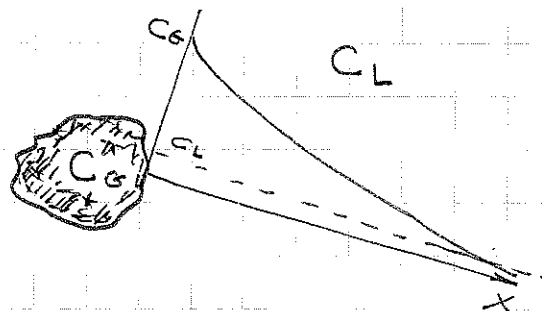


CI 71 Q - HIDRODINAMICA AMBIENTAL

Prof. Aldo Tamburino

DIFUSION DE MASA EN LA INTERFAZ AGUA-SEDIMENTO

A diferencia de la interfaz aire-agua, la interfaz agua-sedimento es difícil de definir y está controlada por numerosos procesos físicos y químicos. La gran dificultad de la interfaz aire-agua radica en el hecho que, al estar formada por muchos granos individuales, es difícil definir un límite claro. En un grano en particular tiene una interfaz bien definida y si estamos estudiando un problema de transferencia de una sustancia desde el grano al medio líquido, el problema es muy simple y ya lo hemos resuelto ~~de~~ en este curso.

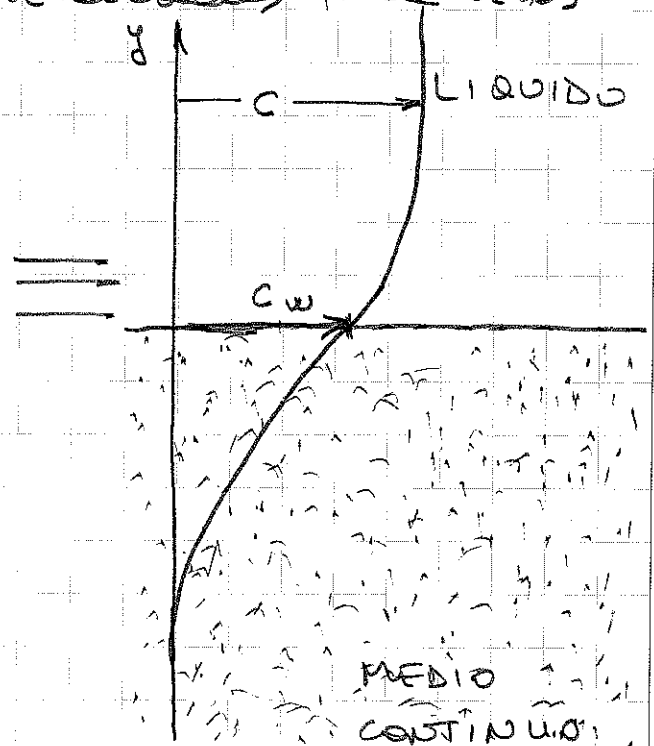
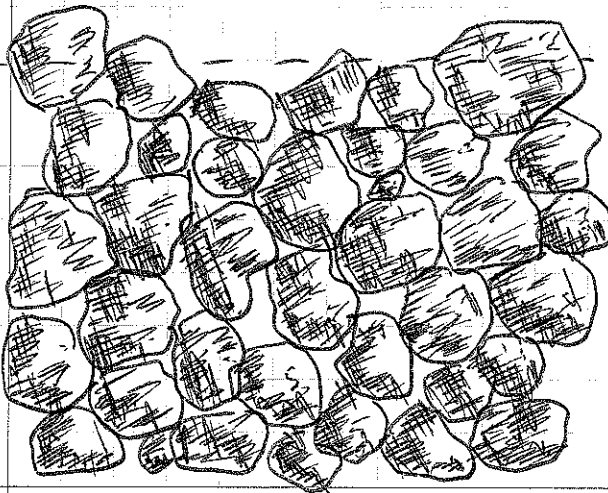


Al existir una gran cantidad de granos, de formas más o menos irregulares y distintos tamaños, existe una cantidad de huecos entre ellos, los que se rellenan con líquido, y ~~está~~ en los que se está llevando a cabo el proceso de

transferencia bajo condiciones hidrodinámicas distintas a las que están expuestas los granos de la primera capa del lecho. Notar la diferencia entre el proceso de transferencia de masa y el de momentum. En este último caso, el efecto directo se limita a los granos en contacto directo con el flujo (una vez que el flujo ha superado una cierta condición "crítica") y generalmente (dependiendo del autor) se considera que ~~de~~ sólo la capa superficial (o los dos primeras capas) de granos son los que se mueven.

