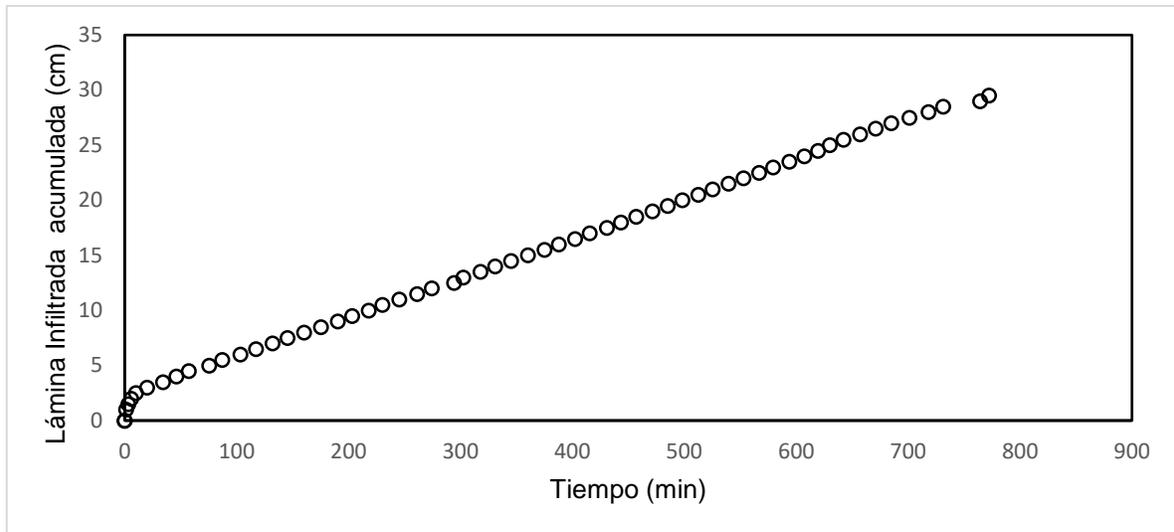


Figura 7.4. Lámina infiltrada acumulada: Columna C

### 7.2.3 Determinación de la curva de retención de humedad

Los valores correspondientes de  $\psi_d$  utilizados para la determinación de la curva de retención de humedad se obtuvieron mediante el problema inverso para los modelos de poro grande, poro de la media geométrica y poro neutral utilizando la condición de Dirichlet en la frontera superior, este tipo de condición se impone cuando se conoce valor de una variable dependiente de la ecuación diferencial para todo tiempo en la superficie del suelo (Lugli y Mahler, 2016), y Newman para la frontera inferior, es decir, establece el valor del flujo y su concentración a través de la frontera para todo tiempo, es decir, cuando se conoce la derivada de la función. A partir los valores obtenidos de los datos de infiltración medidos se emplearon incrementos temporales y espaciales para el proceso de simulación con valor de  $\Delta z: 1 \times 10^{-8}$  cm y  $\Delta t: 1 \times 10^{-6}$  min para los modelos de poro neutral y de la media geométrica y para el poro grande valores de  $\Delta z: 1 \times 10^{-7}$  cm y  $\Delta t: 1 \times 10^{-6}$  min.

El parámetro de escala  $\psi_d$  asociado al proceso de humedecimiento del suelo, fue obtenido mediante el método de optimización no lineal de minimización Levenberg-Marquardt (Marquardt, 1963) con el modelo de Van Genuchten para la curva de retención de humedad con tres modelos de poro para cada columna como se muestra en el Cuadro 7-6, Figura 7.5, Figura 7.6 y Figura 7.7.

Cuadro 7-6. Valor del parámetro de ajuste para la curva de humedad

Modelos	Parámetro de ajuste		
	Columna A	Columna B	Columna C
	$\psi_d$ (cm)	$\psi_d$ (cm)	$\psi_d$ (cm)
<b>Poros Grande</b>	-5	-3.5	-2
<b>Poros de la Media Geométrica</b>	-7	-4.5	-1.5
<b>Poros Neutral</b>	-4	-4	-2

Como se puede apreciar en el Cuadro 7-7 valores de  $\psi_d$  pequeños, esto se debe a las características del suelo utilizado principalmente en caso de  $\psi_d$  bajos, el cual se ve influenciado por la textura. En los valores obtenidos se puede notar una diferenciación entre cada columna que puede ser adjudicada a la concentración de cromo presente en la solución usada al igual que a los fenómenos de adsorción predominantes en el suelo (Curtis *et al.*, 1997). Con ello se puede concluir que al aumentar la concentración del cromo en el suelo  $\psi_d$  aumenta, por lo tanto el Cr del suelo se desplaza a través del perfil del suelo ocasionando la disminución de  $\psi_d$ .

En la Figura 7.5, Figura 7.6 y Figura 7.7 se muestran la curva de humedad obtenida con diversos modelos como son el poro grande, la media geométrica y el poro neutral.

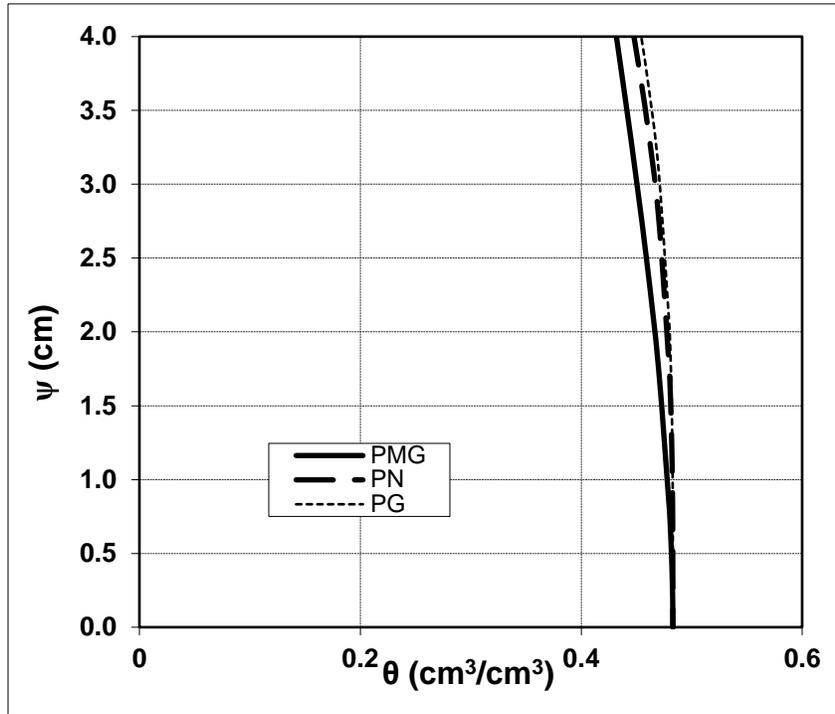


Figura 7.5. Curva característica de humedad con tres modelos de poro: Columna A.

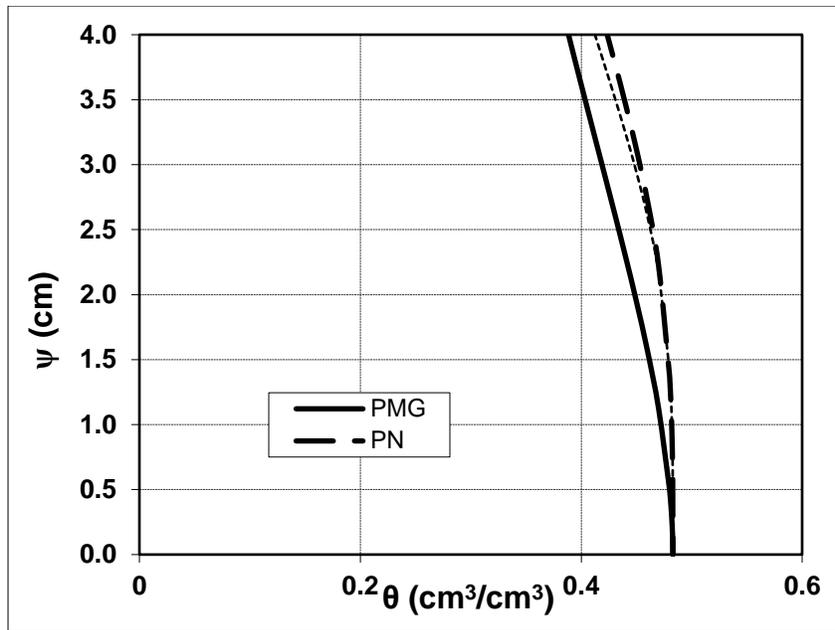


Figura 7.6. Curva característica de humedad con tres modelos de poro: Columna B.

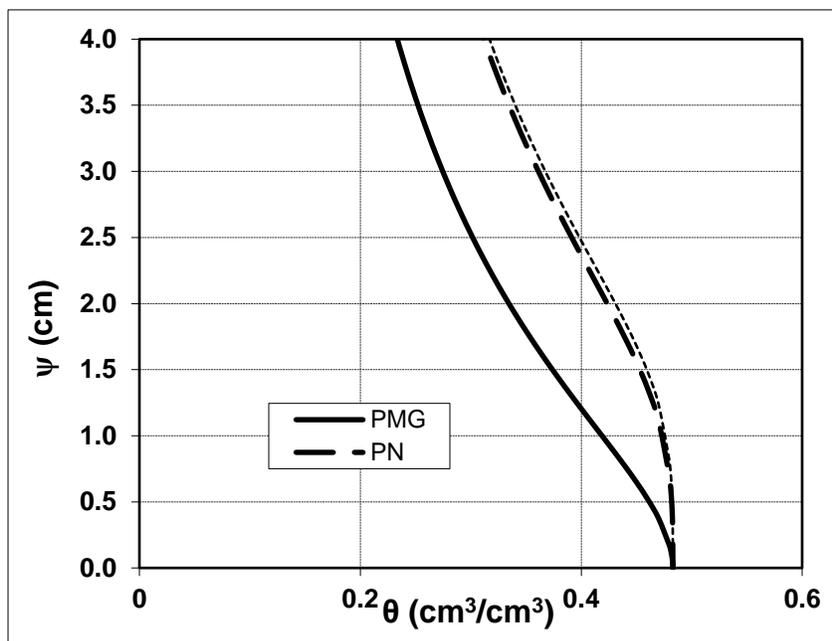


Figura 7.7. Curva característica de humedad con tres modelos de poro: Columna C.

El comportamiento de la curva de retención obtenido en cada una de las columnas es diferente, debido principalmente a que los valores de presión ( $\psi_d$ ) fueron diferente en cada uno de ellos.

#### 7.2.4 Determinación de la curva de conductividad hidráulica

La determinación de la conductividad hidráulica es esencial para la modelación de la transferencia de agua y el transporte de Cr (VI) en suelo, estando en función de la densidad aparente, textura, etc (Ghanbarian *et al.*, 2015 Ghanbarian y Hunt; 2017; Ghanbarian *et al.*, 2017). Debido a la importancia en el modelo propuesto para las simulaciones, se determinó la curva de conductividad hidráulica utilizando los modelos de poro propuestos por Fuentes *et al.*, (2001) con los valores obtenidos presentados en el Cuadro 7-8.

Cuadro 7-7. Valor del parámetro de ajuste para la curva de conductividad hidráulica

Modelos	Parámetro de ajuste		
	Columna A	Columna B	Columna C
	$K_s$ ( $\text{cm min}^{-1}$ )	$K_s$ ( $\text{cm min}^{-1}$ )	$K_s$ ( $\text{cm min}^{-1}$ )
<b>Poros Grande</b>	0.017	0.024	0.017
<b>Poros de la Media Geométrica</b>	0.02	0.026	0.02
<b>Poros Neutral</b>	0.019	0.022	0.015

A partir de los valores presentados en el Cuadro 7-8 se obtuvieron las curvas de conductividad hidráulica presentadas en las Figura 7.8, Figura 7.9 y Figura 7.10 utilizando tres modelos de poro.

