SOCIEDAD CHILENA DE INGENIERÍA HIDRÁULICA

XVII CONGRESO CHILENO DE HIDRÁULICA

ESTUDIO EXPERIMENTAL Y NUMÉRICO DE TRANSFERENCIA DE SOLUTOS DESDE EL SEDIMENTO EN UNA COLUMNA DE AGUA AGITADA POR GRILLAS

CARLOS REIHER N.¹ SERGIO QUIJADA V.² YARKO NIÑO C.³

RESUMEN

La transferencia de masa entre los sedimentos y la columna de agua en sistemas acuáticos superficiales tiene gran importancia del punto de vista del análisis de la calidad ambiental de ellos. En este trabajo se presentan y discuten resultados experimentales y de modelación matemática/numérica sobre el intercambio turbulento de masa entre los sedimentos y la columna de agua, considerando un proceso 1D en la vertical. Los experimentos se realizaron en una columna con un lecho de sedimentos. El agua dentro de esta instalación es agitada con grillas que permiten inducir distintos tipos de estructuras e intensidades turbulentas. Se saturó el lecho con un trazador consistente en una solución salina y se midió la evolución temporal de la distribución de concentración en la columna para distintas agitaciones. El modelo matemático representa los procesos de difusión molecular y turbulenta en la columna de agua, y la difusión molecular en la matriz de sedimentos, igualando flujos másicos en la interfaz. Los resultados numéricos, basados en un modelo de diferencias finitas, reproducen adecuadamente los procesos de transporte y transferencia de masa observados. Los resultados obtenidos se resumen en un modelo simple de intercambio de masa, expresado en términos de un coeficiente de intercambio. El modelo numérico predice que este coeficiente, adimensionalizado en la forma del número de Sherwood, se correlaciona linealmente con el número de Reynolds del flujo. Los resultados experimentales, con mayor dispersión, confirman este resultado en forma relativamente satisfactoria.

¹ Ingeniero Civil (e), Magíster (c), Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Chile.

² Ingeniero Civil, alumno del Programa de Doctorado en Fluidodinámica, Universidad de Chile, docente del Departamento de Ingeniería Civil, Universidad del Bío-Bío.

³ Profesor Asociado, Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Chile

VI – Medio Ambiente y Calidad de Recursos Hídricos

1. INTRODUCCIÓN

La interacción entre los sedimentos de un sistema acuático y el medio líquido que sobre ellos existe, es tan variada como compleja; simultáneamente se desarrollan procesos físicos, químicos y biológicos, que se manifiestan en un constante intercambio de compuestos, calor y energía entre ambos medios (Boudreau, 1997). Uno de los temas más importantes que surge dentro de esta problemática de los intercambios, es la transferencia de solutos desde los sedimentos, ya sea por acumulación previa de estas sustancias o por la producción de compuestos, fruto de la actividad biológica y química que toma lugar en la capa de lecho más cercana a la interfaz. Por ello, esta investigación busca abordar la posibilidad de predecir las tasas de intercambio, a través de dos enfoques: por un lado, actividades experimentales que permitan relacionar propiedades físicas (esencialmente, velocidades e intensidades de turbulencia) y químicas (concentración de especies); y la implementación de una herramienta matemática, que mediante simulaciones numéricas permita extender los resultados a otros casos posibles de interacción existentes en medios acuáticos reales.

Este trabajo se basa en el estudio realizado en una instalación experimental de columna agitada por grillas, la cual cuenta con una base formada por una matriz de sedimentos desde donde se produce la difusión de compuestos hacia la columna de agua, controlada de manera predominante por la turbulencia generada en esta última. A través de la medición de las variables dinámicas de esta instalación (muestreo de velocidades con sensor acústico y toma de muestras de agua a lo largo de la columna) se genera la información básica para el análisis del proceso de transferencia de solutos, comparando con los resultados de un modelo teórico que incorpora la mecánica del transporte de momentum y masa en la columna, y los procesos difusivos dentro de los sedimentos.

2. ESTUDIO EXPERIMENTAL

El objetivo del estudio experimental es determinar las concentraciones de una solución salina transportada a una columna de agua agitada por grillas desde un lecho de arena.

En investigaciones previas se han utilizado diversos tipos de estanques agitados por grillas para el estudio de la turbulencia y su influencia en procesos de transporte. Rouse y Dodu (1955) utilizaron un estanque agitado por una grilla para el estudio de difusión turbulenta a través de discontinuidades de densidad. Estudios realizados por Thompson y Turner (1975) y Hopfinger y Toly (1976) tenían como objetivo determinar la tasa de incorporación o mezclas de un fluido a través de una interfaz de densidad. También se han realizado estudios experimentales con la finalidad de estudiar la estructura de la turbulencia cercana a la superficie libre y su relación con la transferencia de oxígeno a través de la interfaz aire-agua (Brumley, 1984; Brumley y Jirka, 1987; Chu y Jirka, 1992; y Orlins y Gulliver, 2000). Por su parte, estudios realizados por Tsai y Lick (1986) y Orlins (1996), tuvieron como objetivos estudiar la resuspensión de sedimentos. Hopfinger y Toly (1976) establecieron las escalas de longitud y de tiempo asociadas a la turbulencia generada por grillas.