En el caso de un gran conjunto de granos no es posible realizar un análisis considerando cada uno de ellos en particular, sino que se hace necesario trabajar con volúmenes de control que consideren propiedades medias

LIQUIDO



En la figura anterior se esquematiza la situación real y su modelación como un medio continuo. De este modo, es fácil ver que un parámetro importante del problema es la porosidad del lecho de sedimentos m :

$$m = \frac{V_w}{V}$$

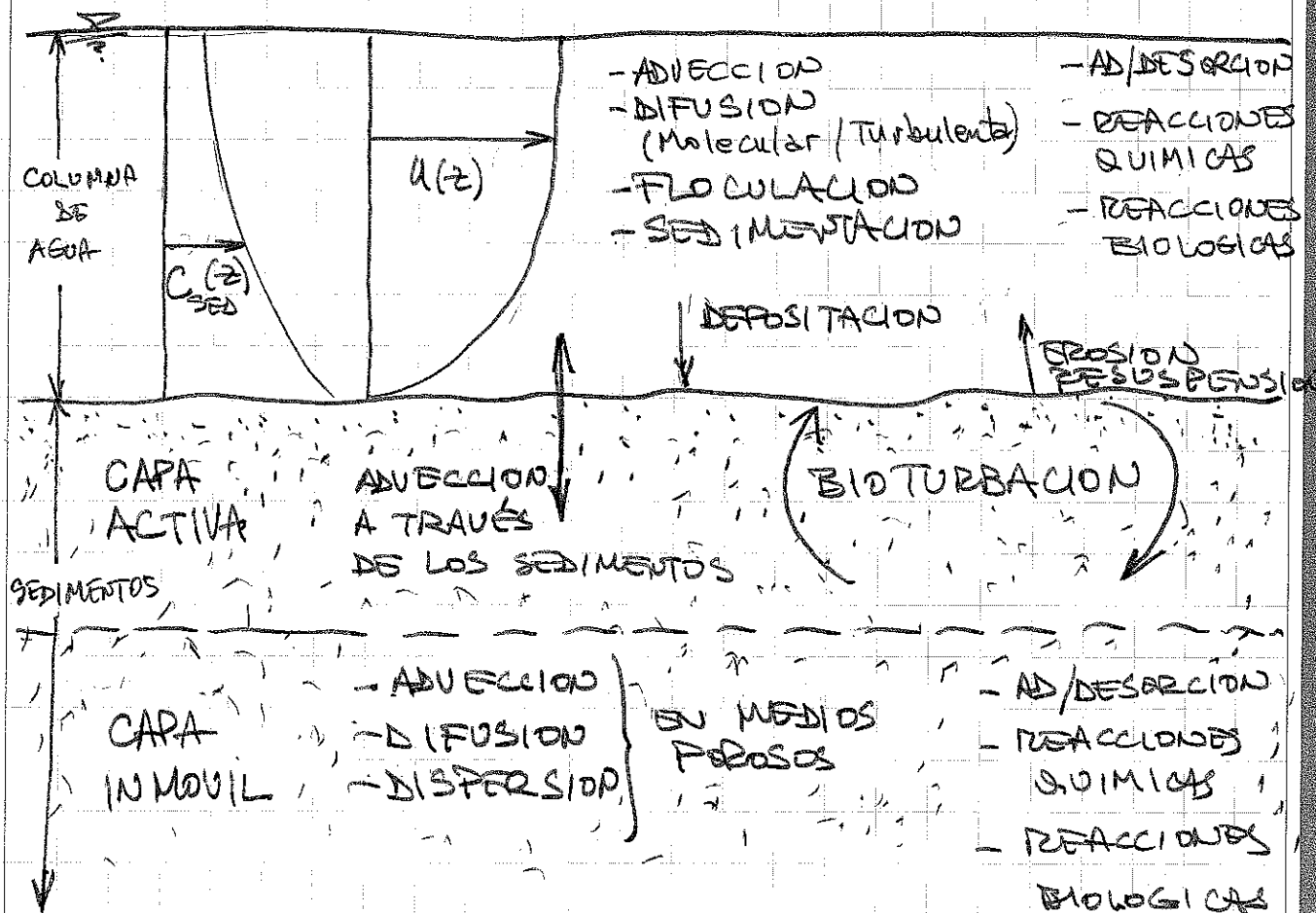
donde V_w es el volumen de agua y V es el volumen total ($V = V_w + V_s$).

