

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS DE TRABAJO FUTURO

Los resultados de este trabajo muestran claramente que el transporte no pasivo acoplado de las fases fluidas y de soluto en la zona no saturada, es un fenómeno altamente interactivo. Los gradientes de presión matricial pueden inducir transporte de soluto y recíprocamente, la composición de la mezcla puede alterar las propiedades de transporte e inducir un patrón dado de flujo. Se confirma, por lo tanto, la hipótesis de que la simulación realista de la infiltración, redistribución y volatilización de mezclas acuosas de compuestos orgánicos volátiles cuyas propiedades fisico-químicas dependen de la composición requeriría el uso de modelos que tengan en cuenta de manera explícita estas dependencias, y de que la utilización de modelos clásicos de transporte pasivo podría dar lugar a diferencias significativas con la modelización detallada y los resultados experimentales. A continuación se presentan las conclusiones más importantes obtenidas en el trabajo de esta tesis:

(1) Usualmente, los modelos estándares de transporte en la zona no saturada consideran ninguno o unos pocos efectos no pasivos sobre el flujo. Sin embargo, el modelo de transporte desarrollado en esta tesis ha permitido mostrar que bajo ciertas condiciones, la exclusión del acoplamiento simultáneo de varios efectos no pasivos podría resultar en una descripción inadecuada de los fenómenos que ocurren en este tipo de procesos. En particular, en el presente modelo se han incluido las dependencias simultáneas de la densidad, la viscosidad, la tensión interfacial, el coeficiente de difusión molecular en fase líquida, y los coeficientes de distribución gas-líquido, con la composición de la mezcla acuosa.

(2) En la infiltración 1D de mezclas acuosas de alcoholes completamente miscibles, en suelos de tipo franco arcillo arenoso y arcillo limoso, la composición de la mezcla inicial afecta en forma significativa a los flujos de volatilización de cada especie, la posición del frente, y los perfiles de contenido de líquido y concentración.

(3) Para los casos estudiados con una dispersividad longitudinal a saturación elevada (7.8 cm), el mecanismo predominante en el transporte de alcohol a través del suelo es la

CAPÍTULO 5

dispersión en fase líquida, con una contribución mayor de la difusión en fase gaseosa cerca de la superficie durante el período de volatilización.

(4) El flujo capilar de líquido se origina principalmente debido a gradientes de presión inducidos por las variaciones en el contenido volumétrico de líquido. Sin embargo, bajo condiciones de dispersividades a saturación bajas (inferiores a 1 cm), la convección es un mecanismo más activo en el transporte de soluto que la dispersión. En este caso, el flujo de líquido capilar debido a cambios en la composición es el mecanismo predominante en el movimiento de líquido en la región que delimita el frente de soluto.

(5) Al suponer que dentro del suelo no actúa el efecto de reducción de los coeficientes de partición gas-líquido de acuerdo a la ecuación de Kelvin para mezclas multicomponentes, la difusión en fase gaseosa se reduce significativamente. El flujo correspondiente de evaporación de agua también disminuye y, consecuentemente, los contenidos volumétricos de líquido aumentan.

(6) El fenómeno de reducción de flujos que se deriva de la ecuación de Kelvin puede tener una incidencia importante sobre el transporte global bajo condiciones de sequedad severa. Este fenómeno puede ser crucial para modelar correctamente el movimiento de fluido y el transporte de contaminante en regiones áridas o suelos arcillosos, situaciones para las cuales las propiedades de retención de líquido favorecen el desarrollo de presiones capilares elevadas.

(7) Los resultados de las simulaciones para sistemas no pasivos 2D confirman los resultados obtenidos en 1D, esto es, que la extensión e intensidad del campo de velocidades de la fase líquida responden a las distribuciones de líquido y soluto dentro del suelo. Del mismo modo, los perfiles de contenido volumétrico de líquido y concentración de soluto reflejan la dinámica del flujo de líquido.

(8) Las principales propiedades influenciadas por la composición son: (a) la viscosidad y la tensión interfacial, que afectan directamente al flujo de líquido; (b) la densidad, que origina el efecto no ideal de mezcla entre la solución de infiltración y la humedad inicial del suelo; y (c) los coeficientes de partición gas-líquido, a través de los cuales se obtiene un impacto significativo sobre las limitaciones a la transferencia de masa desde el interior del suelo hacia la superficie y, consecuentemente, sobre las tasas de volatilización global.

(9) Puesto que, para el sistema binario metanol-agua, la viscosidad es una función cóncava de la concentración, el flujo de líquido aumenta o disminuye de acuerdo a la distribución de concentraciones dentro del suelo, y al rango que éstas abarquen. De este modo, el efecto viscoso actúa en el mismo sentido o contrarresta el flujo inducido por las variaciones en la tensión interfacial, dependiendo de las cantidades de metanol y de la magnitud de los gradientes de concentración desarrollados en el suelo.

(10) Mezclas de infiltración más concentradas se mueven más lento debido a su mayor viscosidad y, consecuentemente, tardan más tiempo en alcanzar la superficie del suelo en las zonas donde se produce la volatilización. Debido a esta menor movilidad del líquido, la fracción de masa infiltrada de metanol que se volatiliza a la atmósfera se reduce en comparación con las mezclas iniciales más diluidas.

(11) Para un suelo homogéneo, valores relativamente elevados de dispersividad a saturación aminoran el impacto de la concentración sobre el flujo inducido por cambios en la tensión interfacial. Por otro lado, la infiltración de mezclas más concentradas genera una irregularidad en el perfil de contenido de líquido que coincide con la formación de una protuberancia en el perfil de concentración de metanol.