Saraiva (2003) basado en investigaciones previas, como las de Brumley y Jirka (1987), De Silva y Fernando (1992) y Orlins (1996), diseñó y construyó la instalación que fue utilizada en el presente estudio experimental.

2.1 Descripción de la instalación

El estudio experimental se realizó en una columna cuyas dimensiones internas son: 120 cm de alto, 42 cm de ancho y 20 cm de profundidad, y está compuesta por acrílico transparente en su parte frontal y costados (de 20 y 10 mm de espesor, respectivamente), y por una placa de aluminio de 10 mm de espesor en su parte posterior (Saraiva, 2003) (ver Figura 1).



Figura 1. Vista esquemática lateral de la instalación experimental

Al interior de la columna están dispuestas cinco mallas verticales de 40 x 20 cm tejidas con barras de acero inoxidable de 2.67 mm de diámetro (d) y abertura media (M) de 1.27 cm. El espaciamiento vertical entre cada grilla es de 1 cm. Las grillas se encuentran a 3 cm de la tapa posterior (posición neutra de las mallas), con la primera malla ubicada a 6 cm del fondo de la columna. Cada malla está conectada a un eje articulado de bronce a través de una pequeña placa apernada del mismo material, la cual cubre, aproximadamente, un 2% del área de la malla.

El eje pasa por la parte posterior de la columna a través de una pieza que sirve de guía, también de bronce, la cual tiene en su interior un retén y un O-ring (sello de goma) para evitar fugas de agua a través del acrílico. Los ejes están conectados, con un perno de acero, a un disco del mismo material, de 10 cm de diámetro y 9.5 mm de espesor (disco excéntrico) perforado a distintas distancias desde su centro lo que permite modificar el alcance (*S*) de la malla, que en este caso se ajustó a 2 cm. Cada disco está conectado a un motor – reductor de 1 HP que puede variar su frecuencia (nominal) de rotación de 190 a 600 RPM. La medición de la velocidad de rotación de cada motor se realiza con un sensor de proximidad, el cual conectado a un tacómetro permite medir, con una precisión de ± 0.1 RPM, las revoluciones de cada motor.

El fondo de la columna fue cubierto con paños absorbentes de fibra sintética, alcanzando éstos un espesor de 2 cm, los cuales actúan como filtro para evitar la evacuación de los sedimentos, y

permiten una mejor distribución del soluto inyectado en la columna. Sobre éstos fue colocado un lecho de arena de 4 cm de espesor, cuya porosidad (f) fue medida y estimada en 0.46.

La introducción de agua fresca o cualquier otro líquido en la columna, puede realizarse directamente desde arriba; sin embargo, si se desea generar una estratificación en la columna inyectando un líquido más denso, o incorporar una solución en el lecho de arena, como en el presente estudio, es posible introducirlos desde el fondo de la columna a través de 12 orificios de 0.62 cm. Estos orificios están dispuestos ordenadamente sobre el área del fondo en 3 filas y 4 columnas, y están conectados a mangueras que conducen el líquido desde una cámara de distribución, correspondiente a un dispositivo cilíndrico de PVC de 15 cm. de diámetro y 10 cm de altura, en cuyo extremo opuesto va conectada una manguera de 1.27 cm. A través de esta manguera se realiza tanto el llenado con agua potable (almacenado en un estanque de 150 l de capacidad), como la inyección de soluciones al sedimento (desde un bidón de 25 l de capacidad).

A los costados de la columna se encuentra el sistema de muestreo formado por válvulas de globo ubicadas a diferentes alturas desde el fondo, cuyas llaves están conectadas a una barra de cobre, que al girarla en 90°, permite obtener en forma simultánea muestras de la columna.

Sobre la columna se encuentra dispuesto un sistema de carros, sobre los cuales va montado el ADV (instrumento que mide las velocidades), permitiendo que éste se pueda mover en las tres direcciones espaciales.

2.2 Metodología experimental (instrumentación)

El registro de las tres componentes de la velocidad local instantánea al interior de la columna se realizó utilizando un sensor Micro ADV (Acoustic Doppler Velocimeter) Sontek (3D-Down Looking). Este equipo consiste en una sonda Sontek de frecuencia acústica de 16 MHz, con una velocidad de muestreo desde los 1.1 a los 50 Hz y con un volumen de medición de 0.09 cm³, una tarjeta de adquisición de datos ADV LabSontek y un computador Pentium I 233.