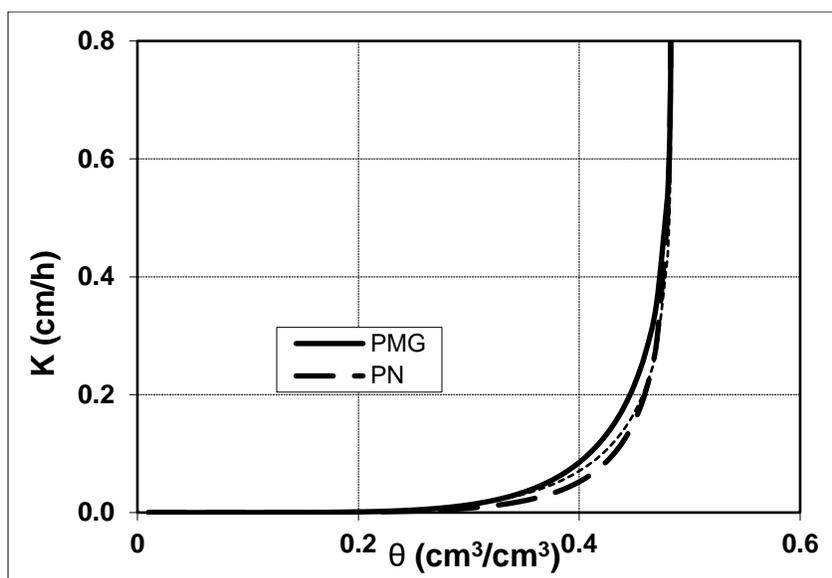


Figura 7.8. Curva de conductividad hidráulica obtenida con tres modelos de poro: Columna A

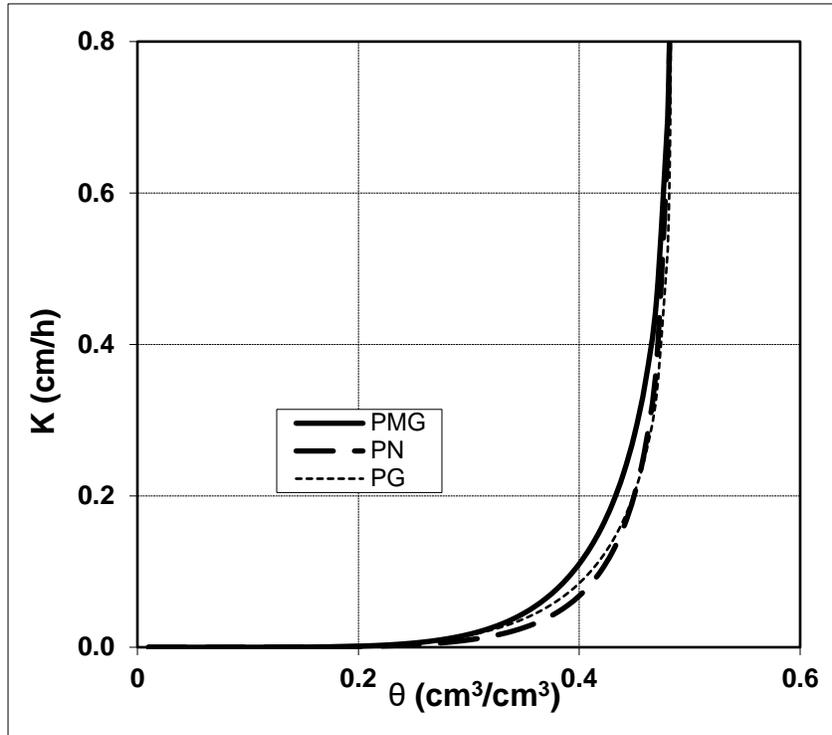


Figura 7.9. Curva de conductividad hidráulica obtenida con tres modelos de poro: Columna B.

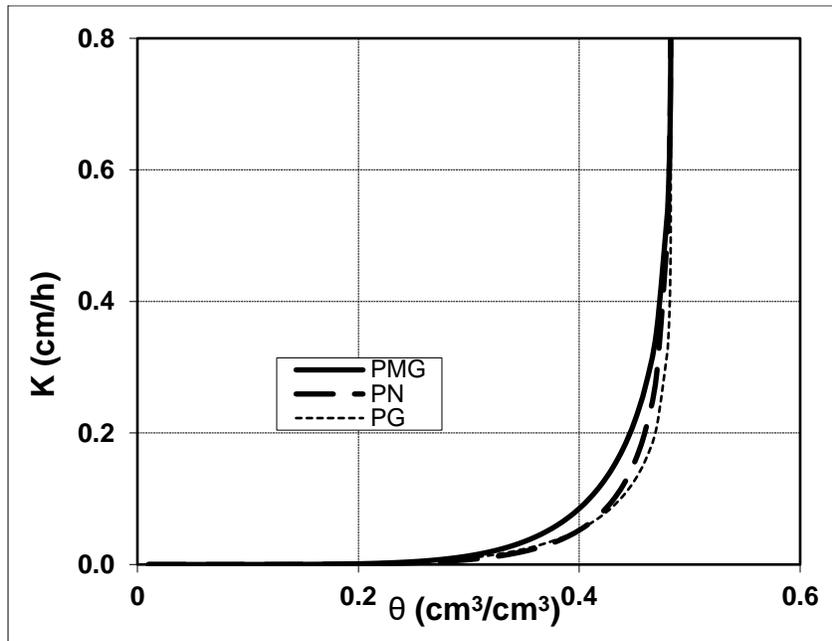


Figura 7.10. Curva de conductividad hidráulica obtenida con tres modelos de poro: Columna C.

Los modelos de conductividad no tuvieron la misma variación que se obtuvo con los modelos de la curva de retención de humedad, ya que la densidad aparente se mantuvo homogénea en las tres columnas lo que propicio que la saturación efectiva se mantuviera constante.

### **7.3 Modelación de la transferencia del agua y el transporte de Cr en los tiempos largos y cortos usando las ecuaciones de Richards y advección-dispersión.**

#### **7.3.1 Obtención de la concentración de cromo (Cr) en suelo a diferentes profundidades, y en los lixiviados de las columnas**

##### **7.3.1.1 Análisis de Cr en suelo.**

La capacidad de absorción y desorción de los suelos dependerá en gran medida del contenido de materia orgánica, carbonatos y oxihidróxidos de hierro y magnesio, la proporción y tipo de arcillas, capacidad de intercambio catiónico, pH y Eh, textura, permeabilidad y actividad microbiana (Poggi Varaldo *et al.*, 2002; Galán y Romero, 2008). Con lo anterior se puede concluir que el transporte del cromo hexavalente se verá afectado debido a estas características del suelo en la cual la movilidad y la dispersión del Cr (VI) se ven influenciada.

Por lo tanto para poder simular este fenómeno en modelo de transporte de solutos utilizando la advección- dispersión en la modelación matemática, se determinó las concentraciones de cromo hexavalente presentes en las secciones de cada columna utilizadas en la prueba de infiltración como se presente en los Cuadro 7-8, Cuadro 7-9 y Cuadro 7-10.

Cuadro 7-8. Concentraciones de cromo hexavalente en suelo. Columna A

<b>Columna A</b>	
<b>Muestras</b>	<b>Cromo (mg kg<sup>-1</sup>)</b>
<b>Sección A1</b>	193.0
<b>Sección A2</b>	163.7
<b>Sección A3</b>	141.8
<b>Sección A4</b>	123.2

Se puede observar en el Cuadro 7-8 que la concentración de Cr (VI) mayor fue encontrada en la sección superior de la columna A, por lo cual se infiere que el suelo retiene el cromo mayormente de manera superficial en periodos cortos de infiltración. Legret *et al.* 1998 y Pastrana-Corral *et al.* 2017 describen que el movimiento descendente del Cr es relativamente pequeño ya que permanece en el horizonte superficial del suelo como se puede observar en el Cuadro 7-9 y Cuadro 7-10 en las cuales las concentraciones mayores se encuentran en la sección 2 de suelo de las columnas B y C, las cuales se fueron los tiempos más largos de la prueba de infiltración.

Cuadro 7-9. Concentraciones de cromo hexavalente en suelo. Columna B

<b>Columna B</b>	
<b>Muestras</b>	<b>Cromo (mg kg<sup>-1</sup>)</b>
<b>Sección B1</b>	183.6
<b>Sección B2</b>	190.0
<b>Sección B3</b>	172.4
<b>Sección B4</b>	187.8

La movilidad del Cr (VI) como de otros metales pesados es muy baja, por lo que quedan acumulados en los primeros centímetros de suelos para luego ser lixiviado a los horizontes inferiores en cantidades menores como se puede observar en los resultados obtenidos de la prueba de infiltración en donde los primeros 4 cm de suelo están las mayores concentraciones y el resto es transportado a las otras secciones del suelo.

Cuadro 7-10. Concentraciones de cromo hexavalente en suelo. Columna C

<b>Columna C</b>	
<b>Muestras</b>	<b>Cromo (mg kg<sup>-1</sup>)</b>
<b>Sección C1</b>	188.9
<b>Sección C2</b>	202.7
<b>Sección C3</b>	163.7
<b>Sección C4</b>	189.4

Debido a la escasa capacidad de intercambio catiónico de Cr (VI) en el suelo y que es un metal pesado poco soluble (Jordán *et al.*, 2006; González Rodríguez *et al.*, 2009) por lo que la concentración del cromo hexavalente en el suelo se verá afectada por el desplazamiento ocasionado por cada nueva entrada de flujo en el sistema. También la concentración del Cr (VI) se encuentra influenciada por otros factores como la presencia de otros iones en el suelo, tipo y número de lugares disponibles de adsorción, acomplejamientos con otros metales presentes en suelo y las propiedades particulares de suelo (pH, temperatura, humedad, potencial redox, etc.). Este comportamiento se ve reflejado en la siguiente figura

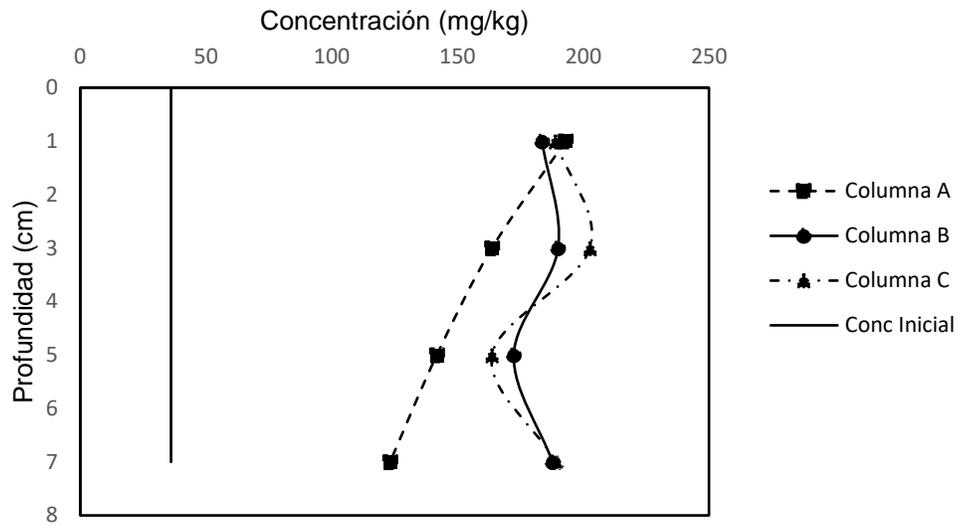


Figura 7.11 Concentraciones de cromo a diferentes profundidades del suelo.