Otro parámetro importante del problema es la velocidad de sedimentación de las partículas sólidas, w_s . Sabemos que w_s depende de la concentración de partículas y presencia de fronteras (en ambos casos se altera el campo de presiones alrededor de la partícula, alterando la velocidad de caída o sedimentación). En los análisis, sin embargo, generalmente se considera la velocidad terminal de caída de una partícula aislada, en un medio quieto, infinito.

Es posible definir la interfaz de la columna agua-sedimento como el punto en el que m se hace lo suficientemente pequeño como para que las partículas que sedimentan dejen de hacerlo debido al contacto con otras partículas, formando de este modo una matriz relativamente fija.

Notar que la cantidad de partículas en suspensión puede ser función de la distancia a la interfaz líquido-sedimento.

En la columna líquida y en el lecho pueden ocurrir muchos procesos ligados a los sedimentos, los que pueden ser físicos, químicos y biológicos. o combinaciones de ambos. Estos procesos se esquematizan en la figura siguiente.



Los procesos físicos están ligados al transporte. En la columna de agua, los sustancias químicas pueden ser transportadas tanto por la fase

líquida como por las partículas sólidas.

Los procesos de transporte asociados a los sedimentos en la columna de agua son

- **Floculación**: Es el agrupamiento de partículas debido a efectos electroquímicos. Esto altera la velocidad de sedimentación o caída, debiendo considerarse no una partícula separada sino un conglomerado de ellas.
- **Sedimentación**: Es el descenso que experimentan las partículas sólidas, debido a su peso y en oposición a los efectos del flujo que se opone a ella (ej. turbulencia).
- **Depositación**: Es el proceso mediante el cual las partículas que sedimentan llegan al lecho y permanecen en él.
- **Resuspensión**: Es la capacidad que tiene el flujo de que partículas que se encuentran en el lecho sean reincorporados a la columna líquida. Generalmente, esto sucede debido a fluctuaciones turbulentas de la velocidad y presión en la cercanía del lecho.
- **Erosión**: Es el descenso del lecho debido a la remoción de partículas.

por parte del flujo

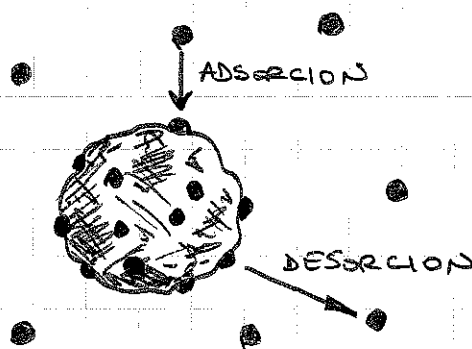
En los problemas permanentes existe un equilibrio entre lo que es deposición y erosión. En general estos procesos están siempre presentes, con un continuo intercambio de partículas sólidas desde la masa líquida al lecho y viceversa.

Dentro del sedimento del lecho se tienen los procesos propios del flujo en medios porosos (advección, difusión y dispersión) y debe agregarse el efecto que tienen los animales que viven entre los sedimentos (generalmente gusanos o similares). El proceso generado por los seres vivos se ~~denomina~~ denomina BIOTURBACIÓN (quizás la palabra adecuada en castellano sea BIOPERTURBACIÓN).

- Bioturbación: Corresponde a la mezcla de sedimento causado por los animales que tienen su hábitat entre los sedimentos. Estos animales mueven el sedimento a medida que ellos se desplazan a través de él o porque los animales comen el sedimento que está en la base de la capa activa. El movimiento neto de sedimento debido a bioturbación generalmente se modela como un proceso de difusión, usándose coeficiente de difusión debido a bioturbación.

Mediante todos los procesos antes mencionados los distintos compuestos o especies químicos pueden moverse en la columna líquida, entre los sedimentos, o a través de los dos fases en las interfaces. Además de las reacciones químicas o biológicas que pueden suceder, un proceso de transporte importante que ocurre en la interfaz del sedimento es el de ~~de~~ adsorción o desorción (fenómenos de "sorción").

