

MODELO DE PARTICULAS PARA EL TRANSPORTE DE SEDIMENTOS FINOS

Alfredo E. Trento*, Susana B. Vinzon†

*Lab. de Hidráulica Computacional, PEC/COPPE, UFRJ, CT Sala I-206, CEP 21945-970 Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, RJ. atrento@coc.ufrj.br

†Lab. de Dinâmica de Sedimentos Coesivos, UFRJ, CT Sala I-100, Cx Po 68508, CEP 21945-970 Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, RJ. susana@peno.coppe.ufrj.br

Palabras clave: flocos, partículas, velocidad, sedimentación

Resumen. *Se simuló con un modelo de trayectoria de partículas el transporte y la agregación de sedimentos finos en un canal fluvial, gobernados por sus tres procesos básicos: difusión Browniana, tensiones de corte del flujo y sedimentación diferencial. La velocidad de sedimentación fue calculada con un modelo de floculación fundamentado en la teoría de agregación de partículas dispersas. Los coeficientes de la tasa de remoción de sólidos se relacionaron con las funciones de frecuencia de colisión respectivas de cada mecanismo y una función de tiempo de sedimentación de cada floc.*

Los modelos de partículas están incluidos en la categoría de los métodos Lagrangeanos, donde el transporte de contaminante disuelto es disperso en el escurrimiento como consecuencia del movimiento aleatorio de un gran número de partículas discretas y pasivas. Están libres tanto de oscilaciones como de difusión numérica y por tanto de concentraciones negativas y de la pérdida de masa, problemas frecuentemente encontrados en los tradicionales métodos en elementos y diferencias finitas cuando el transporte está dominado por la advección. El modelo fue aplicado a un canal fluvial ligado a un estuario con una marea semidiurna, calculándose la velocidad de sedimentación, diámetro de flocos, concentraciones de sedimentos, erosión y depositación.

1 INTRODUCCIÓN

Diversos problemas de calidad de aguas superficiales están relacionados al transporte de sedimentos cohesivos o finos (menores a $62\ \mu\text{m}$), generalmente presentando una gran fracción de arcillas. Su gran superficie de contacto por unidad de masa y alta capacidad de sorción es responsable por el transporte de diversos contaminantes. Las arcillas tienen forma achatada y superficies iónicamente cargadas, creando fuerzas del mismo orden o mayores que la fuerza gravitacional, dando origen a una interacción electrostática entre las partículas¹. Consecuentemente, los granos de estos sedimentos no se presentan separadamente, como las arenas por ejemplo, sino como agregados o aglomerados de partículas, llamados flocos, que suelen estar compuestos por una gran cantidad de partículas de sólidos, y tener por lo tanto formas y densidades completamente distintas a las partículas individuales. De hecho, en observaciones *in situ*, raramente fue encontrado material arcilloso no floculado, excepto cuando cantidades de arena fueron suspendidas por fuertes corrientes u ondas². La formación de flocos depende no sólo de la concentración de los sólidos suspendidos, sino también de la turbulencia del escurrimiento, de los distintos iones presentes en el agua, de la temperatura, además de la presencia de materia orgánica coloidal, microbios³ y polímeros orgánicos segregados por algas y bacterias que son pegajosos y afectan significativamente los procesos de agregación. La floculación y depositación de materia suspendida tiene un efecto importante sobre la calidad del agua pues los sedimentos cohesivos son responsables por la formación de deltas, corrientes de turbidez en estuarios, de la carga de demanda bioquímica de oxígeno, del transporte de metales pesados, bacterias y virus⁴. En ríos, por lo general la turbulencia del escurrimiento mantiene permanentemente en suspensión a los sedimentos finos. Sin embargo, en escenarios con menor intensidad de la turbulencia, como por ejemplo en ambientes marinos en general y estuarios en particular, los sedimentos encuentran condiciones propicias para la depositación y de tal modo el lecho de esos ambientes se transforman en el último sumidero de los contaminantes⁵. De tal modo la determinación de la velocidad promedio en la vertical de caída de los flocos, W_s , es fundamental para cualquier estimación ligada a la depositación de sedimentos en vías navegables de cursos fluviales, colmatación de embalses, o para estudios de calidad de aguas y de sedimentos, por contaminación de constituyentes orgánicos o inorgánicos.

El objetivo de este trabajo es analizar la dinámica de floculación de sedimentos finos en ríos y estuarios, en base a un modelo Lagrangeano de trayectoria de partículas. El modelo de floculación calcula la velocidad terminal de caída de los flocos, en base a algoritmos que representan los mecanismos de agregación por colisiones originadas en el movimiento Browniano, las tensiones de corte de la turbulencia y la sedimentación diferencial y el mecanismo de desagregación de los flocos propio de la turbulencia del escurrimiento.

Este trabajo fue subsidiado por el Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ) de Brasil.