### 7.3.1.2 Análisis de Cr en lixiviados.

El estudio del transporte de solutos requiere de la determinación de las concentraciones del soluto tanto en suelo como en los lixiviados generados durante el proceso de infiltración por lo tanto, se determinaron las concentraciones de cromo de las muestras durante la prueba de infiltración, como se muestran en las

Figura 7.12, Figura 7.13 y Figura 7.14

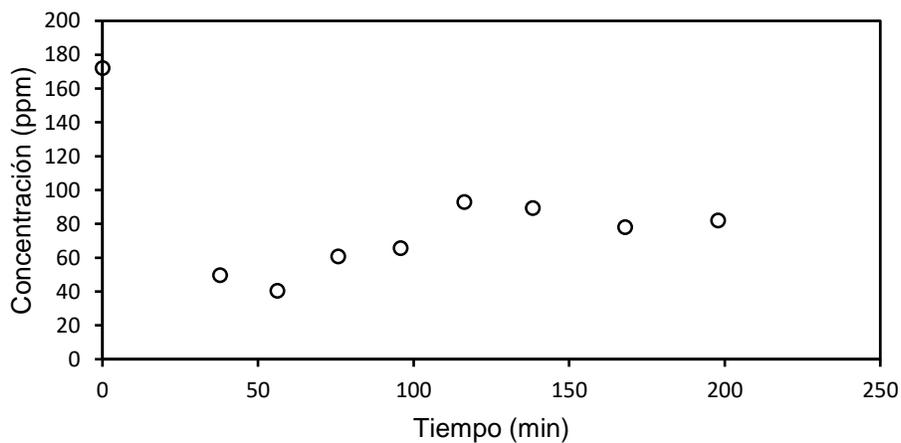


Figura 7.12. Concentraciones de Cr obtenidas de lixiviados: Columna A

En la Figura 7.12 se puede apreciar claramente la disminución de la concentración de la solución cromo ( $171 \text{ ppm} \pm 7 \text{ ppm}$ ) en el paso del tiempo al ser lixiviado por el suelo. La disminución de la concentración de cromo en los lixiviados indica la absorción de cromo en el suelo de la columna siendo mayor la retención del metal pesado en los primeros 90 minutos ya que el suelo cuenta con sitios y componentes para su absorción (materia orgánica, nitratos, etc.).

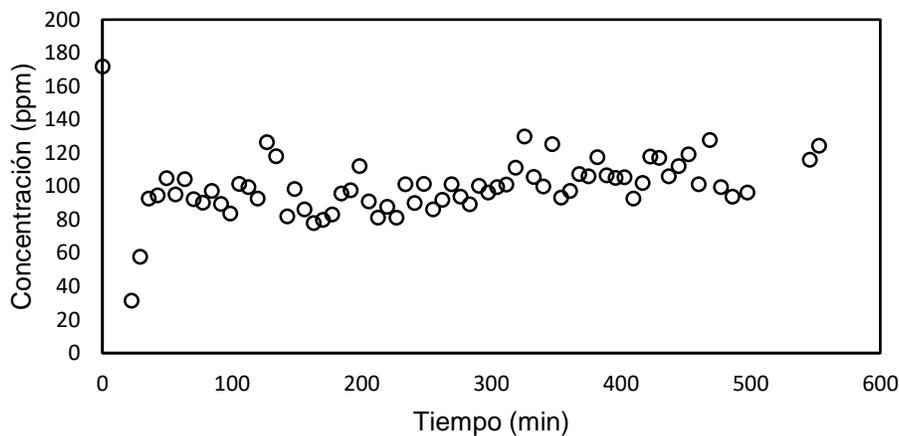


Figura 7.13. Concentraciones de Cr obtenidas de lixiviados: Columna B

En la Figura 7.13 y Figura 7.14 se puede observar que las concentraciones de los lixiviados son menores que la solución de cromo utilizada principalmente en tiempos de infiltración cortos mientras que al aumentar el tiempo a periodos más largos, se puede observar un incremento en la concentración de los lixiviados, lo que indica que el suelo de las columnas se va saturando, disminuyendo así la capacidad natural del suelo de amortiguación del contaminante (Ortiz-Bernad *et al.*, 2004).

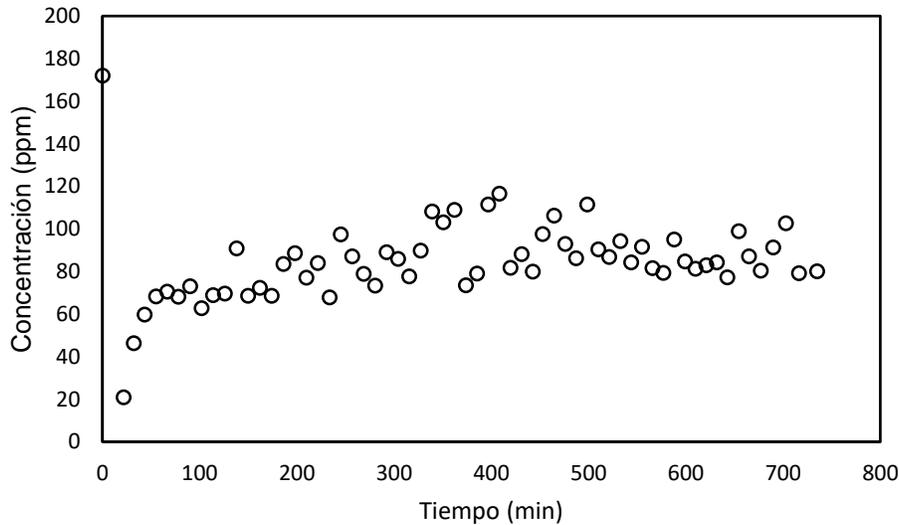


Figura 7.14. Concentraciones de Cr obtenidas de lixiviados: Columna C

Es interesante señalar que durante el proceso de recolección de lixiviados la columna B fue de la cual se obtuvieron una cantidad mayor de muestras pero los rangos presentes de cromo fueron mayores a los presentados en la columna C, una de las causas posibles debido a este comportamiento representado en la

Figura 7.14 puede ser atribuida al aumento de temperatura durante la prueba de infiltración, ya que autores como Stumm y Morgan (1996) y Gao *et al.*, (2001) han descrito que estas diferencias pueden ser debido a que las reacciones químicas son influenciadas por la temperatura ambiente complicando el proceso de transporte en sistemas multicomponentes como el suelo.

No obstante es importante señalar que autores como Navarro *et al.* (2014) y Guzmán y Barretos (2011) han reportado que el favorecimiento de la movilidad del Cr (VI), como el lavado y lixiviación del suelo, es debido principalmente al pH, un bajo contenido de materia orgánica y altas temperaturas.

### 7.3.2 Reproducción de los datos experimentales.

El uso de modelos es ampliamente usado debido a su gran utilidad para poder resolver los problemas del transporte de contaminantes en suelo y el manto freático. Adicionalmente cuando se modela el transporte de solutos se relaciona varios parámetros al flujo, transporte y transferencia que deben ser estimadas (Köhne *et al.*, 2009).

La reproducción de la lámina infiltrada estimada con los diferentes modelos utilizados, se reproduce con distintas aproximación para cada columna siendo las aproximaciones simuladas de la columna A la más alejada con respecto a las otras dos columnas como se muestra en la Figura 7.15, esto fue debido principalmente al ajuste de los datos experimentales a los modelos teóricos.

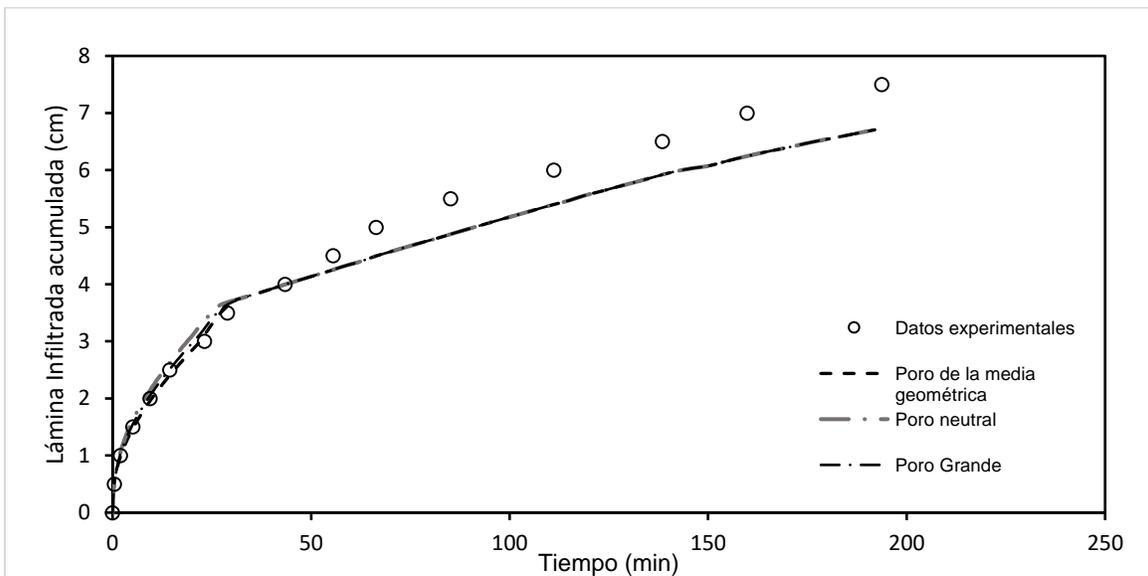


Figura 7.15. Lámina infiltrada con tres modelos de poro: Columna A

Por otra parte, las simulaciones de la lámina infiltrada de las columnas B y C son muy aproximadas a los datos obtenidos de la prueba de infiltración como se puede observar en la Figura 7.16 y Figura 7.17 donde las aproximaciones de los tres modelos de poro son similares a los datos experimentales.

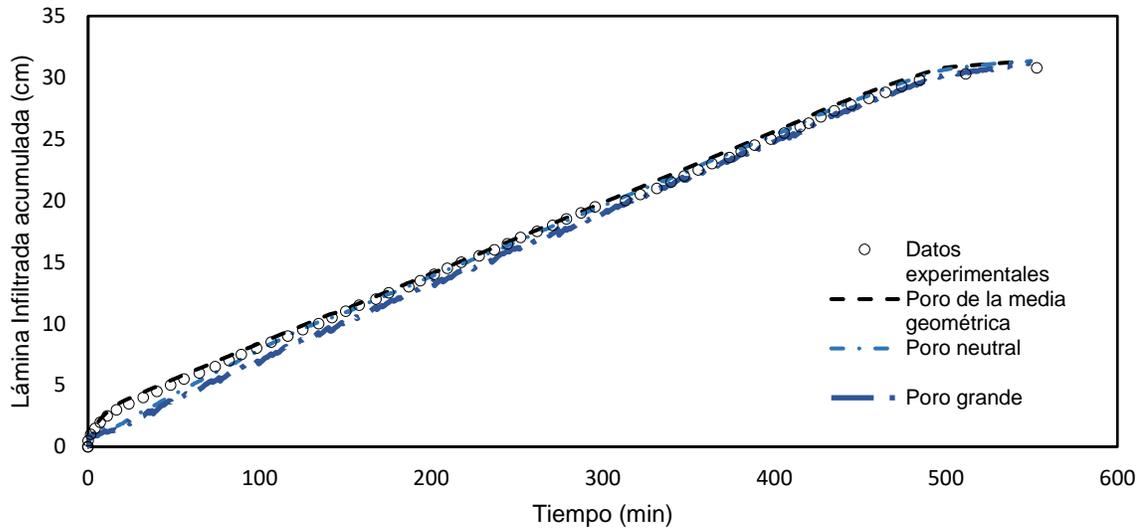


Figura 7.16. Lámina infiltrada con tres modelos de poro: Columna B

Así también la simulación de los valores obtenidas de la infiltración de la columna A se consideró como el tiempo corto, mientras que los valores obtenidos de las columna B y C se consideraron como los tiempos largos en la prueba experimental y la simulación teórica, en donde los tiempos cortos corresponden a la velocidad de infiltración y los tiempos largos representan la constante de infiltración.