- Adsorción / Desorción: Algunas moléculas tienden a adherirse a la fase sólida y no ~~se~~ permanecer disueltas en la fase líquida (generalmente debido a procesos electroquímicos a nivel molecular). Los fenómenos de sorción manejan la mayoría de los procesos asociados a compuestos orgánicos o metales pesados.



Adsorción corresponde al proceso mediante el cual los moléculas disueltas en el agua se adhieren a la superficie de la partícula, y desorción es el proceso contrario.

Ecuación de LANGMUIR. Consideremos el intercambio de algún compuesto A entre el líquido donde se encuentra

dissueltos y la superficie del grano o partícula que se encuentra en la columna de agua. Consideremos además que la concentración de partículas es baja. (C_{sed} pequeño)

La concentración de A, en g/cm^3 , en la columna líquida está dada por:

$$C_A = \frac{M_A}{V_w}, \quad V_w \approx V$$

Se define la concentración de sorción C_{AS}^* :

$$C_{AS}^* = \frac{\frac{M_{Aad}}{V_w}}{\frac{M_{sed}}{V_w}} = \frac{M_{Aad}}{M_{sed}}$$

donde M_{Aad} es la masa de A adsorbida y M_{sed} es la masa de sedimento.

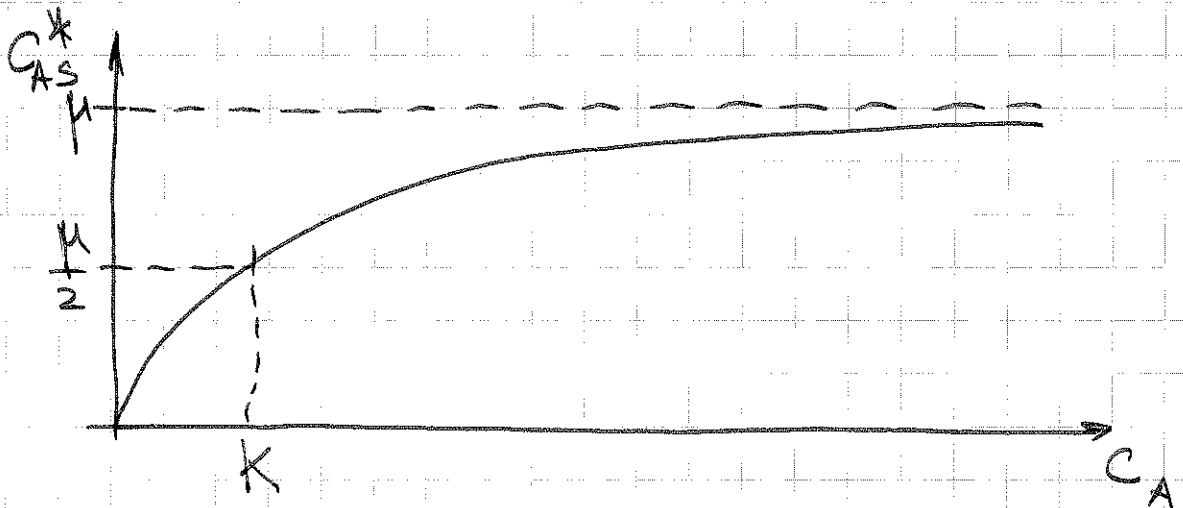
La cinética de sorción es muy rápida, por lo que se puede considerar la cantidad de A que es adsorbida está en equilibrio con la desorbida. Langmuir, basado en observaciones experimentales propuso la siguiente relación de equilibrio:

$$C_{AS}^* = \frac{\mu C_A}{K + C_A}$$

El coeficiente K tiene las mismas unidades que C_A . μ es adimensional

Y se denomina la "isotermia de Langmuir".
 El parámetro K también se le denomina "constante de semisaturación" y μ es el valor al que tiende C_{AS}^* para valores altos de C_A (en el caso en que A corresponde al oxígeno disuelto, el recibe el nombre de "tasa máxima de oxidación"). μ es un valor de "saturación" para C_{AS}^* .

El nombre de "constante de semisaturación" para K es obvio. Si $C_A = K$, entonces $C_{AS}^* = \frac{\mu}{2}$.