En cada medición el ADV registra el tiempo transcurrido desde el inicio de la medición, las tres componentes de la velocidad, tres valores de correlación y tres valores de la razón señal/ruido SNR (uno por cada receptor). La correlación indica cuán similares son los pulsos emitidos por el transmisor al propagarse en el agua. El SNR (Signal to Noise Ratio) indica cuán grande es la amplitud de la señal recibida con respecto al ruido existente.

La conductividad, tanto de la solución salina contenida en el bidón como de las muestras de líquido tomadas de la columna, fueron medidas con un conductivímetro Multi-Rango Hanna Instruments HI 8733. Este conductivímetro incorpora un sensor de temperatura que permite compensar la diferencia entre la temperatura de la solución y la temperatura patrón (20° C), entregando la lectura de la conductividad de la solución referida a esta última. La compensación se realiza en forma automática, para lo cual fue necesario determinar el coeficiente de temperatura b de la solución para ajustarlo en el instrumento. Para el caso de las soluciones salinas utilizadas en este estudio, los ensayos de laboratorio indicaron que el coeficiente b es aproximadamente igual a 2 %/°C.

2.3 Condiciones Experimentales

Se definió un sistema de coordenadas cartesianas al interior de la columna, sobre el cual fueron establecidas todas las posiciones características de ésta: x corresponde a un eje perpendicular a las grillas, a 3 cm de la cara posterior de la columna, y cuyo sentido positivo es hacia la cara anterior de la columna; y es un eje horizontal cuyo origen está ubicado en el centro de las grillas y cuyo sentido positivo es hacia la derecha (mirando la columna de frente), y z es el eje vertical hacia arriba, donde su cero está ubicado sobre el lecho de arena.

A la columna se le incorporó agua potable a través del fondo hasta una altura h de 42 cm, altura que cubre las dos grillas inferiores. La columna no fue llenada completamente, ya que se estableció previamente que este volumen de agua diluía demasiado la solución salina utilizada, impidiendo que se pudiesen notar claramente los cambios y diferencias de conductividad debidos a la incorporación de dicha solución en la columna; por esta razón, se eligió una altura de agua tal que incorporara más de una grilla, para poder considerar más de una estructura de agitación, pero que a su vez fuese lo suficientemente pequeña como para distinguir los cambios y diferencias de conductividad producidos en la columna de agua.

Las mediciones de velocidad se hicieron considerando dos estructuras diferentes de agitación de las grillas, con cuatro niveles de frecuencia de agitación para cada una de ellas. Las dos estructuras de agitación fueron: agitación de ambas grillas, y agitación sólo de la grilla más cercana al lecho. Por su parte, los cuatro niveles de frecuencia de agitación fueron: 150, 200, 240-250 y 300 RPM. Para una determinada estructura y nivel de frecuencia de agitación, se registraron por un lapso de al menos 20 minutos las velocidades en dos líneas verticales de 6 puntos cada una, a lo largo de la columna de agua, ubicadas en las siguientes coordenadas (x, y): (9.5, 9.7) cm y (9.5, -9.7) cm, respectivamente. Esta disposición de los puntos de medición respeta las restricciones x>4S (De Silva y Fernando, 1992) y x>2M (Atkinson et al., 1987), rango para el cual la turbulencia se puede considerar homogénea. Se requirió de al menos 20 minutos de medición ya que, previamente, se determinó que para este tiempo los promedios móviles de las tres componentes de la velocidad convergían a un valor constante, respectivamente. Una vez tomados los datos con el ADV, se seleccionaron para su análisis sólo aquellas velocidades cuyo coeficiente de correlación y SNR eran mayores o iguales que 70% y 15 [dB], respectivamente. Con esta información fue posible determinar para la columna de agua variables como la energía cinética turbulenta y los esfuerzos de corte producidos sobre el lecho de arena, a través de:

$$K = \frac{\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}}{2}$$
(1)

$$u_{t_{xz}} = \sqrt{|\overline{u'w'}|}; \quad u_{t_{yz}} = \sqrt{|\overline{v'w'}|}; \quad u_{t} = \sqrt{u_{t_{xz}}^{2} + u_{t_{yz}}^{2}}$$
 (2)

donde u', v' y w' representan las fluctuaciones de velocidad en torno al promedio, en las coordenadas x, y y z, respectivamente, K corresponde a la energía cinética turbulenta en el punto de medición, y u_t corresponde a una escala de velocidad asociada a esfuerzos de corte turbulentos (para puntos cercanos al lecho tiende a la velocidad de corte en la interfaz).