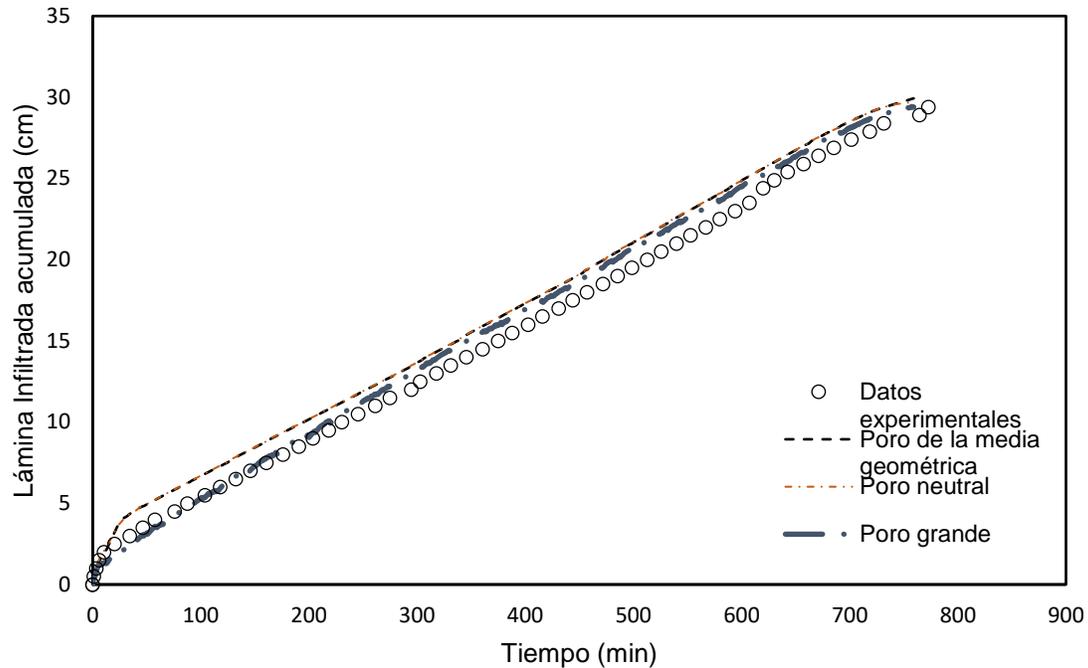


Figura 7.17. Lámina infiltrada con tres modelos de poro: Columna C

Con base en la reproducción de los datos experimentales utilizando los modelos de poros, se optó por el modelo de poro de la media geométrica, ya que es el que mejor modelo para reproducir los datos experimentales obtenidos en las simulaciones.

### 7.3.3 Simulaciones.

La dispersividad es un parámetro que permite establecer zonas de mayor o menor incremento del medio estudiado en su fase móvil permitiendo comparar diversos comportamientos. (Fernández y Rodríguez, 2011; Shahmohammadi-Kalalagh y Beyrami. 2015). Por lo cual la obtención del coeficiente de dispersividad ( $\lambda$ ) para el cromo es fundamental para conocer su transporte en el suelo, el cual se obtuvo a partir de las ecuaciones de advección-dispersión.

En el Cuadro 7-12 se muestran los valores obtenidos del coeficiente de dispersividad ( $\lambda$ ) para cada columna, obtenidos a partir del modelo fractal del poro de la media geométrica.

Cuadro 7-11. Valores del coeficiente de dispersividad ( $\lambda$ )

<b>Columna</b>	<b>Coeficiente de dispersividad (<math>\lambda</math>) (cm)</b>
<b>A</b>	0.0038
<b>B</b>	0.0004
<b>C</b>	0.0006

Los valores obtenidos de dispersión del cromo fueron bajos como se muestra en el cuadro anterior, resultados similares han sido reportados por Guiza (2001) y Fernández y Rodríguez (2011) los cuales describen una baja dispersión del cromo en suelo y sedimentos utilizando la ecuación advección-dispersión. Con los resultados obtenidos se puede concluir que este metal pesado se mantendrá en la superficie por periodos de tiempo mayores.

Con los valores de dispersión se realizaron simulaciones empleando los tiempos de infiltración de cada columna respectivamente como se muestra en las Figura 7.18, Figura 7.19 y Figura 7.20, simulando el fenómeno de transporte de cromo que ocurre en las columnas. En cada figura se empleó la nomenclatura del tiempo inicial, para describir la simulación del transporte de Cr cuando se introduce un primer volumen a la columna con una concentración inicial de  $171 \text{ mg kg}^{-1}$ , los tiempos 2, 3 y 4 describen el movimiento del Cr a través de la columna cuando se le agrega un nuevo pulso al sistema. Por otra parte los tiempos finales describen el comportamiento del cromo a través de la columna y su dispersión.

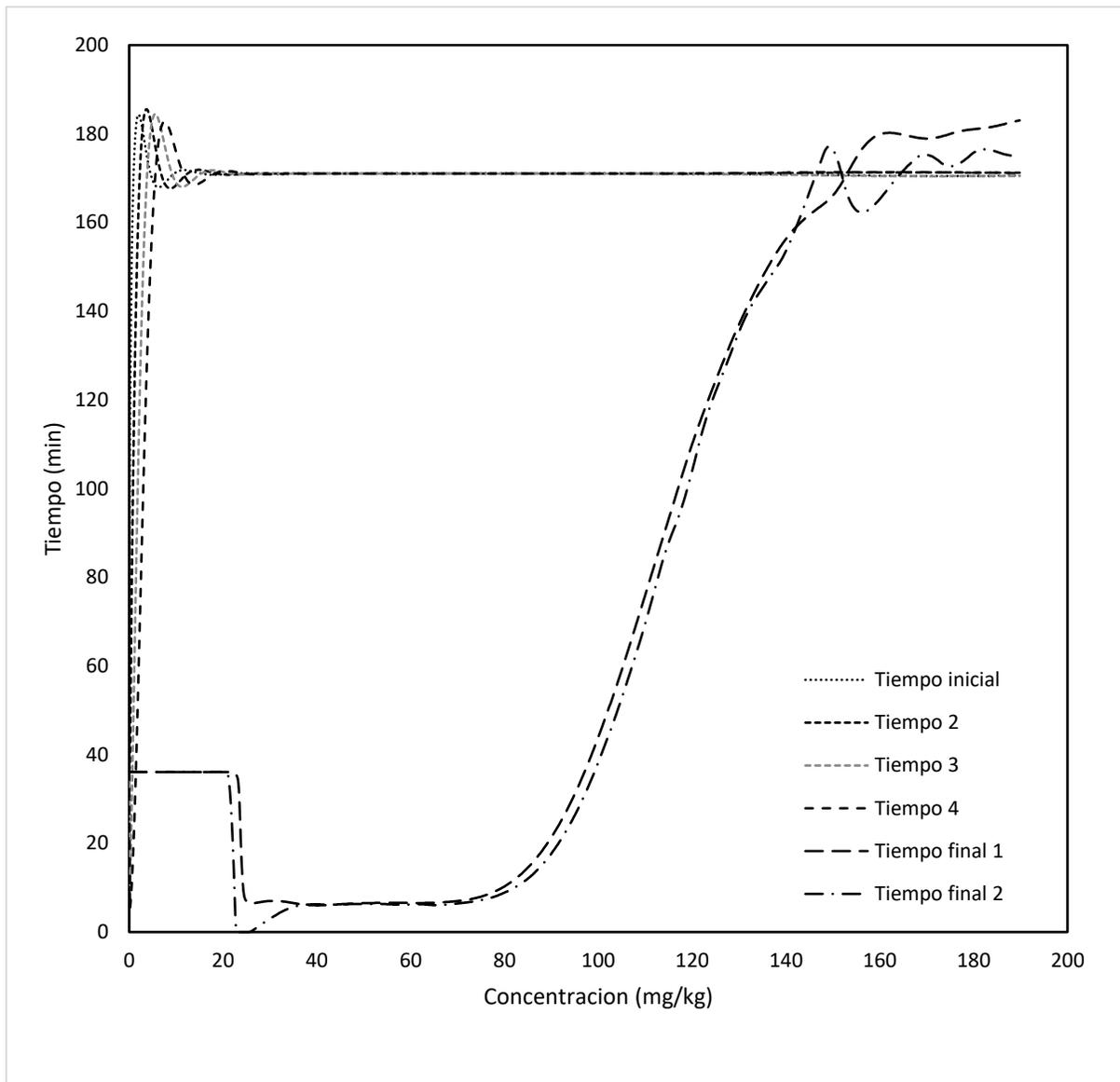


Figura 7.18. Simulaciones del fenómeno de advección-dispersión del Cr: Columna A.

En la figura 7.18 se puede observar el comportamiento del Cr en el tiempo inicial, en el cual la concentración del soluto en se va desplazando a través de la columna, esto es debido al bajo coeficiente de dispersividad y al movimiento del cromo en suelo. Se puede apreciar que en periodos cortos de tiempo, la concentración de cromo aumenta rápidamente en el suelo debido a los fenómenos de adsorción

mientras que en el tiempo final se muestra un incremento lineal en la parte superior de la columna. Este comportamiento es similar al obtenido experimentalmente (Figura 7.11), lo anterior puede atribuir a la capacidad de amortiguación natural del suelo y a la concentración del flujo de entrada. Por otra parte, cuando el suelo se empieza a saturar se puede observar en las concentraciones obtenidas del suelo, que en las secciones media y final de la columna A queda retenida la mayor cantidad de Cr, este comportamiento se puede apreciar a partir del minuto 80

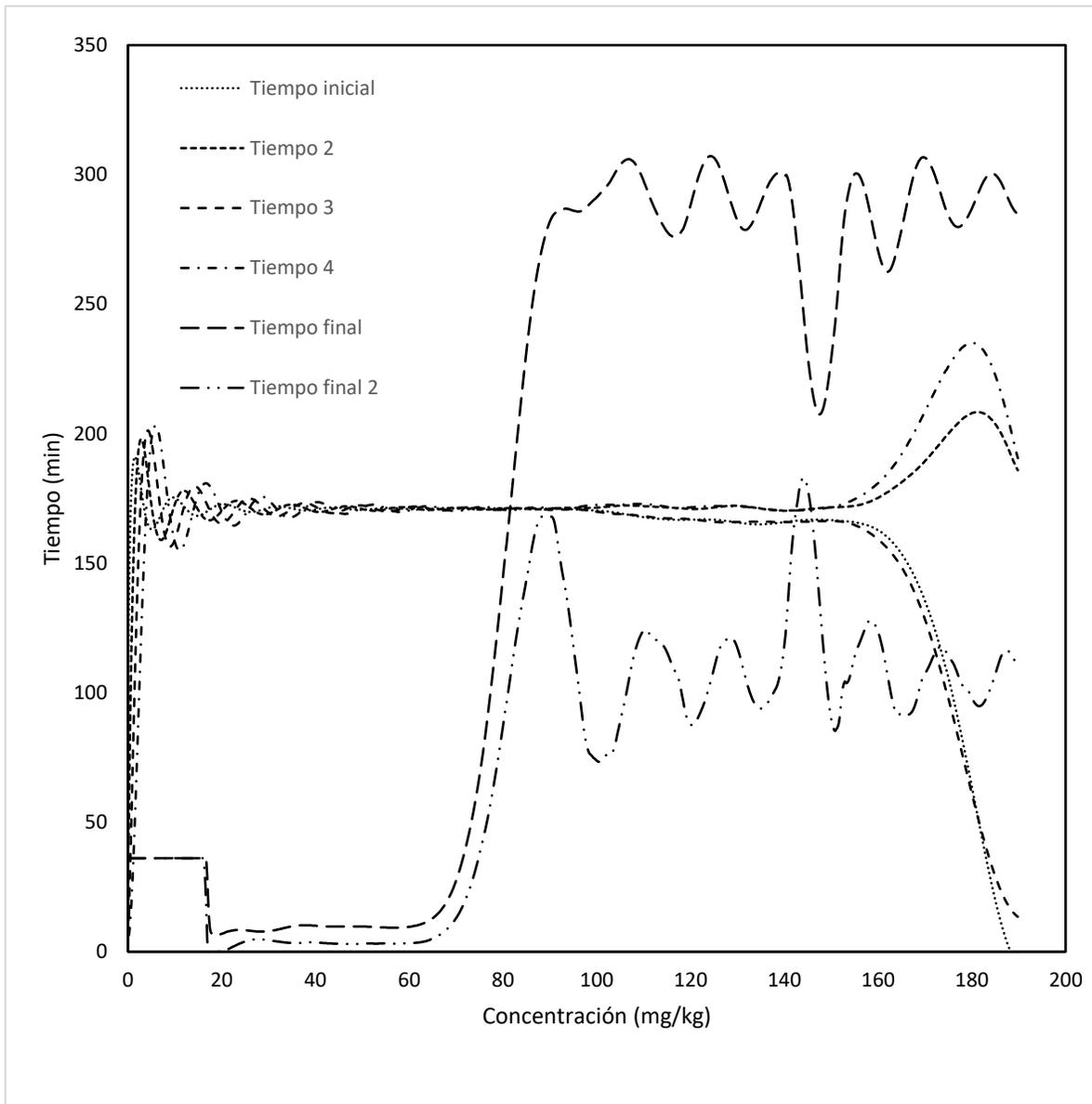


Figura 7.19. Simulaciones del fenómeno de advección-dispersión del Cr: Columna B.