(12) La heterogeneidad es un factor que acentúa el comportamiento no pasivo en el transporte de mezclas acuosas de alcohol. Un bloque arcilloso, inmerso dentro de una matriz principal de textura franco arcillo arenosa, actúa como barrera capilar que mantiene la mezcla más cerca de la superficie por más tiempo durante la infiltración, y que retiene cantidades elevadas de líquido en su interior durante el período de volatilización pura.

(13) Esta configuración heterogénea particular favorece el desarrollo de gradientes importantes de concentración durante la infiltración y la redistribución de las mezclas más concentradas, causando un incremento en los gradientes de presión matricial debido a cambios en la composición. Consecuentemente, se obtienen mayores flujos de líquido inducidos por la tensión superficial que en el caso de transporte en suelo homogéneo. Las irregularidades en los perfiles de humedad y de concentración son también más pronunciadas.

(14) Para un suelo homogéneo y una dispersividad longitudinal a saturación baja, la convección en fase líquida es más activa que la dispersión en el transporte de metanol. Por el

CAPÍTULO 5

contrario, para un suelo heterogéneo y dispersividad reducida, la dispersión en fase líquida nuevamente es el mecanismo de transporte predominante. Esto se debe a la acción conjunta de la presencia del bloque arcilloso y de un mayor secado de la parte superior del suelo, que originan un aumento de los gradientes de concentración por encima del bloque arcilloso.

(15) Los cambios en la presión capilar causados por variaciones en la composición de la mezcla son mayores para una dispersividad menor. Esto se ve reflejado por un aumento en el avance del frente de líquido, un crecimiento de la irregularidad observada en el perfil de contenido volumétrico de líquido, y un incremento en los flujos de líquido en las regiones con gradientes de concentración elevados.

(16) En esta tesis se ha propuesto también una nueva función de retención aplicable dentro del rango completo de contenidos de agua que toma ventaja de la robusticidad y de la consistencia física de la isoterma de adsorción de Brunauer-Emmett-Teller para describir la zona de sequedad extrema, al mismo tiempo que preserva el comportamiento capilar de la función clásica de Brooks-Corey dentro del rango de humedad elevada. La transición entre los mecanismos de adsorción y capilaridad se realiza mediante una generalización de la isoterma de adsorción de Bradley. La continuidad de la función y su derivada queda asegurada a lo largo de las distintas regiones de humedad.

(17) Dentro de la mayor parte del rango de saturación, la curva de retención de agua que se ha propuesto en este trabajo es muy similar a otros modelos de retención. Sin embargo, el comportamiento de la presión matricial conforme se aproxima a la condición de sequedad total es diferente. Mientras que la mayoría de las funciones extendidas a todo el rango de saturaciones predicen una presión finita para un contenido de agua nulo, la presente aproximación predice una presión matricial infinita, lo que está de acuerdo con las teorías clásicas de adsorción.

(18) En situaciones donde se prevén contenidos de líquido bajos, es de esperar que se obtengan diferencias importantes en las simulaciones del transporte de agua que consideran un modelo de retención u otro. Estas diferencias pueden afectar a los cálculos del transporte de sustancias químicas orgánicas, dado que la adsorción depende considerablemente de la humedad relativa.

El estudio de sistemas no pasivos es un campo de investigación aún no explorado completamente. Todavía es necesario verificar la capacidad del presente modelo de transporte de describir apropiadamente los efectos no pasivos sobre el flujo no saturado. Dependiendo del sistema de interés, el éxito de la simulación numérica puede requerir que en la modelización se tengan en cuenta factores adicionales, tales como la histéresis en las funciones hidráulicas, el transporte reactivo, fases líquidas no acuosas y/o biotransformaciones. Queda por estudiar también, escenarios donde la convección en fase gaseosa sea importante. Un desafío todavía mayor es la investigación del transporte no pasivo en condiciones no isotérmicas.

Las experiencias a escala de laboratorio y de campo que involucran el uso de sistemas no pasivos en la zona no saturada deberían monitorizarse de modo tal de poder medir los efectos no pasivos. Métodos directos de medición, como las cápsulas porosas de tensión, tensiómetros o lisímetros pueden utilizarse para tal efecto. Entre los métodos indirectos, la tomografía de resistencia eléctrica puede ser una alternativa atractiva, ya que los cambios de resistividad del medio poroso responden a las variaciones de humedad y composición de la mezcla líquida. Experimentos de volatilización/evaporación continua en columnas podrían realizarse para confirmar que los efectos que predice la ecuación de Kelvin realmente se cumplen en el caso de transporte de mezclas multicomponentes en la zona no saturada. La monitorización detallada de la zona vadosa para la recolección de este tipo de datos no sólo proporcionaría conocimiento valioso respecto del impacto de los efectos no pasivos causados sobre el flujo, sino que también contribuirían a un entendimiento más acabado de los fenómenos de transporte de contaminantes en la zona no saturada.

Por otra parte, las condiciones de sequedad que resultan a partir de los episodios de infiltración y volatilización estudiados en esta tesis evidenciaron la necesidad de emplear una función de retención válida en todo el rango de saturación. La aproximación de Rossi-Nimmo se escogió como una alternativa apropiada, ya que admite el escalamiento de Leverett para incluir la influencia de la composición sobre la curva de retención. Sin embargo, para describir la influencia de la composición sobre la retención de líquido en condiciones de sequedad extrema mediante un modelo de retención análogo al que se ha propuesto en este trabajo, es necesario considerar el fenómeno de adsorción competitiva. En este sentido, la isoterma de adsorción BET multicomponente surge como una opción adecuada, por medio de la cual se generalizaría la función de retención de agua que se presenta en esta tesis.