Posteriormente, se realizaron las mediciones de conductividad de la columna de agua, considerando la agitación de las rejillas y la presencia de solución salina en el lecho de arena. Para ello, en primer lugar, se incorporó agua potable a través del fondo de la columna hasta alcanzar el nivel z = 42 cm. Enseguida, se incorporó solución salina al lecho de arena (a través del fondo) hasta alcanzar la superficie de éste; esta solución fue preparada con 30 g/l de cloruro de sodio (NaCl) y 1.5 g/l de permanganato de potasio (KMnO₄). Estas concentraciones fueron definidas de tal manera de obtener una solución cuya conductividad fuese similar a la conductividad del agua de mar; cabe mencionar que el KMnO₄ fue utilizado básicamente como colorante para poder visualizar la solución tanto en su incorporación al lecho como a la columna de agua. Una vez incorporada la solución salina al lecho, se tomó 1 conjunto de muestras desde la columna para la condición "sin agitar" y, además se tomó una muestra de solución salina desde la manguera que conduce dicha solución al lecho de arena, la cual fue denominada "solución bulk"; enseguida, se procedió a agitar las rejillas con una determinada estructura y nivel de frecuencia, y se tomaron, desde la columna, entre 5 y 7 conjuntos de muestras en un lapso de tiempo que varió entre 9 y 25 minutos; cada conjunto de muestras está compuesto por 5 frascos, los que reciben el líquido desde la columna a través de mangueras conectadas a 5 de las válvulas colocadas para el muestreo, ubicadas correlativamente a 0.5, 5, 15, 26 y 36 cm. Por último, se midió y se registró la conductividad de cada una de las muestras. Este procedimiento se repitió para cada una de las estructuras y niveles de frecuencia consideradas en la medición de las velocidades. Con esta información, se procedió a relacionar las conductividades con sus respectivas concentraciones, a través de una curva previamente calibrada con diferentes soluciones salinas.

3. MODELO NUMÉRICO

Junto al trabajo experimental desarrollado, se implementó un modelo numérico que permite ligar el estudio de la columna agitada con la teoría sobre transferencia y mezcla de solutos, tanto en el medio acuático como dentro de los sedimentos.

Las ecuaciones fundamentales que debe resolver este modelo matemático son las siguientes:

Ecuación de difusión molecular y turbulenta en la columna de agua:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left\{ \left(D_o + D_t \right) \frac{\partial C}{\partial z} \right\}$$
(3)

Ecuación de difusión molecular en los sedimentos:

$$\frac{\partial(\mathbf{f}C)}{\partial t} = D_s \,\frac{\partial^2(\mathbf{f}C)}{\partial z^2} \tag{4}$$

donde *C* representa la concentración de una determinada especie a estudiar, *t* es el tiempo, *z* es la coordenada vertical, medida hacia arriba desde la interfaz agua – sedimento, *f* es la porosidad de los sedimentos, D_o es el coeficiente de difusión molecular de masa para la especie estudiada (que

toma un valor D_s dentro de los sedimentos), y el D_t es el coeficiente de difusión turbulenta de masa.

Dentro de los sedimentos, la trayectoria que debe seguir una partícula para recorrer una determinada distancia vertical, es mayor que en la columna de agua, debido a que debe ir recorriendo los espacios que dejan los poros de la matriz de sedimentos. Se define de esta forma la tortuosidad, como la longitud media del camino a través del espacio poroso entre dos puntos (dL), con respecto al largo de una línea recta entre los mismos dos puntos (dx):

$$q^2 = \frac{dL}{dx} \tag{5}$$

La difusión molecular dentro de los sedimentos, se relaciona con la tortuosidad a través de la siguiente expresión (Boudreau, 1997):

$$D_s = \frac{D_o}{q^2} \tag{6}$$

Para estimar la tortuosidad se han propuestos diversas expresiones, que consideran esencialmente la dependencia de la tortuosidad con la porosidad. Para el presente modelo se seleccionó la relación obtenida por Iversen y Jørgensen (1993):

$$\boldsymbol{q}^2 = 1 + n\left(1 - \boldsymbol{f}\right) \tag{7}$$

donde *n* es un coeficiente empírico, que vale 2 para sedimentos arenosos, como los empleados en la instalación experimental, o toma un valor de 3 para sedimentos arcillosos.