Se observa similitudes en el comportamiento de la columna A con la columna B en el tiempo inicial, este comportamiento indica que el Cr se adsorbe en el suelo en la parte superficial del perfil y se va desplazando a niveles inferiores para ambas columnas. Por otra parte, en la columna B, los tiempos finales indican que al incrementar el tiempo y la entrada de flujo a la columna, el cromo retenido se va desplazando, como observada en las ondas de la figura 7.19.

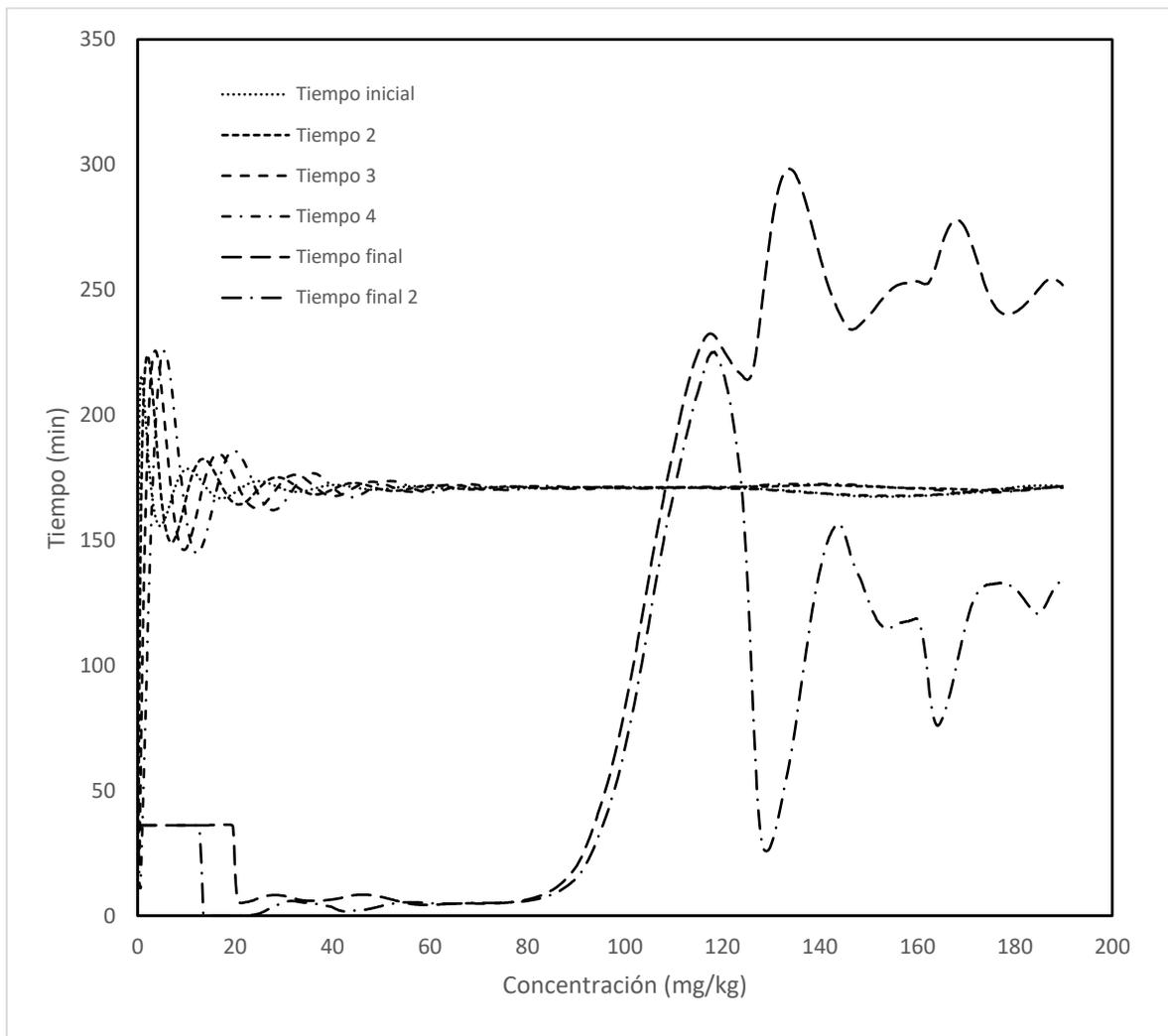


Figura 7.20. Simulaciones del fenómeno de advección-dispersión del Cr: Columna C.

En la Figura 7.21 se simuló un lavado de suelo con un perfil de 8 cm, con discretizaciones de  $\Delta t$ :  $1 \times 10^6$  min y  $\Delta z$ :  $1 \times 10^7$  cm. Se usó el modelo de Van Genuchten (1980) y el modelo de la media geométrica para la curva de conductividad hidráulica. En esta figura se puede observar el comportamiento del contaminante usando el régimen de carga permanente, en el cual se puede apreciar que en los primeros 20 minutos empieza a disminuir la concentración de Cr y que con el paso del tiempo este metal pesado se transporta a zonas inferiores. El comportamiento que sigue la simulación con este metal pesado, permite crear un escenario de contaminación de los mantos freáticos en la zona donde fue recolectada esta muestra de suelo, además, si las descargas son permanentes la concentración en capas inferiores aumentará con el tiempo y los daños serán irreversibles. Sin embargo, la velocidad de transporte a las capas inferiores está en función de las condiciones del terreno (textura, densidad aparente) y de la velocidad de infiltración.

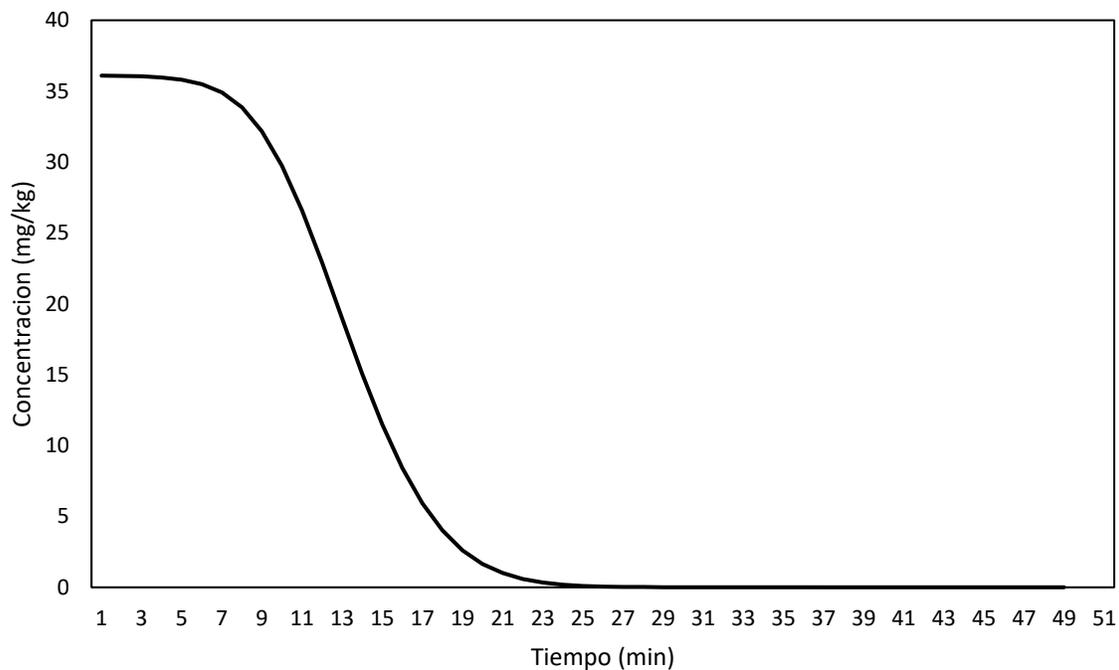


Figura 7.21. Ejemplo de un lavado de suelo

Relacionado con lo anterior, se ilustra el caso del lavado de un suelo para el cromo presente y que la dispersión puede ocurrir también a grandes escalas, como por ejemplo es el caso de aguas subterráneas, que deben desviarse cuando se encuentran con zonas con suelos de relativamente baja permeabilidad o por efecto de materiales de diferentes conductividades hidráulicas. En este caso, los tiempos de flujo variables a lo largo de zonas de baja permeabilidad lo que determina la dispersividad.

Con lo ilustrado en las figuras 7.18, 7.19, 7.20 y 7.21 podemos concluir que el cromo hexavalente se desplaza rápidamente en condiciones no saturadas causando que el Cr se mueva a horizontes inferiores en periodos cortos de tiempo, en caso contrario, cuando el suelo se encuentra saturado, el Cr se retiene en las capas superficiales del suelo, lo que conlleva a un mayor riesgo de exposición, y a la salud.

## CONCLUSIONES

Los procesos de la transferencia de agua y transporte de cromo hexavalente en suelo fueron modelados con la finalidad de comprender el riesgo que representa tanto para el medio ambiente como para las personas.

A través de la modelación realizada en este proyecto se puede concluir que en presencia de flujo constante, en periodos de tiempo mayor a 15 minutos, el cromo se puede desplazar con rapidez en suelos francos-arenosos.

El conocimiento de las características hidrodinámicas permitió la simulación de la lámina infiltrada utilizando tres modelos fractales, permitiendo comparar y elegir el más representativo con respecto a los datos obtenidos experimentalmente. El modelo fractal del poro de la media geométrica empleado en las simulaciones de solutos fue escogido debido a que es el más próximo a los datos experimentales.

Los parámetros empleados para la modelación se obtuvieron mediante diferencias finitas y el problema inverso, con discretizaciones de  $\Delta t$ :  $1 \times 10^6$  min y  $\Delta z$ :  $1 \times 10^7$  cm para las aproximaciones.

Las simulaciones se realizaron considerando el modelo de poro de la media geométrica, ya que fue modelo fractal que óptimo para la modelación del transporte de Cr.

Las simulaciones de la ecuación de advección-dispersión se obtuvieron mediante la minimización del coeficiente de dispersión, el cual vario con respecto a cada columna. Los valores obtenidos de dispersión fueron bajos, estos valores oscilaron entre 0.0038, 0.0004 y 0.0006.

Las concentraciones obtenidas en el suelo antes y después de la prueba de infiltración también deben ser tomadas en cuentas ya que la absorción de un contaminante como el cromo, se ve influenciada tanto por las propiedades fisicoquímicas del suelo y sus propiedades hidráulicas.

La baja dispersividad del Cr indica que este metal pesado se puede encontrar en los perfiles superiores del suelo, principalmente en suelos expuestos a pocas lluvias mientras que si se expone a cargas de agua o contaminantes el Cr se va desplazando a los perfiles inferiores, lo cual puede representar un riesgo debido a la posible contaminación del manto freático.

El cromo hexavalente se desplaza rápidamente en condiciones no saturadas a horizontes inferiores en periodos cortos de tiempo, por el contrario en condiciones de saturación se retiene en las capas superficiales, lo que conlleva a un mayor riesgo de exposición, y a la salud.

Finalmente conocer la movilidad y distribución de los metales pesados, como el cromo hexavalente, es de suma importancia ya que nos permite determinar su dispersión en el suelo y la posibilidad de contaminación de aguas subterráneas. Modelar estos fenómenos puede potencialmente predecir procesos de transporte y lixiviación de diversos contaminantes, describiendo el proceso se puede mejorar el desarrollo de opciones de manejo para tratar la contaminación generada por estos.

## **REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.**

Antinoro, C., E. Arnone, y L. V. Noto. 2017. The use of soil water retention curve models in analyzing slope stability in differently structured soils. *Catena* 150: 133-145.

ATSDR, U. 2007. Health assessment guidance manual. Agency for Toxic Substances and Disease Registry.

ATSDR, U. 2007. Toxicological Profile for lead. US Department of Health and Human Services 1: 582.