Para la mayoría de los tóxicos existentes en el medio ambiente $C_A \ll K$ y la ecuación de Langmuir puede simplificarse a

$$C_{AS}^* = \frac{\mu}{K} C_A$$

Se define el coeficiente de partición P como

$$P = \frac{\mu}{K}$$

O sea:

$$C_{AS}^* = P C_A \quad (C_A \ll K)$$

Valores típicos de P : $10^3 - 10^6$ lt/kg.

También es frecuente encontrar en la literatura la concentración de porción con dimensiones C_{AS} , la que se relaciona con C_{AS}^* mediante:

$$C_{AS} = P_{SED} \frac{1-m}{m} C_{AS}^*$$

(P_S es la densidad del sólido en suspensión)

~~$$C_{AS} = \frac{P_{SED}}{m} \left(1 - \frac{V_{LW}}{V}\right) C_{AS}^*$$~~

$$C_{AS} = \frac{P_{SED}}{m} \frac{V_{SED}}{V} C_{AS}^*$$

$$C_{AS} = \frac{C_{AS}^*}{m} \frac{M_{SED}}{V}$$

$$C_{AS} = \frac{C_{AS}^*}{m} C_{SED}$$

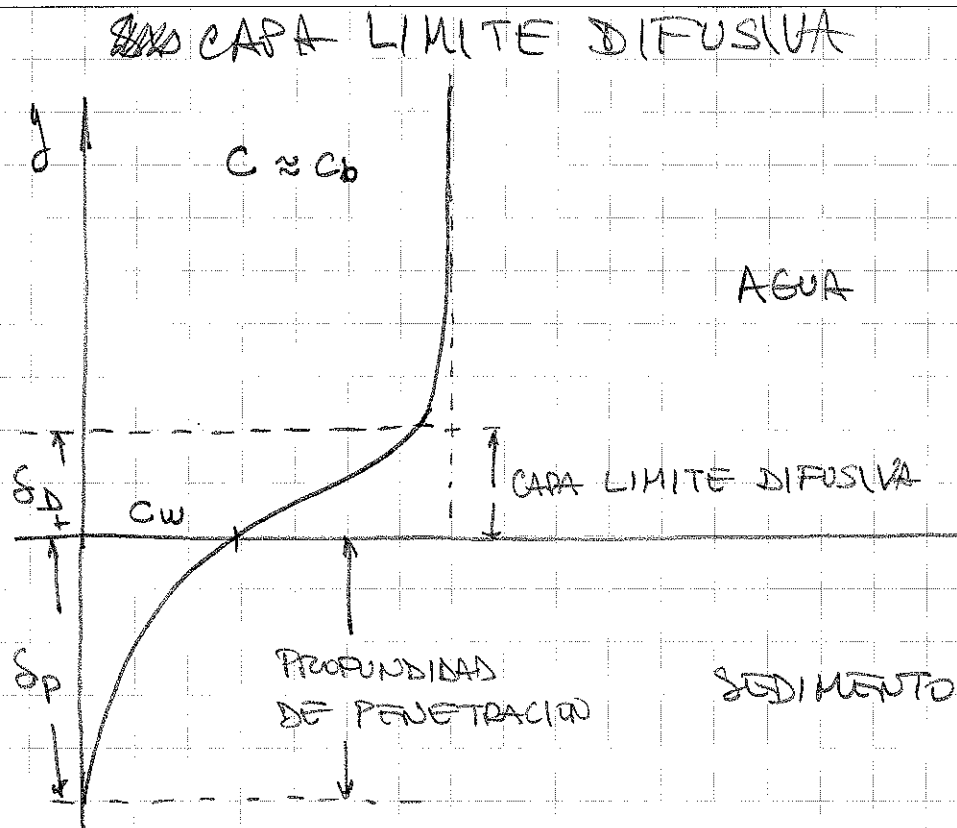
$$C_{AS} = K_D C_{SED}$$

K_D es un coeficiente de distribución (adimensional).

Notar que P es un parámetro físico-químico y K_D también depende de la concentración del sedimento y sus características físicas.

Los procesos en la interfaz agua-sedimento dependen de la hidrodinámica de la columna líquida, en particular del nivel de turbulencia.