Previamente a solucionar las ecuaciones (3) y (4), se procede a realizar la adimensionalización de éstas, quedando como:

$$\frac{\partial C^*}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial z^*} \left\{ \left(\frac{1}{Sc} + \frac{D_t}{\mathbf{n}} \right) \frac{\partial C^*}{\partial z^*} \right\}$$
(8)

$$\boldsymbol{f}\frac{\partial \boldsymbol{C}^{*}}{\partial \boldsymbol{t}^{*}} = \frac{\boldsymbol{f}}{\boldsymbol{S}\boldsymbol{c}\,\boldsymbol{q}^{2}}\frac{\partial^{2}\boldsymbol{C}^{*}}{\partial \boldsymbol{z}^{*2}} \tag{9}$$

$$C^* = \frac{C}{C_b}; \quad t^* = t \frac{\mathbf{n}}{L^2}; \quad z^* = \frac{z}{L}; \quad Sc = \frac{\mathbf{n}}{D_o}$$
 (10)

donde C_b es la concentración de la solución inyectada en la base de los sedimentos, v es la viscosidad cinemática del fluido, *Sc* es el número de Schmidt, y *L* es la escala de longitud en la subcapa difusiva, definida como $L = 100 \text{ n} u *^{-1}$ (Higashino et al., 2004), donde u* es la velocidad de corte del flujo.

En la ecuación (8) se requiere de alguna expresión para estimar D_t . Este coeficiente de difusión turbulento se relaciona con la viscosidad turbulenta \mathbf{n}_t a través del número de Schmidt turbulento $Sc_t = \mathbf{n}_t / D_t$, que empíricamente se ha encontrado que tiene un valor de aprox. 0.63 (Launder, 1975). En tanto, la viscosidad turbulenta puede ser descrita en la vertical a través de la expresión de O'Connor (1995):

$$\boldsymbol{n}_{t}^{*} = \frac{\boldsymbol{n}_{t}}{\boldsymbol{n}} = \frac{\boldsymbol{k} \ z^{+3}}{\boldsymbol{G}_{o}^{3} + z^{+2}} \tag{11}$$

donde z^+ es la coordenada vertical adimensionalizada con la velocidad de corte y la viscosidad cinemática ($z^+ = u_* z / n$), $\kappa = 0.4$ y $\Gamma_0 = 7.4$. Esta expresión ha sido desarrollada para la turbulencia en canales abiertos, pero en este caso es aplicable, por cuanto el factor limitante de la transferencia de masa corresponde a la difusión molecular dentro de los sedimentos, y la turbulencia contribuye a lograr una buena mezcla de la masa transferida a la columna.

De esta forma, el coeficiente de difusión turbulenta queda expresado como:

$$\frac{D_t}{\mathbf{n}} = \frac{D_t}{\mathbf{n}_t} \frac{\mathbf{n}_t}{\mathbf{n}} = \frac{1}{Sc_t} \frac{\mathbf{k} z^{+3}}{\mathbf{G}_o^3 + z^{+2}}$$
(12)

Las ecuaciones (8) y (9) son expresadas como diferencias finitas, usando un esquema de Crank-Nicholson, y una discretización espacial (D_{z^*}) de 0.01 y un paso temporal (D_{t^*}) de 0.001. El algoritmo que resuelve estas ecuaciones funciona a través de matrices conformadas por los términos descritos en las siguientes ecuaciones:

Columna de agua:

$$C_{i+1}^{*n+1} \frac{\mathbf{a}}{2} \left(\frac{1}{Sc} + \frac{\mathbf{n}_{t_{i+1/2}}^{*}}{Sc_{t}} \right) - C_{i}^{*n+1} \left[\frac{\mathbf{a}}{2} \left(\frac{2}{Sc} + \frac{\mathbf{n}_{t_{i-1/2}}^{*}}{Sc_{t}} + \frac{\mathbf{n}_{t_{i+1/2}}^{*}}{Sc_{t}} \right) + 1 \right] + C_{i-1}^{*n+1} \frac{\mathbf{a}}{2} \left(\frac{1}{Sc} + \frac{\mathbf{n}_{t_{i-1/2}}^{*}}{Sc_{t}} \right) = -C_{i+1}^{*n} \frac{\mathbf{a}}{2} \left(\frac{1}{Sc} + \frac{\mathbf{n}_{t_{i+1/2}}^{*}}{Sc_{t}} \right) + C_{i}^{*n} \left[\frac{\mathbf{a}}{2} \left(\frac{2}{Sc} + \frac{\mathbf{n}_{t_{i-1/2}}^{*}}{Sc_{t}} + \frac{\mathbf{n}_{t_{i+1/2}}^{*}}{Sc_{t}} \right) - 1 \right] - C_{i-1}^{*n} \frac{\mathbf{a}}{2} \left(\frac{1}{Sc} + \frac{\mathbf{n}_{t_{i-1/2}}^{*}}{Sc_{t}} \right) \right)$$
(13)

Sedimentos:

$$-C_{i+1}^{*n+1} \frac{\mathbf{a}}{2 \, \mathbf{q}^2 \, Sc} + C_i^{*n+1} \left[\frac{\mathbf{a}}{\mathbf{q}^2 Sc} + 1 \right] - C_{i-1}^{*n+1} \frac{\mathbf{a}}{2 \, \mathbf{q}^2 \, Sc} = C_{i+1}^{*n} \frac{\mathbf{a}}{2 \, \mathbf{q}^2 \, Sc} + C_i^{*n} \left[1 - \frac{\mathbf{a}}{\mathbf{q}^2 Sc} \right] + C_{i-1}^{*n} \frac{\mathbf{a}}{2 \, \mathbf{q}^2 \, Sc}$$
(14)

donde $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{D}t^* / \boldsymbol{D}z^{*2}$.