ATSDR, U. 2012. Review: Toxicological of Chromium. US Department of Health and Human Services.

Augenstein, M., N. Goeppert, y N. Goldscheider. 2015. Characterizing soil water dynamics on steep hillslopes from long-term lysimeter data. *Journal of Hydrology* 529: 795-804.

Averjanov, S. 1950. About Permeability of Subsurface Soils in Case of Incomplete Saturation. *Eng. Collect.* 7, as Quoted by P. Ya. Polubarinova Kochina, *The Theory of Ground Water Movement*, English Translation by JM Roger De Wiest, 1962. Princeton Univ. Press, Princeton, NJ.

Ballesteros, S., J. M. Rincón, B. Rincón-Mora, y M. Jordán. 2017. Vitrification of urban soil contamination by hexavalent chromium. *Journal of Geochemical Exploration* 174: 132-139.

Ballesteros, S., J. M. Rincón, B. Rincón-Mora, y M. Jordán. 2017. Vitrification of urban soil contamination by hexavalent chromium. *Journal of Geochemical Exploration* 174: 132-139.

Barker, J. A. 1985. Block-geometry functions characterizing transport in densely fissured media. *Journal of Hydrology* 77: 263-279.

Barkle, G. F., Wöhling, T., Stenger, R., Mertens, J., Moorhead, B., Wall, A., y Clague, J. 2011. Automated equilibrium tension lysimeters for measuring water fluxes through a layered, volcanic vadose profile in New Zealand. *Vadose Zone Journal* 10: 747-759.

Barry, D., y J. Parker. 1987. Approximations for solute transport through porous media with flow transverse to layering. *Transport in Porous Media* 2: 65-82.

Batu, V. 1996. A generalized three-dimensional analytical solute transport model for multiple rectangular first-type sources. *Journal of Hydrology* 174: 57-82.

Bauters, T., D. DiCarlo, T. Steenhuis, y J.-Y. Parlange. 2000. Soil water content dependent wetting front characteristics in sands. *Journal of hydrology* 231: 244-254.

Bohn, H. L., B. L. McNeal, y G. A. O'connor. 2001. *Soil Chemistry*. John Wiley & Sons, Inc Third Edition: 17, 26-27, 29, 54-56, 59.

Børgesen, C. D., O. H. Jacobsen, S. Hansen, y M. G. Schaap. 2006. Soil hydraulic properties near saturation, an improved conductivity model. *Journal of hydrology* 324: 40-50.

Børgesen, C. D., O. H. Jacobsen, S. Hansen, y M. G. Schaap. 2006. Soil hydraulic properties near saturation, an improved conductivity model. *Journal of hydrology* 324: 40-50.

Børgesen, C. D., O. H. Jacobsen, S. Hansen, y M. G. Schaap. 2006. Soil hydraulic properties near saturation, an improved conductivity model. *Journal of hydrology* 324: 40-50.

Boltzmann, L. 1894. Zur integration der Diffusionsgleichung bei variabeln Diffusionscoefficienten. *Annalen der Physik* 289: 959-964.

Bouma, J., A. Jongmans, A. Stein, y G. Peek. 1989. Characterizing spatially variable hydraulic properties of a boulder clay deposit in the Netherlands. *Geoderma* 45: 19-29.

Bravo-Inclán, L., P. Saldaña-Fabela, J. Izurieta-Dávila, y M. Mijangos-Carro. 2013. La importancia de la contaminación difusa en México y en el mundo.

Brizuela, J., y Y. Jiménez. 2012. Metodologías aplicadas para el establecimiento de los niveles de referencia para metales pesados en la evaluación de la contaminación en suelos. *Avances en Química* 7: 101-109.

Broadbridge, P., and I. White. 1988. Constant rate rainfall infiltration: A versatile nonlinear model: 1. Analytic solution. *Water Resources Research* 24: 145-154.

Brooks, R., and T. Corey. 1964. *Hydraulic Properties Of Porous Media*. Hydrology Papers, Colorado State University.

Brutsaert, W. 1966. Probability laws for pore-size distributions. *Soil Science* 101: 85-92

Buckingham, E. 1907. *Studies on the movement of soil moisture*.

Bughici, T., y R. Wallach. 2016. Formation of soil–water repellency in olive orchards and its influence on infiltration pattern. *Geoderma* 262: 1-11.

Cardini, J., A. Zabalett, N. Oliver, y D. Mársico. 2004. Efecto de los coeficientes de dispersión sobre la modelación bidimensional del transporte de contaminantes. Caso de estudio. *Mecánica Computacional, Bariloche* 23: 1201-1215.

Carlos Fuentes, R. H. y. J.-Y. P. 1992. Parameter constraints on closed-form soilwater relationships. *Journal of Hydrology* 134: 117-142.

Cássaro, F. A. M., A. K. Borkowski, L. F. Pires, J. A. Rosa, y S. da Costa Saab. 2011. Characterization of a Brazilian clayey soil submitted to conventional and no-tillage management practices using pore size distribution analysis. *Soil and Tillage Research* 111: 175-179.

Chaabane, R., F. Askri, y S. B. Nasralla. 2011. Mixed Boundary Conditions for Two-Dimensional Transient Heat Transfer Conduction under Lattice Boltzmann Simulations. *J. Appl. Fluid Mech.* 4: 89-98.

Chapra, S. C. C., Chapra, R. P. S. C., y Canale, R. P. 2007. Métodos numéricos para ingenieros. McGraw-Hill.

Chavez, C., C. Fuentes, F. Brambila, y A. Castañeda. 2014. Numerical solution of the advection-dispersion equation: application to the agricultural drainage. Journal of Agricultural Science and Technology 16: 1357-1388.

Chavez, C., Mota-Escamilla, J. C. y Fuentes, C. 2016. FLUXSENSE: Software para obtener los parámetros físicos de un medio poroso. INDAUTOR. M03-2016-110812324800-01

Chavez, C., Mota-Escamilla, J. C. y Fuentes, C. 2016. FLUXSENSE: Software para resolver la ecuación advección-dispersión 1D. INDAUTOR. M03-2016-110812383500-01

Chavez, C., Mota-Escamilla, J. C. y Fuentes, C. 2016. FLUXSENSE: Software para resolver la ecuación de Richards 1D. INDAUTOR. M03-2016-110813162400-01

Childs, E. C. 1969. An introduction to the physical basis of soil water phenomena. A Wiley Interscience Publication John Wiley And Sons Ltd,; London; New York; Sydney; Toronto.

Conklin, A. R. 2014. Introduction to soil chemistry: Analysis and instrumentation. Segunda ed. John Wiley & Sons.

Costa, A. 2006. Permeability-porosity relationship: A reexamination of the Kozeny-Carman equation based on a fractal pore-space geometry assumption. Geophysical research letters 33.

Darcy, H. P. G. 1856. Dètermination des lois d'écoulement de l'eau à travers le sable.

Dayan, A., y A. Paine. 2001. Mechanisms of chromium toxicity, carcinogenicity and allergenicity: review of the literature from 1985 to 2000. Human & experimental toxicology 20: 439-451.

De Lannoy, G. J., N. E. Verhoest, P. R. Houser, T. J. Gish, y M. Van Meirvenne. 2006. Spatial and temporal characteristics of soil moisture in an intensively monitored agricultural field (OPE 3). *Journal of Hydrology* 331: 719-730.

De Lannoy, G. J., N. E. Verhoest, P. R. Houser, T. J. Gish, y M. Van Meirvenne. 2006. Spatial and temporal characteristics of soil moisture in an intensively monitored agricultural field (OPE 3). *Journal of Hydrology* 331: 719-730.

Environmental Protection Agency. (1993). Clean Water Act, sec. 503, vol. 58, no. 32. (U.S. EPA Washington, D.C.).

Environmental Protection Agency. (1998). A citizen's guide to phytoremediation (U.S. EPA Washington, D.C.). [Internet]. [En línea], disponible en: <http://clu.in.org/PRODUCTS/CITGUIDE/Phyto2.htm>

Environmental Protection Agency. (2015). Basic Information | Risk Assessment Portal | US EPA [Internet]. [En línea], disponible en: <http://epa.gov/riskassessment/basicinformation.htm#arisk>

Estevez, R., C. A. Fernando-Venialgo, N. C. Gutierrez, O.-B. Ingaramo, y C. María. 2004. Infiltración de agua en el suelo con diferentes usos en el Departamento 9 de Julio (Chaco). Facultad de Ciencias Agrarias. Universidad Nacional del Nordeste. Corrientes, Argentina.

Falta, R. W., N. Basu, y P. S. Rao. 2005. Assessing impacts of partial mass depletion in DNAPL source zones: II. Coupling source strength functions to plume evolution. *Journal of Contaminant Hydrology* 79: 45-66.

Farrell, D., and W. Larson. 1972. Modeling the pore structure of porous media. *Water Resources Research* 8: 699-706.

Fernández, J. C., y L. V. Rodríguez. 2011. Dispersión relativa de metales pesados en la cuenca alta del río Torres-Vizcarra, departamentos de Ancash y Huánuco. *Revista del Instituto de Investigación de la Facultad de Ingeniería Geológica, Minera, Metalúrgica y Geográfica* 14.

Fernández Linares, Luis Carlos. (2012). Atenuación natural de sitios contaminados. Remedación de suelos y acuíferos contaminados en México: Bases teóricas y experiencias reales. Colección FUNDAp Ciencia y Tecnología para el Desarrollo. México. Pp. 109

Fuentes, C., F. Brambila, M. Vauclin, J.-Y. Parlange, y R. Haverkamp. 2001. Modelación fractal de la conductividad hidráulica de los suelos no saturados. Ingeniería hidráulica en México 16: 119-137.

Fuentes, C., R. Haverkamp, y J.-Y. Parlange. 1992. Parameter constraints on closed-form soilwater relationships. Journal of hydrology 134: 117-142.

Fujita, H. 1952. The exact pattern of a concentration-dependent diffusion in a semi-infinite medium, part II. Textile Research Journal 22: 823-827.

Galán, E., y A. Romero. 2008. Contaminación de suelos por metales pesados. Macla 10: 48-60. Gao, H., A. Butler, H. Wheeler, and V. Vesovic. 2001. Chemically reactive multicomponent transport simulation in soil and groundwater: 1. Model development and evaluation. Environmental Geology 41: 274-279.

Gardner, W. 1958. Some steady-state solutions of the unsaturated moisture flow equation with application to evaporation from a water table. Soil science 85: 228-232.

Gardner, W., and M. Mayhugh. 1958. Solutions and tests of the diffusion equation for the movement of water in soil. Soil Science Society of America Journal 22: 197-

Ghafoor, A., J. Koestel, M. Larsbo, J. Moeys, y N. Jarvis. 2013. Soil properties and susceptibility to preferential solute transport in tilled topsoil at the catchment scale. Journal of hydrology 492: 190-199.

Ghanbarian, B., y A. G. Hunt. 2017. Improving unsaturated hydraulic conductivity estimation in soils via percolation theory. Geoderma 303: 9-18.

Ghanbarian, B., V. Taslimitehrani, G. Dong, y Y. A. Pachepsky. 2015. Sample dimensions effect on prediction of soil water retention curve and saturated hydraulic conductivity. *Journal of Hydrology* 528: 127-137.

Ghanbarian, B., V. Taslimitehrani, y Y. A. Pachepsky. 2017. Accuracy of sample dimension-dependent pedotransfer functions in estimation of soil saturated hydraulic conductivity. *Catena* 149: 374-380.

Ghanbarian-Alavijeh, B., A. Liaghat, y S. Sohrabi. 2010. Estimating saturated hydraulic conductivity from soil physical properties using neural networks model. *World Acad. Sci. Eng. Technol* 4: 108-113.

Ghanbarian-Alavijeh, B., H. Millán, y G. Huang. 2011. A review of fractal, prefractal and pore-solid-fractal models for parameterizing the soil water retention curve. *Canadian Journal of Soil Science* 91: 1-14.

Gillham, R., E. Sudicky, J. Cherry, y E. Frind. 1984. An advection-diffusion concept for solute transport in heterogeneous unconsolidated geological deposits. *Water Resources Research* 20: 369-378.