Si no hay movimiento de la fase líquida, el intercambio es el resultado de los procesos de porción y difusión directamente. Luego el sistema comienza a fluir, permitiendo flujos advectivos y dispersivos a través del medio poroso. La perturbación está siempre presente, contribuyendo a una efectiva mezcla de los sedimentos. Si la columna líquida comienza a moverse, se genera un transporte de sedimento (gasto sólido de fondo). Finalmente, puede comenzar un proceso de resuspensión en el que los sedimentos son transportados como gasto sólido en suspensión (advección de los sedimentos).



Consideremos los procesos físicos que ocurren en una región adyacente a la interfaz agua-sedimento en la que dominan los efectos moleculares sobre los turbulentos. Esta región actúa como una resistencia al transporte de momento, masa y calor.

Para fijar ideas, consideremos el transporte de oxígeno disuelto entre el sedimento y la columna de agua. Por definición, en la región adyacente al sedimento, domina el transporte por difusión de O_2 , por esta razón se denomina CAPA DIFUSIVA.

El flujo de O_2 a través de la interfaz está dado por:

$$F = -D \left. \frac{dC}{dy} \right|_{y=0} = -D \frac{C_b - C_w}{\delta_D}$$

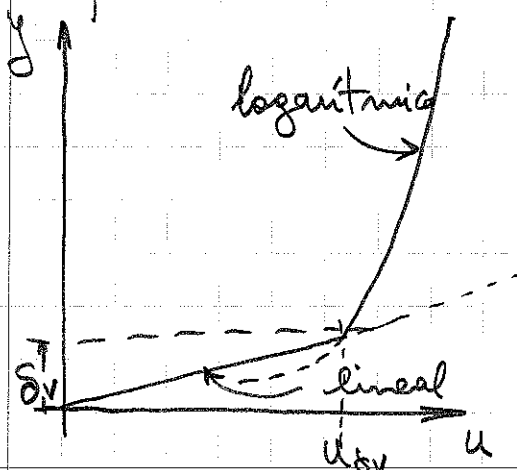
donde $C = C_w$ en $y = 0$
 $C = C_b$ en $y = \delta_D$

C_w es la concentración de O_2 en la interfaz
 C_b es la concentración de O_2 en la masa de la columna líquida.

Estimemos el espesor de la capa límite difusiva. Consideremos que en el límite está dado cuando el transporte difusivo deja de ser dominante. Podemos suponer que esto sucede cuando el transporte difusivo es del orden del advectivo, o sea:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} \sim D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}$$

Perfil de Velocidades:



$$\delta_v \approx 10 \frac{\nu}{u_*}$$

Espesor de la subcapa viscosa.

Es fácil demostrar que

$$u_{\delta_v} \sim U \quad (\text{velocidad media del flujo})$$

O sea: $\frac{u}{U} \sim \frac{y}{\delta_v}$

Podemos estimar el crecimiento de la subcapa viscosa como:

$$\frac{\delta_v}{x} \sim \frac{1}{Re_x^{1/2}}$$

(Recordar Blasius y su tesis de doctorado)

$$\left(\frac{\delta_v}{x}\right)^2 \sim \frac{\nu}{Ux}$$

Escalamos $u \frac{\partial C}{\partial x}$

$$u \frac{\partial C}{\partial x} \sim u \frac{\partial C}{\partial \delta_D} \frac{\partial \delta_D}{\partial x} \sim u \frac{\Delta C}{\delta_D} \frac{\delta_D}{x} \sim \gamma \frac{U}{\delta_v} \frac{\Delta C}{\delta_D} \frac{\delta_D \gamma}{\delta_v^2 U}$$

Estamos en $y \sim \delta_D$, o sea

$$u \frac{\partial C}{\partial x} \sim \delta_D \frac{U}{\delta_v^3} \frac{\Delta C \gamma}{U}$$

$$u \frac{\partial C}{\partial x} \sim \delta_D \frac{\Delta C}{\delta_v^3} \gamma$$

Escalamos ahora $D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}$

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \sim D \frac{\Delta C}{\delta_D^2}$$