Las condiciones de borde empleadas para la solución de este sistema de ecuaciones representan un sistema cerrado, tal como el usado en la instalación experimental, donde se incorpora una cierta cantidad de soluto y después se cierra, manteniéndose la masa incorporada dentro del sistema, al no existir flujo másico en la base de los sedimentos ni a través de la superficie libre. Las expresiones matemáticas se describen a continuación:

Condición en la superficie libre (z = h):

$$\frac{\P C^*}{\P z^*} \bigg|_{z^* = h/L} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{C^* (z^* = h/L) - C^* (z^* = h/L - \mathbf{D} y^*)}{\mathbf{D} z^*} = 0$$
(15)

Condición en la base de los sedimentos ($z = -h_s$):

$$\frac{\P C^*}{\P z^*} \bigg|_{z^* = -h_s/L} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{C^* (z^* = -h_s/L + \mathbf{D} z^*) - C^* (z^* = -h_s/L)}{\mathbf{D} z^*} = 0$$
(16)

Relación para la interfaz (z = 0) (igualación de flujos):

$$\frac{f}{Sc q^{2}} \frac{\partial C^{*}}{\partial z^{*}} \bigg|_{z=0^{-}} = \left(\frac{1}{Sc} + \frac{D_{t}}{n}\right) \frac{\partial C^{*}}{\partial z^{*}} \bigg|_{z=0^{+}} \Rightarrow$$

$$\frac{f}{Sc q^{2}} \frac{C^{*}(z^{*}=0) - C^{*}(z^{*}=-Dz^{*})}{Dz^{*}} = \left(\frac{1}{Sc} + \frac{D_{t}(z^{*}=Dz^{*}/2)}{n}\right) \frac{C^{*}(z^{*}=Dz^{*}) - C^{*}(z^{*}=0)}{Dz^{*}}$$
(17)

Las condiciones de simulación guardan relación con la mayor parte de los parámetros determinados en la instalación experimental, en lo referente a altura de agua, espesor de los sedimentos, porosidad, y velocidad de corte, relacionada con las energías cinéticas turbulentas y esfuerzos de corte turbulentos medidos.

4. RESULTADOS EXPERIMENTALES

En campañas separadas se midieron las velocidades a través del sensor ADV y se obtuvieron las muestras para la determinación de concentraciones a lo largo de la columna. Con los datos registrados de velocidades se determinaron intensidades de turbulencia, y velocidades de corte, según las relaciones (1) y (2), para las dos configuraciones de agitación consideradas, las cuales alcanzan valores de *K* similares cerca del lecho, pero disímiles en la mitad superior de la columna (ver Tabla 1 y Figura 2). Adicionalmente, la Figura 3 muestra que para todas las experiencias realizadas, la razón $K_b^{0.5}/u_t$ entrega un valor cercano a 2, tal como el que se observa en canales y en otras estructuras de agitación experimentales (Muñoz, 2002).

En la Figura 4 se muestra el tipo de resultados obtenidos de la toma y medición de muestras desde la columna, apreciándose una fuerte mezcla en la columna, que logra una concentración prácticamente uniforme en la vertical, salvo la zona cercana al lecho, desde donde se produce la difusión de masa. Además, durante los primeros minutos de agitación se produce un aumento

rápido de la masa agregada a la columna, por cuanto se produce la mezcla rápida de la masa que inicialmente se encuentra en las inmediaciones de la interfaz, tal como se discutirá más adelante.

	f		K _b	K _m	u _t
	[RPM]	[Hz]	$[\text{cm}^2/\text{s}^2]$	$[\text{cm}^2/\text{s}^2]$	[cm/s]
	150	2.5	0.55	0.58	0.347
Grilla	200	3.3	0.87	0.76	0.479
Inferior	250	4.2	1.02	1.22	0.493
	300	5.0	2.3	2.91	0.736
	150	2.5	0.37	0.69	0.302
Ambas	200	3.3	0.75	1.24	0.484
Grillas	240	4.0	0.86	1.54	0.542
	300	5.0	1.69	3.27	0.706

Tabla 1. Energías cinéticas turbulentas y velocidades de corte a distintas frecuencias de agitación. $(K_b, K_m:$ energías cinéticas turbulentas, cerca del lecho y
como valor medio en la columna, respectivamente)



Figura 2. Perfiles verticales de energía cinética turbulenta medidos, adimensionalizados con f (frecuencia de oscilación) y S (recorrido de la grilla): a) Sólo grilla inferior, S=2 [cm]; b) Ambas grillas funcionando, S=2 [cm].