Gleeson, T. VanderSteen, J., Sophocleous, M. A., Taniguchi, M., Alley, W. M., Allen, D. M., y Zhou, Y. 2010. Groundwater sustainability strategies. *Nature Geoscience* 3: 378.

Gómez-Puentes, F. J., J. A. Reyes-López, D. L. López, C. Carreón-Diazconti, y S. Belmonte-Jiménez. 2014. Geochemical processes controlling the groundwater transport of contaminants released by a dump in an arid region of México. *Environmental earth sciences* 71: 609-621.

González de Vallejo, L. I., M. O. Ferrer, Luis , y C. Oteo. 2002. *Ingeniería Geológica*. 18, 20, 22, 274-277.

González Rodríguez, D., P. Almendros García, y J. M. Álvarez Álvarez. 2009. Métodos de análisis de elementos en suelos: disponibilidad y fraccionamiento. In: *Anales de Química*. p 205-212.

Green, W. H., and G. Ampt. 1911. Studies on Soil Physics. *The Journal of Agricultural Science* 4: 1-24.

Grondona, S. I., Martínez, D. E., Benavente, M., Gonzalez, M., Massone, H. E., y Miglioranza, K. S. 2013. Determinación de parámetros hidráulicos en columnas experimentales de suelos del sudeste de la provincia de Buenos Aires. *Revista de la Facultad de Ciencias Agrarias. Universidad Nacional de Cuyo. Mendoza. Argentina* 45: 115-127.

Gueting, N., Klotzsche, A., van der Kruk, J., Vanderborght, J., Vereecken, H., y Englert, A. 2015. Imaging and characterization of facies heterogeneity in an alluvial aquifer using GPR full-waveform inversion and cone penetration tests. *Journal of hydrology* 524: 680-695.

Guiza, S. 2001. Compilación y análisis de datos geoquímicos de metales traza en algunas zonas del río Magdalena (Colombia). Informe técnico INGEOMINAS: 1-59.

Guyonnet, D., y C. Neville. 2004. Dimensionless analysis of two analytical solutions for 3-D solute transport in groundwater. *Journal of Contaminant Hydrology* 75: 141-153.

Guzmán, M. R., y L. Barreto. 2011. Efecto de la materia orgánica del suelo en la retención de contaminantes. *Epsilon*: 31-45.

Gwenzi, W., C. Hinz, K. Holmes, I. R. Phillips, y I. J. Mullins. 2011. Field-scale spatial variability of saturated hydraulic conductivity on a recently constructed artificial ecosystem. *Geoderma* 166: 43-56.

Haverkamp, R., F. J. Leij, C. Fuentes, A. Sciortino, and P. Ross. 2005. Soil water retention. *Soil Science Society of America Journal* 69: 1881-1890.

Haverkamp, R., and J.-Y. Parlange. 1986. PREDICTING THE WATER-RETENTION CURVE FROM PARTICLE-SIZE DISTRIBUTION: 1. SANDY SOILS WITHOUT ORGANIC MATTER<sup>1</sup>. *Soil Science* 142: 325-339.

Haverkamp, R., and M. Vauclin. 1981. A comparative study of three forms of the Richard equation used for predicting one-dimensional infiltration in unsaturated soil. *Soil Science Society of America Journal* 45: 13-20.

Hernández, F., y F. Muñoz. 2009. Influencia de las Curvas de retención de humedad en la estimación de la evaporación de acuíferos someros. *Estudio en zona no saturada del suelo* 9: 01-18.

Higuera, P. L., F. J. Sáez-Martínez, y L. Reyes-Bozo. 2016. *Characterization and remediation of contamination: the influences of mining and other human activities*. Springer.

Horton, R. E. 1941. An approach toward a physical interpretation of infiltration-capacity. *Soil Science Society of America Journal* 5: 399-417.

Jarvis, N. 2007. A review of non-equilibrium water flow and solute transport in soil macropores: Principles, controlling factors and consequences for water quality. *European Journal of Soil Science* 58: 523-546.

Jarvis, N. 2008. Near-saturated hydraulic properties of macroporous soils. *Vadose Zone Journal* 7: 1302-1310.

Jordán, M., Almendro-Candel, M. B., Navarro-Pedreño, J., Pina-Beltrán, S., Camila, S., y Gómez-Lucas, E. 2006. Ensayos de movilidad de cadmio, cromo y níquel en un suelo de la provincia de Alicante tratado con lodo de depuradora.

Julca-Otiniano, A., L. Meneses-Florián, R. Blas-Sevillano, y S. Bello-Amez. 2006. La materia orgánica, importancia y experiencia de su uso en la agricultura. *Idesia (Arica)* 24: 49-61.

Kazakis, N., Kantiranis, N., Kalaitzidou, K., Kaprara, M., Mitrakas, M., Frei, R., y Filippidis, A. 2017. Origin of hexavalent chromium in groundwater: the example of Sarigliol Basin, Northern Greece. *Science of the Total Environment* 593: 552-566.

Khan, A., S. Khan, M. A. Khan, Z. Qamar, y M. Waqas. 2015. The uptake and bioaccumulation of heavy metals by food plants, their effects on plants nutrients, and

associated health risk: a review. *Environmental Science and Pollution Research* 22: 13772-13799.

Khan, S., M. Khan, y S. Rehman. 2011. Lead and cadmium contamination of different roadside soils and plants in Peshawar City, Pakistan. *Pedosphere* 21: 351-357.

Khan, S., S. Munir, M. Sajjad, y G. Li. 2016. Urban park soil contamination by potentially harmful elements and human health risk in Peshawar City, Khyber Pakhtunkhwa, Pakistan. *Journal of Geochemical Exploration* 165: 102-110.

Kierczak, J., A. Pędziwiatr, J. Waroszewski, y M. Modelska. 2016. Mobility of Ni, Cr and Co in serpentine soils derived on various ultrabasic bedrocks under temperate climate. *Geoderma* 268: 78-91.

Köhne, J. M., S. Köhne, y J. Šimůnek. 2009. A review of model applications for structured soils: a) Water flow and tracer transport. *Journal of Contaminant Hydrology* 104: 4-35.

Konikow L.F. y T.E. Reilly. *Groundwater Modeling*, in *The Handbook of Groundwater Engineering*, Chap. 20. CRC Press LLC, Boca Raton, Florida, USA, 20-1 – 20-40, 1999.

Leij, F. J., y J. Dane. 1990. Analytical solutions of the one-dimensional advection equation and two-or three-dimensional dispersion equation. *Water resources research* 26: 1475-1482.

Levy, G. J., Fine, P., Goldstein, D., Azenkot, A., Zilberman, A., Chazan, A., y Grinhut, T. 2014. Long term irrigation with treated wastewater (TWW) and soil sodification. *biosystems engineering* 128: 4-10.

Libohova, Z., Schoeneberger, P., Owens, P. R., Wills, S., Wysocki, D., Williams, C., y Seybold, C. 2016. Comparative Analysis of Saturated Hydraulic Conductivity ( $K_{sat}$ ) Derived from Image Analysis of Soil Thin Sections, Pedotransfer Functions, and Field-Measured Methods *Digital Soil Morphometrics*. p 207-222. Springer.

Liu, C., J. E. Szecsody, J. M. Zachara, y W. P. Ball. 2000. Use of the generalized integral transform method for solving equations of solute transport in porous media. *Advances in water resources* 23: 483-492.

López-Callejas, R., Valencia-Alvarado, R., Mercado-Cabrera, A., Peña-Eguiluz, R., Muñoz-Castro, A. E., Barocio, S. R., y De la Piedad Beneitez, A. 2010. Contribuciones del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares al avance de la Ciencia y la Tecnología en México. Aplicaciones de los plasmas en la modificación de materiales, en medio ambiente y en medicina, ININ, México: 211-230.

Lugli, F., y C. F. Mahler. 2016. A soil-plant model applied to phytoremediation of metals. *International journal of phytoremediation* 18: 295-307.

Mathews, J. H., Fink, K. D., Carrión, A. F., y Márquez, M. C. 2000. *Métodos numéricos con MATLAB*. Prentice Hall.

Marchese, M., A. M. Gagneten, M. J. Parma, y P. J. Pavé. 2008. Accumulation and elimination of chromium by freshwater species exposed to spiked sediments. *Archives of environmental contamination and toxicology* 55: 603.

Méndez, J. P., C. A. G. Ramírez, A. D. R. Gutiérrez, y F. P. García. 2009. Contaminación y fitotoxicidad en plantas por metales pesados provenientes de suelos y agua. *Tropical and Subtropical Agroecosystems* 10: 29-44.

Méndez-Ortiz, B. A., A. Carrillo-Chávez, M. G. Monroy-Fernández, y G. Levresse. 2012. Influencia del pH y la alcalinidad en la adsorción de As y metales pesados por oxihidróxidos de Fe en jales mineros de tipo skarn de Pb-Zn-Ag. *Revista mexicana de ciencias geológicas* 29: 639-648.

Mirbagheri, S. 2004. Modeling contaminant transport in soil column and ground water pollution control. *International Journal of Environmental Science & Technology* 1: 141-150.

Mohanty, B. P., y Z. Mousli. 2000. Saturated hydraulic conductivity and soil water retention properties across a soil-slope transition. *Water Resources Research* 36: 3311-3324.

Montoya, N. P. M., P. A. Casas, y C. C. Wandurraga. 2010. Plomo, cromo III y cromo VI y sus efectos sobre la salud humana. *Ciencia & Tecnología para la Salud Visual y Ocular* 8: 77-88.

Montzka, C., M. Herbst, L. Weihermüller, A. Verhoef, y H. Vereecken. 2017. A global data set of soil hydraulic properties and sub-grid variability of soil water retention and hydraulic conductivity curves. *Earth System Science Data* 9: 529.

Moragues-Saitua, L., A. Arias-González, y N. Gartzia-Bengoetxea. 2017. Effects of biochar and wood ash on soil hydraulic properties: A field experiment involving contrasting temperate soils. *Geoderma* 305: 144-152.

Morton-Bermea, O., E. Hernández-Álvarez, R. Lozano, J. Guzmán-Morales, y G. Martínez. 2010. Spatial distribution of heavy metals in top soils around the industrial facilities of Cromatos de México, Tultitlan Mexico. *Bulletin of environmental contamination and toxicology* 85: 520-524.

Myangan, O., M. Kawahigashi, B. Oyuntsetseg, y N. Fujitake. 2017. Impact of land uses on heavy metal distribution in the Selenga River system in Mongolia. *Environmental Earth Sciences* 76: 346.

Nakano, K., y T. Miyazaki. 2005. Predicting the saturated hydraulic conductivity of compacted subsoils using the non-similar media concept. *Soil and Tillage Research* 84: 145-153.

Navarro, F. J. M. 2014. Caracterización del contenido de cromo, su disponibilidad y sus interacciones con las propiedades del suelo para evaluar el potencial uso de la fitoextracción. In: Congreso Nacional de Medio Ambiente. CONAMA 2014

Nawab, J., Khan, S., Aamir, M., Shamshad, I., Qamar, Z., Din, I., y Huang, Q. 2016. Organic amendments impact the availability of heavy metal (loid) s in mine-impacted

soil and their phytoremediation by *Penicillium americanum* and *Sorghum bicolor*. *Environmental Science and Pollution Research* 23: 2381-2390.

Nizzetto, L., Butterfield, D., Futter, M., Lin, Y., Allan, I., y Larssen, T. 2016. Assessment of contaminant fate in catchments using a novel integrated hydrobiogeochemical-multimedia fate model. *Science of the Total Environment* 544: 553-563.

Norma Oficial Mexicana NOM-021-RECNAT-2000, Que establece las especificaciones de fertilidad, salinidad y clasificación de suelos. Estudios, muestreo y análisis. [[http://dof.gob.mx/nota\\_detalle.php?codigo=717582&fecha=31/12/2002](http://dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=717582&fecha=31/12/2002)] Consultado 26 noviembre de 2012

Norma Oficial Mexicana NOM-021-SEMARNAT-2000, que establece las especificaciones de fertilidad, salinidad y clasificación de suelos. Estudios, muestreo y análisis [<http://biblioteca.semarnat.gob.mx/janium/Documentos/Ciga/libros2009/DO2280n.pdf>]. Consultado 28 de Noviembre del 2015.