Cuando la advección es del mismo orden que la difusión:

$$u \frac{\partial C}{\partial x} \sim D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}$$

$$\delta_D \frac{\Delta C \cdot v}{\delta_v^3} \sim D \frac{\Delta C}{\delta_D^2}$$

$$\left(\frac{\delta_D}{\delta_v} \right)^3 \sim \frac{D}{v}$$

O sea $\frac{\delta_D}{\delta_v} \sim Sc^{-1/3}$

Un valor típico de Sc para OD en agua es $Sc \sim 500$, o sea $Sc^{-1/3} = 0.125$

$$\frac{\delta_D}{\delta_v} \sim 0.1$$

O sea, la capa límite difusiva es la décima parte de la subcapa viscosa

Si $u_* \sim 0,1 \text{ m/s}$ (valor alto), $\delta_v \sim 10^4 / u_*$
 $\delta_v \sim 0,1 \text{ mm} \Rightarrow \delta_D = 0.01 \text{ mm}$

$u_* \sim 0,03 \text{ m/s}$ (valor más razonable),
 $\delta_v \sim 0,3 \text{ mm} \Rightarrow \delta_D = 0.03 \text{ mm}$

$u_* \sim 0.001 \text{ m/s} \Rightarrow \delta_v \sim 1 \text{ cm} \Rightarrow \delta_D \sim 1 \text{ mm}$

El flujo generalmente se expresa en términos del coeficiente de transferencia k_s :

$$F = k_s (C_w - C_b)$$

de donde resulta que $k_s = \frac{D}{\delta_D}$. Como es usual toda la hidrodinámica, fluido y O_2 lo representamos en el término k_s .

Propiedades del flujo: U, H

Propiedades del fluido: μ, ρ

Propiedades del O_2 : D

$$k_s = f(U, H, \mu, \rho, D)$$

Mediante análisis dimensional, obtenemos $6 - 3 = 3$ parámetros adimensionales:

$$Sh = \frac{k_s H}{D} \quad : \text{Número de Sherwood}$$

$$Re = \frac{UH}{\nu} \quad : \text{Reynolds}$$

$$Sc = \frac{\nu}{D} \quad : \text{Schmidt}$$

$$\therefore Sh = \phi(Re, Sc)$$

Experimentos de Steinberger y Hondzo (O. Eur. Engng, Vol 125, No 2, pp 192-200) dan

$$Sh = 0.012 Re^{0.89} Sc^{1/3}$$

Los mismos autores dan para el flujo:

$$\frac{F}{u_b (C_b - C_w)} = \frac{0.0024}{Re_b}, \quad Re_b = \frac{u_b \delta_b}{\nu}$$

FORMULACION DE UN MODELO DIFUSIVO A TRAVÉS DE LA INTERFAZ AGUA-SEDIMENTO

Hargalins, Gantzer y Stefan (2004) (Water Research, 38, pp 1-12) proponen que la demanda de oxígeno por parte del sedimento puede modelarse a partir del sistema de ecuaciones diferenciales siguiente:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left[(D_w + D_t) \frac{\partial C}{\partial y} \right]$$

COLUMNA DE AGUA
(1)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_s \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \frac{\mu C}{K_{O_2} + C}$$

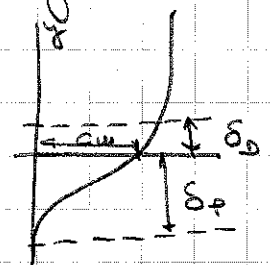
EN EL SEDIMENTO
(2)

donde C es la concentración de OD
 D_w es el coeficiente de difusión molecular de OD en agua
 D_t ídem turbulento
 D_s es el coeficiente de difusión efectivo de OD en el sedimento
 K_{O_2} es la constante de saturación
 μ es la tasa máxima de oxidación

las condiciones de borde son las siguientes:

Ec. 1 : $C = C_{\infty}$ para $y \gg \delta_d$
 $C = C_w$ para $y = 0$

Ec. 2 : $C = C_w$ para $y = 0$
 $C = 0$ para $y \leq -\delta_p$



Esta última condición indica que todo el OD es consumido dentro de la capa de penetración.

En un artículo, Higashino, Gantzer y Stefan consideran los siguientes valores de las constantes y coeficientes de difusión:

$$\mu = 200 \text{ mg/l/día}$$

$$K_{O_2} = 0,2 \text{ mg/l}$$

$$D_s = 0,5 D_w$$

$$D_t = v_T$$

$$\frac{v_T}{v} = \left(M \frac{u + \frac{1}{2}}{D} \right)^3, \quad m = 0,1$$

$$\frac{yu}{r} \leq 10$$