Figura 3. Relación entre energía cinética turbulenta cerca del fondo, K_b , y velocidad de corte calculada con los esfuerzos de corte turbulentos, u_t .



Figura 4. Ejemplos de perfiles verticales de concentración medidos: a) Sólo grilla inferior, f=250 [RPM]; b) Ambas grillas funcionando, f=240 [RPM]. Tiempos en minutos.

5. RESULTADOS NUMÉRICOS

La Figura 5 muestra ejemplos de la información obtenida gracias al modelo: perfiles de concentración para diferentes tiempos durante la simulación, y evolución temporal de la masa acumulada en la columna, para una matriz de sedimentos de altura h_s saturada con un soluto a una concentración C_b , y una columna de agua de altura h, sin presencia de solutos.

Una aplicación de este modelo sirvió para la calibración del número de Schmidt, usando información de transferencia de masa en la instalación experimental, sin producir agitación en la columna. Para efectos de la modelación numérica, basta imponer $D_t = 0$. El resultado fue la estimación de *Sc* en un valor de alrededor de 1800.



Figura 5. Ejemplos de información obtenida del modelo numérico, para Sc=500, f=0.50, u=1 cm/s, h=5 cm, $h_s=5$ cm, $C_b = 21.2$ mg/l; a) Perfiles de concentración para diferentes tiempos (acotado a aprox. 0.25 cms. por sobre y bajo la interfaz agua – sedimento, -0.05 < z/h < 0.05); b) Curva de masa total acumulada, en una columna de 1 m² de área transversal.

A partir de la información experimental, se determina una velocidad de corte u_* , usando el valor medido de la energía cinética turbulenta cerca del fondo, K_b . Esta velocidad se usa como dato de entrada al modelo numérico, generando perfiles de concentración comparables a los medidos.

Un aspecto fundamental de la modelación numérica es la alta dependencia de los resultados con la condición inicial, tanto a lo largo de la columna como dentro de los sedimentos. Esta dependencia guarda relación con las mediciones experimentales realizadas, donde inicialmente se produce una mezcla rápida del soluto que se encuentra inmediatamente próximo a la interfaz agua – sedimento, para dar paso a continuación de un proceso más lento de transferencia entre ambos medios. Además, la ocurrencia probable de procesos dispersivos en la carga de solutos dentro del sedimento puede determinar una distribución vertical de concentración diferente a la supuesta (constante en toda la matriz de sedimentos). Por tanto, se aborda la comparación de resultados experimentales y numéricos a través de un modelo simplificado de transferencia de masa (e.g., Dade, 1993):

$$\frac{dM}{dt} = K_L A \left(C_{sed} - C_w \right) \tag{18}$$

donde dM/dt corresponde a la tasa de variación de la masa total de soluto incorporada en la columna de agua, K_L es un coeficiente de transferencia de masa, A es el área transversal de la columna, en tanto que C_{sed} y C_w representan concentraciones de soluto representativas de los sedimentos y la columna de agua, respectivamente.

La elección de la concentración representativa de los sedimentos puede afectar los resultados obtenidos, ya que incide directamente sobre la forma de calcular K_L . En un modelo más general, se podría emplear $C_{sed} = C_b$, lo cual resulta válido cuando hay poca variación de la cantidad de soluto dentro del lecho. Un modelo más específico consideraría $C_{sed} = C_i$, donde C_i es la concentración de la especie en la interfaz (z = 0). Ambos datos son factibles de obtener en la modelación numérica, no así en la instalación experimental, ya que la determinación exacta de la

posición z = 0 y la concentración asociada resultan inciertas. De todas formas, las observaciones en la columna permitieron notar que existe una disminución de la concentración en los sedimentos en un espesor de aproximadamente 1 cm, lo que permite afirmar que la aplicación para estos datos de un modelo $C_{sed} = C_b$ resulta erróneo. Se determinó que un valor $C_{sed} = 0.27 C_b$ permite una buena concordancia de los resultados experimentales con los numéricos, cuando se considera $C_{sed} = C_i$ para estos últimos, y resulta una estimación razonable de las observaciones experimentales. La Figura 6 muestra estas comparaciones, en función de los números de Sherwood (*Sh*) y Reynolds (*Re**), definidos como:

$$Sh = \frac{K_L h}{D_0} \quad ; \qquad Re_* = \frac{u_* h}{\mathbf{n}} \tag{19}$$