Norma Oficial Mexicana NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004 que establece los 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. [<http://biblioteca.semarnat.gob.mx/janium/Documentos/Ciga/agenda/PP03/DO950.pdf>]. Consultado el 28 de Noviembre del 2015

Ortiz-Bernad, I., R. T. Anderson, H. A. Vrionis, y D. R. Lovley. 2004. Resistance of solid-phase U (VI) to microbial reduction during in situ bioremediation of uranium-contaminated groundwater. *Applied and environmental microbiology* 70: 7558-7560.

Orywall, P., Dimier, A., Kohl, T., Kuhn, D., Place, J., y Zorn, R. 2015. Experimental Validation of a Numerical Model-Application of an Open Source Algorithm towards Geothermal Conditions.

Oyarzún, R. 2007. Transporte de contaminantes en aguas subterráneas. CEAZA, Chile, [http://www.aulados.net/Temas\\_ambientales/Contaminantes\\_aguas\\_subterraneas/Transporte\\_contaminantes.pdf](http://www.aulados.net/Temas_ambientales/Contaminantes_aguas_subterraneas/Transporte_contaminantes.pdf).

Parker, J. C., y U. Kim. 2015. An upscaled approach for transport in media with extended tailing due to back-diffusion using analytical and numerical solutions of the advection dispersion equation. *Journal of contaminant hydrology* 182: 157-172.

Pastrana-Corral, M., Wakida, F. T., Temores-Pena, J., Rodríguez-Mendivil, D. D., García-Flores, E., Pinon-Colin, T. D. J., y Quinonez-Plaza, A. 2017. Heavy metal pollution in the soil surrounding a thermal power plant in Playas de Rosarito, Mexico. *Environmental Earth Sciences* 76: 583.

Poggi Varaldo, H. M., N. Rinderknecht Seijas, y S. Caffarel Méndez. 2002. Irreversibilidad en el comportamiento adsorptivo-desorptivo de contaminantes en suelos y sedimentos: evaluación cuantitativa por medio de un coeficiente de histéresis diferencial. *Interciencia* 27.

Pollacco, J. A. P., Webb, T., McNeill, S., Hu, W., Carrick, S., Hewitt, A., y Lilburne, L. 2017. Saturated hydraulic conductivity model computed from bimodal water retention curves for a range of New Zealand soils. *Hydrology and Earth System Sciences* 21: 2725.

Polubesova, T., S. Eldad, y B. Chefetz. 2010. Adsorption and oxidative transformation of phenolic acids by Fe (III)-montmorillonite. *Environmental science & technology* 44: 4203-4209.

Porsch, K., U. Dippon, M. L. Rijal, E. Appel, y A. Kappler. 2010. In-situ magnetic susceptibility measurements as a tool to follow geomicrobiological transformation of Fe minerals. *Environmental Science & Technology* 44: 3846-3852.

Poulovassilis, A. 1962. Hysteresis of pore water, an application of the concept of independent domains. *Soil Science* 93: 405-412.

Reichardt, K., L. C. Timm, y D. Dourado-Neto. 2016. The recent similarity hypotheses to describe water infiltration into homogeneous soils. *Scientia Agricola* 73: 379-383.

Ren, Z., L. Zhu, B. Wang, y S. Cheng. 2016. Soil hydraulic conductivity as affected by vegetation restoration age on the Loess Plateau. China. *Journal of Arid Land* 8: 546-555.

Reynolds, W., y D. Elrick. 1985. IN SITU MEASUREMENT OF FIELD-SATURATED HYDRAULIC CONDUCTIVITY, SORPTIVITY, AND THE  $[\alpha]$ -PARAMETER USING THE GUELPH PERMEAMETER. *Soil Science* 140: 292-302.

Rezanezhad, F., Price, J. S., Quinton, W. L., Lennartz, B., Milojevic, T., y Van Cappellen, P. 2016. Structure of peat soils and implications for water storage, flow and solute transport: A review update for geochemists. *Chemical Geology* 429: 75-84.

Richards, L. A. 1931. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics* 1: 318-333.

Rijtema, P. E. 1965. An analysis of actual evapotranspiration. Center for Agricultural Publications and Documentation.

Ritsema, C. J., L. W. Dekker, y W. Heijs. 1997. Three-dimensional Fingered Flow Patterns in a Water Repellent Sandy Field Soil. *Soil Science* 162: 79-90.

Ritsema, C. J., L. W. Dekker, J. Hendrickx, y W. Hamminga. 1993. Preferential flow mechanism in a water repellent sandy soil. *Water Resources Research* 29: 2183-2193.

Shahmohammadi-Kalalagh, S., y H. Beyrami. 2015. Modeling Bromide Transport in Undisturbed Soil Columns with the Continuous Time Random Walk. *Geotechnical and Geological Engineering* 33: 1511-1518.

Sander, G. et al. 1988. Exact nonlinear solution for constant flux infiltration. *Journal of Hydrology* 97: 341-346.

Soto, M. A., H. Chang, y M. T. van Genuchten. 2017. Fractal-based models for the unsaturated soil hydraulic functions. *Geoderma* 306: 144-151.

Starr, R., R. Gillham, y E. Sudicky. 1985. Experimental investigation of solute transport in stratified porous media: 2. The reactive case. *Water Resources Research* 21: 1043-1050.

Statescu, F., D. Cotiu.ca-Zauca, G. Biali, P. Cojocaru, y V. L. Pavel. 2017. Influence of soil matrix on soil-water retention curve and hydraulic characteristics. 2017 16: 9.

Stumm, W., y J. J. Morgan. 1996. *Aquatic Chemistry: Chemical Equilibria and Rates in Natural Waters* (Mirbagheri). Wiley.

Su, Y., F. X. Han, B. Sridhar, y D. L. Monts. 2005. Phytotoxicity and phytoaccumulation of trivalent and hexavalent chromium in brake fern. *Environmental toxicology and chemistry* 24: 2019-2026.

Tang, D., E. Frind, y E. A. Sudicky. 1981. Contaminant transport in fractured porous media: Analytical solution for a single fracture. *Water resources research* 17: 555-564.

Tedersoo, L., Bahram, M., Cajthaml, T., Põlme, S., Hiiesalu, I., Anslan, S., y Abarenkov, K. 2016. Tree diversity and species identity effects on soil fungi, protists and animals are context dependent. *The ISME journal* 10: 346-362.

Tiruta-Barna, L. 2008. Using PHREEQC for modelling and simulation of dynamic leaching tests and scenarios. *Journal of hazardous materials* 157: 525-533.

Toride, N., F. Leij, y M. T. Van Genuchten. 1995. The CXTFIT code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments. version.

Torres, L. G., R. B. Lopez, y M. Beltran. 2012. Removal of As, Cd, Cu, Ni, Pb, and Zn from a highly contaminated industrial soil using surfactant enhanced soil washing. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C* 37: 30-36.

Trento, Alfredo y Alvarez, Ana M. (2013). Simulación del derrame de petróleo en un escenario fluvial. *Mecánica Computacional Argentina*. 33(1), 2825-2835.

Tzatchkov, V., A. Aldama Rodríguez, y F. Arreguin. 2000. Modelación numérica de la advección y dispersión de solutos en redes de distribución de agua potable.

United State Department of Agriculture. (2000). Heavy Metal Soil Contamination. Soil Quality-Urban Technical nota N.3. Natural Resources Conservation Service, Soil Quality Institute (USDA NRCS). Pp 1-7.

Van Genuchten, M. T. 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil science society of America journal* 44: 892-898.

Villalobos-Aragón, A., A. S. Ellis, M. A. Armienta, O. Morton-Bermea, y T. M. Johnson. 2012. Geochemistry and Cr stable isotopes of Cr-contaminated groundwater in León valley, Guanajuato, México. *Applied geochemistry* 27: 1783-1794.

Villalobos-Aragón, A., A. S. Ellis, M. A. Armienta, O. Morton-Bermea, y T. M. Johnson. 2012. Geochemistry and Cr stable isotopes of Cr-contaminated groundwater in León valley, Guanajuato, México. *Applied geochemistry* 27: 1783-1794.

Vithanage, M., A. U. Rajapaksha, C. Oze, N. Rajakaruna, y C. Dissanayake. 2014. Metal release from serpentine soils in Sri Lanka. *Environmental Monitoring and Assessment* 186: 3415-3429.

Volke, S.T., Velasco, T.J.A., de la Rosa, P.D. (2005) Suelos contaminados por metales pesados y metaloides: muestreo y alternativas para su remediación. 1a edición. Instituto Nacional de Ecología. SEMARNAT. México, D.F. Pp 80-88,120, 144

Wang, S., B. Fu, y J. Liu. 2016. Soil moisture temporal stability analysis for typical hilly and gully re-vegetated catchment in the Loess Plateau, China. *Environmental Earth Sciences* 75: 789.

Wang, X., T. M. Johnson, y A. S. Ellis. 2015. Equilibrium isotopic fractionation and isotopic exchange kinetics between Cr (III) and Cr (VI). *Geochimica et Cosmochimica Acta* 153: 72-90.

Wang, Y., D. Feng, y C. W. Ng. 2013. Modeling the 3D crack network and anisotropic permeability of saturated cracked soil. *Computers and Geotechnics* 52: 63-70.

Wang, Z., L. Wu, y Q. Wu. 2000. Water-entry value as an alternative indicator of soil water-repellency and wettability. *Journal of Hydrology* 231: 76-83.

Wardle, D. A. Bardgett, R. D., Klironomos, J. N., Setälä, H., Van Der Putten, W. H., & Wall, D. H. 2004. Ecological linkages between aboveground and belowground biota. *Science* 304: 1629-1633.

Wexler, E. J. 1992. Analytical solutions for one-, two-, and three-dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow. US Government Printing Office.

Wu, Z., H. Wong, y N. Buenfeld. 2015. Influence of drying-induced microcracking and related size effects on mass transport properties of concrete. *Cement and Concrete Research* 68: 35-48.

Yu, J. Lv, X., Bin, M., Wu, H., Du, S., Zhou, M., y Han, G. 2015. Fractal features of soil particle size distribution in newly formed wetlands in the Yellow River Delta. *Scientific reports* 5.

Yu, Y. Wei, W., Chen, L., Feng, T., Daryanto, S., y Wang, L. 2017. Land preparation and vegetation type jointly determine soil conditions after long-term land stabilization measures in a typical hilly catchment, Loess Plateau of China. *Journal of Soils and Sediments* 17: 144-156.

Zataráin, F., Fuentes, C., Palacios, V. O. L., Mercado, E. J., Brambila, F., y Villanueva, N. 1998. Modelación del transporte de agua y de solutos en el suelo. *Agrociencia* 32: 373-383.

Zavala, M., C. Fuentes, and H. Saucedo. 2003. Sobre la condición de radiación en el drenaje de una columna de suelo inicialmente saturado. *Ingeniería hidráulica en México* 18: 121-131.

Zerihun, D., A. Furman, A. Warrick, y C. Sanchez. 2005. Coupled Surface–Subsurface Solute Transport Model for Irrigation Borders and Basins. I. Model Development. *Journal of irrigation and drainage engineering* 131: 396-406.

Zhang, H. 2006. Leaching behavior of Pb and Zn in air pollution control residues and their modeling prediction. *Journal of Environmental Sciences* 18: 583-586.

Zhang, Z. F., A. L. Ward, y G. W. Gee. 2003. Estimating soil hydraulic parameters of a field drainage experiment using inverse techniques. *Vadose Zone Journal* 2: 201-211.

Zhang, Z. Y., T. T. Sa, X. Q. Tie, H. Lan, y W. H. Zhang. 2013. Soil water infiltration and its affecting factors. In: *Applied Mechanics and Materials*. p 2983-2986.

Zhou, J. Fu, B., Gao, G., Lü, N., Lü, Y., & Wang, S. 2015. Temporal stability of surface soil moisture of different vegetation types in the Loess Plateau of China. *Catena* 128: 1-15.

Zimmermann, E. D., y P. A. Basile. 2011. Estimación de parámetros hidráulicos en suelos limosos mediante diferentes funciones de pedotransferencia. *Tecnología y ciencias del agua* 2: 99-116.

