CAPÍTOL 5

CONCLUSIONS

Les conclusions més importants resultat del treball d'aquesta tesi són:

(1) S'ha presentat un nou procediment per avaluar la permeabilitat internodal d'un flux vertical en un sòl no saturat. El procediment és de fàcil implementació numèrica i es basa en l'estimació del pes necessari en el càlcul de la mitjana ponderada entre dos punts de càlcul consecutius. La correlació emprada per estimar el valor del pes s'ha obtingut a partir de la solució numèrica precisa per a diferents fluxos verticals en estat estacionari. La correlació és aplicable a sòls descrits segons les funcions hidràuliques de van Genuchten i Brooks i Corey i depèn del valor de la permeabilitat relativa d'ambdós punts, la distància internodal adimensional i paràmetres relatius al tipus de sòl.

(2) Els resultats presentats, consistents amb estudis previs, mostren com l'ús de la mitjana aritmètica sobreestima el valor de la permeabilitat relativa, mentre que la mitjana geomètrica tendeix a subestimar el valor de permeabilitat relativa. El mètode d'amitjanament per pesos proposat, permet utilitzar malles de càlcul més gruixudes mantenint un nivell de precisió raonable (comparat amb el resultat de la solució per a la malla fina) a l'hora de predir perfils de contingut volumètric en aigua i quantitat d'aigua infiltrada. Comparada amb les propostes clàssiques per avaluar la permeabilitat

internodal, els resultats mostren com el nostre procediment, tot i tenir una complexitat de càlcul semblant a la mitjana aritmètica i geomètrica, permet estalviar temps de computació en simulacions en més d'una dimensió mantenint un raonable nivell de precisió. L'aplicació del nostre procediment a episodis d'infiltració en sòl estratificats formats per diferents capes resulta ser la més precisa entre les diferents propostes d'amitjanament de permeabilitats internodals.

(3) S'ha desenvolupat un model numèric per al transport no isotèrmic de l'aigua i l'energia en la zona no saturada del sòl en condicions naturals caracteritzades per la presència d'elevats gradients verticals de temperatura i pressió capil·lar prop de la superfície. La comparació amb diferents treballs de camp ha permès comprovar la capacitat del model numèric (construït considerant només mecanismes de transport clàssics adaptats al medi porós) per reproduir qualitativament i quantitativa l'assecament progressiu d'un sòl inicialment saturat i subjecte a unes condicions ambientals naturals.

(4) La simulació d'un episodi d'assecament progressiu d'un sòl ras en condicions naturals ha evidenciat la mútua interacció entre el procés de transport d'energia i d'aigua prop de la superfície. La disminució del contingut volumètric en aigua a la superfície implica una reducció proporcional del flux de calor conductiu així com de la capacitat calorífica volumètrica del sòl provocant en conseqüència, un augment de la temperatura mitjana diària del sòl. Els resultats corresponents a l'evolució del flux d'evaporació a la superfície per dos mesos de l'any diferents, març i juny, en condicions no isotèrmiques mostren com durant el primer estadi la velocitat d'evaporació no és constant sinó que augmenta progressivament conforme el sòl s'asseca. Aquests increments són del 50% per a la simulació del mes de març i del 33% pel mes de juny. Aquest augment coincideix en ambdós mesos amb un lleuger increment de la temperatura mitjana diària de la superfície del sòl.

(5) Els resultats mostrats han permès igualment explicar l'oscil·lació diària del contingut volumètric en aigua a la superfície (oscil·lació mesurada i observada amb

anterioritat per diferents autors) d'acord amb lleugeres diferències entre el flux d'evaporació i el flux d'aigua a la superfície. Aquesta explicació, més senzilla i plausible, contrasta amb altres hipòtesis proposades prèviament per diferents autors.

(6) L'elevada resolució espacial del model numèric ha permès distingir prop de la superfície del sòl la presència d'un front sec que delimita el sòl en dues zones diferenciades, una seca i una humida. Els mecanismes de transport dominants en cadascuna d'aquestes zones són diferents. Així, mentre en la zona seca el transport de l'aigua es realitza majoritàriament en fase gas (fluxos difusius i dispersius i en menor mesura convectius), en la zona humida el transport es realitza principalment en fase líquida. Els resultats presentats mostren clarament i per primer cop la importància i la contribució del flux dispersiu al transport de l'aigua en la zona no saturada del sòl propera a la superfície per un procés d'assecament progressiu. Aquest resultat contrasta amb el fet que la majoria dels models per al transport de l'aigua en condicions no isotèrmiques no incorporen aquest mecanisme de transport.

(7) S'ha desenvolupat un model numèric per al transport no isotèrmic de compostos orgànics en la zona no saturada del sòl en condicions naturals. El model, incorpora els resultats que s'obtenen del model prèviament desenvolupat per al transport de l'aigua en condicions no isotèrmiques, incorpora els diferents mecanismes i processos que governen el transport del compost dins el sòl (convecció, difusió, dispersió), així com les relacions d'equilibri entre les diferents fases, relacions que depenen de la temperatura i el CVA. La comparació amb diferents estudis experimentals del transport de compostos orgànics presents en el sòl en condicions de camp ha evidenciat l'existència de fortes oscil·lacions diàries del flux de volatilització. Aquestes oscil·lacions, amb diferències de més d'un ordre de magnitud entre els valors màxims i mínims, estan governades per la temperatura del sòl proper a la superfície. Aquest comportament evidencia la complexa relació entre el transport de l'aigua, l'energia i el compost orgànic.

(8) Els resultats obtinguts en els diferents escenaris de sòl i compostos orgànics

seleccionats mostren com la influència de la dinàmica aquosa en el transport i migració del contaminant depèn de la major o menor tendència del compost a particionar-se en les diferents fases del sòl. Els resultats mostren com aquesta influència és major en el cas de compostos amb una constant de Henry relativament baixa (etanol i lindà), és a dir, per a aquells compostos amb una major tendència a particionar-se en la fase líquida de l'aigua.

(9) La contribució de la fase líquida i la fase gas al transport del compost des de l'interior del sòl cap a l'atmosfera varia al llarg del dia amb valors màxims per a ambdues fases localitzats en instants diferents. En el cas de compostos com l'etanol, amb una elevada solubilitat en aigua i una constant de Henry baixa, el mecanisme dispersiu domina el transport en la fase líquida, mentre que en el cas de compostos orgànics amb una forta tendència a volatilitzar-se, com és el cas de l'1,3-diclorbenzè, la difusió i la dispersió dominen el transport en fase gas.

(10) En condicions naturals, el règim diari de temperatura i contingut volumètric en aigua a la superfície pot modificar de manera apreciable el coeficient d'adsorció entre la fase sòlida i la fase gas. Aquestes modificacions poden afectar tant el procés difusiu del compost dins el sòl com el flux de volatilització a la superfície. Els resultats obtinguts en el cas de l'1,3-diclorbenzè, compost amb una elevada constant de Henry, mostren com depenent de si es considera a no adsorció, la diferència en la quantitat de massa volatilitzada al final d'un període de simulació de 5 dies de duració pot arribar a ser de fins a un 12%.