6. CONCLUSIONES

Se ha realizado un estudio experimental sobre los procesos de transporte y transferencia de masa, entre un lecho de sedimentos y una columna de agua agitada por grillas. Paralelamente, se ha desarrollado un modelo matemático/numérico basado en diferencias finitas, que permite predecir las tasas de transferencia en la interfaz de ambos medios. Las simulaciones representan adecuadamente las distribuciones de concentración en la columna de agua y los procesos observados de intercambio de masa con los sedimentos. Los resultados obtenidos se resumen en un modelo simple de intercambio de masa, expresado en términos de un coeficiente de intercambio, K_L . El modelo numérico predice que K_L , adimensionalizado en la forma del número de Sherwood, se correlaciona linealmente con el número de Reynolds del flujo. Los resultados experimentales, con mayor dispersión, confirman este resultado en forma relativamente satisfactoria. El modelo numérico desarrollado y validado a través del estudio experimental, constituye una herramienta útil para el análisis de problemas ambientales en sistemas acuáticos superficiales, y puede ser utilizado en conjunto con modelos eco-hidrodinámicos para la columna de agua.



Figura 6. Relación de números de Sherwood (*Sh*) y Reynolds (*Re**) para resultados experimentales y sus correspondientes simulaciones numéricas: a) Sólo grilla inferior; b) Ambas grillas.

AGRADECIMIENTOS

Se agradece el financiamiento entregado por el Proyecto MECESUP UBB 0103, en la forma de una beca de doctorado para el segundo autor, y por el Proyecto FONDECYT # 1040494.

REFERENCIAS

Atkinson, J. F., Damiani, L., y D. R. R. Harleman. 1987. A comparasion of velocity measurements using a laser anemometer and hot-film probe, with applications to grid-stirring entrainment experiments. Physics of Fluids, 30, 3290.

Boudreau, B.P. 1997. Diagenetic Models and their Implementation. Springer-Verlag.

Brumley, B. H. 1984. Turbulence measurements near free surface in stirred grid experiments.

Brumley, B. H., y G. H. Jirka. 1987. Near-surface turbulence in a grid-stirred tank. Journal Fluid Mechanic, 183, 235-263.

Chu, C-R., y G. H. Jirka. 1992. Turbulent velocity and oxygen concentration fluctuations in the surface layer of a grid-stirred tank. Intnl. Journal of Heat and Mass Transfer, 35(8), 1957-1968. Dade, W.B. 1993. Near-bed turbulence and hydrodinamic control of diffusional mass transfer at the sea floor. Limnol. Oceanogr., 38 (1), 52-69

De Silva, I. P. D., y H. J. S. Fernando. 1992. Some aspects of mixing in a stratified turbulent patch. Journal Fluid Mechanic, 240, 601-625.

Higashino, M., C. J. Gantzer y H. G. Stefan. 2004. Unsteady diffusional mass transfer at the sediment/water interface: Theory and significance for SOD measurement. Water Res., 38, 1–12.

Hopfinger, E. J., y J. A. Toly. 1976. Spatially decaying turbulence and its relation to mixing across density interfaces. Journal Fluid Mechanic, 78(1), 155-175.

Iversen, N. y B. B. Jørgensen. 1993. Diffusion coefficients of sulfate and methane in marine sediments: Influence of porosity. Geochimica et Cosmochimica Acta, Vol. 57, pp. 571-578

Launder, B. E. 1975. On the effects of a gravitational field on the turbulent transport of heat and momentum. J. Fluid Mech., Vol. 67, part 3, pp. 569-581.

Muñoz, V. 2002. Análisis de resuspensión de sedimento por turbulencia en una columna de agua. Memoria para optar al título de Ingeniero Civil, Universidad de Chile.

O'Connor, D. J. 1995. Inner region of smooth pipes and open channels. J. Hydraul. Eng., 121, 555–560.

Orlins, J. J. 1996. Construction and calibration of a sediment resuspension and chemical flux chamber driven by an Oscillating grid. Master of Science Degree Project Paper, University of Minnesota.

Orlins J. J. y Gulliver J. S. 2000. Measurements of free surface turbulence. Fourth International Symposium on Gas Transfer at Water Surfaces, Miami Beach, Florida.

Rouse, H., y J. Dodu. 1955. Diffusion turbulente à travers une discontinuité de densité. La Houille Blanche, 4, 522-532.

Saraiva, R. 2003. Columna agitada por grillas verticales para el estudio de fenómenos de transporte y mezcla en flujos turbulentos. Diseño, construcción y puesta en marcha. Memoria para optar al título de Ingeniero Civil, Universidad de Chile.

Tsai, C. H., y W. Lick. 1986. A portable device for measuring sediment resuspension. J. Great Lakes Res. 12(4), 314-321.

Thompson, B. H., y J. S. Turner. 1975. Mixing across an interface due to turbulence generated by an oscillating grid. Journal Fluid Mechanic, 67(2), 349-368.