2 PROCESOS DE FLOCULACIÓN

La ecuación integrada en la vertical para el transporte de sedimentos finos en cuerpos de agua se escribe del siguiente modo⁶:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial UC}{\partial x} + \frac{\partial VC}{\partial y} = \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial x} \left(h D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial y} \left(h D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{E}{h} \left(\frac{t_b}{t_e} - 1 \right) - \frac{W_s}{h} C_b \left(1 - \frac{t_b}{t_d} \right) \quad (1)$$

con U y V las velocidades medias en la vertical, h la profundidad total, C la concentración media en la vertical, C_b es la concentración de sedimentos suspendidos a una corta distancia del lecho, E es una tasa de erosión, D_{xx} , D_{yy} los coeficientes de dispersión en las direcciones horizontales, x e y , t es el tiempo. t_e es la tensión de corte crítica para la erosión, t_d es la tensión de corte límite por debajo de la cual ocurre depositación y t_b es la tensión de corte del escurrimiento. Cuando $t_b > t_e$ ocurre erosión, cuando $t_b < t_e$ ocurre depositación y cuando $t_d \leq t_b \leq t_e$, ambos procesos están en equilibrio. El cálculo de los cambios del nivel del lecho por erosión o sedimentación, se realiza a partir de la determinación del espesor de sedimentación, $h_f = h_f(x, y, t)$, Luego de n intervalos de tiempo, calculado con la siguiente ecuación⁷:

$$h_f = \left[\frac{1}{r_D} \sum_{i=1}^n (m_d - m_e)_i \right] Dt \quad (2)$$

con m_e y m_d las tasas de erosión y depositación respectivamente.

La floculación es un proceso dinámico que depende de las tasas de agregación y desagregación de los sedimentos. Las agregaciones por colisiones entre las partículas, provocando floculación, resultan del movimiento Browniano, de las tensiones de corte de la corriente, y de la sedimentación diferencial de las partículas⁸. En cuanto al proceso de desagregación es fundamental la tensión de corte del flujo, que aún sin colisiones puede provocar la ruptura de los flocos. Las colisiones debidas a las tensiones de corte son originadas por los gradientes de velocidad generados en el seno del fluido, y son particularmente importantes en los cuerpos de agua naturales, donde el escurrimiento es altamente turbulento. En regiones costeras, en la región de la termoclina, en la interfase agua-aire o donde hay acción de ondas y viento, el efecto de corte prevalece. Las perturbaciones de la corriente aumentan el potencial de colisión entre las partículas, sin embargo, un incremento importante de la turbulencia tenderá más a quebrar los flocos ya formados que a promover su crecimiento⁹. La frecuencia de colisión debida a las tensiones de corte de un escurrimiento turbulento, b_{sh} ($m^3 s^{-1}$), se expresa:

$$b_{sh}(v_i, v_j) = \sqrt{\frac{8p}{15}} G R_{ij}^3 = 1.30 G R_{ij}^3 \quad (3)$$

con $v_i = 1/6 p d_p^3$, el volumen de las partículas de la clase i , donde d_p es el diámetro de la partícula (y en forma análoga con las partículas de la clase j). El parámetro G es también llamado gradiente de velocidad medio del fluido en los experimentos de laboratorio con floculadores Couette¹⁰. Para escurrimientos turbulentos Camp y Stein⁸ propusieron que el mecanismo de colisión sea tratado en forma análoga al escurrimiento laminar, siendo la

frecuencia de colisión una función del gradiente efectivo de velocidad o más propiamente de un parámetro de disipación G (s^{-1}). La expresión de ese parámetro de disipación, $G=(e/u)^{0.5}$, fue deducida por Saffman y Turner¹¹, quienes estudiaron los procesos de formación de gotas de agua en nubes, según procesos turbulentos, con e la tasa de disipación de la energía cinética de la turbulencia, y u la viscosidad cinemática del fluido. Mediante la aproximación de Nezu y Nakagawa¹² para e , se calcula G con:

$$G = \sqrt{\frac{t_b u_*}{m h k} \frac{1 - V}{V}} \approx \sqrt{\frac{t_b u_*}{m z k}} \quad (4)$$

Donde $z=z/h$, con z la altura desde el lecho, $k=0.41$ es el coeficiente de von Karman, usualmente considerado constante tanto para el transporte de sedimentos finos y gruesos, m es la viscosidad dinámica del fluido. La tensión de corte puede expresarse según la clásica distribución en la vertical, $t_b = r u_*^2 (1 - z/h)$, con u_* la velocidad de corte. De tal modo el valor de G en la vertical, sólo supera el valor de $100 s^{-1}$ en una región muy próxima al lecho, mientras que en la porción superior de la vertical, G está por debajo de $10 s^{-1}$. El tercer mecanismo de floculación, la sedimentación diferencial, es debido a la colisión de las partículas más rápidas que al caer colisionan con partículas más lentas y pueden eventualmente agregarse. La función frecuencia de colisión para densidad constante de los sólidos, b_{ds} ($m^3 s^{-1}$), está dada por la expresión:

$$b_{ds}(v_i, v_j) = \left(\frac{\rho}{p}\right)^{4/3} \frac{\rho g (r_s - r_w)}{72 m} (v_i^{1/3} + v_j^{1/3})^2 |v_i^{2/3} - v_j^{2/3}| \quad (5)$$

donde r_w es la densidad del fluido. Cuando la concentración es mayor que aproximadamente 10000 mg l^{-1} , la velocidad de los flocos disminuye debido al flujo ascendente del fluido desplazado por ellos mismos. En esos casos, cuando el flujo hacia arriba es tan importante que el arrastre sobre los flocos se equilibra con la fuerza de gravedad, se produce en la proximidad del lecho un estado de equilibrio dinámico sin un movimiento vertical neto de los flocos¹³. De acuerdo con la teoría de Smoluchowski¹⁴ la frecuencia de colisión debido al movimiento Browniano, b_b , está dada por:

$$b_b(v_i, v_j) = \frac{2 k_b T}{3 m} \frac{(v_i^{1/3} + v_j^{1/3})^2}{v_i^{1/3} v_j^{1/3}} \quad (6)$$

donde k_b es la constante de Boltzman ($1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Nm } ^\circ\text{K}^{-1}$) y T es la temperatura absoluta.

2.1 Desagregación por tensiones de corte

No existen actualmente soluciones analíticas para cuantificar los coeficientes específicos de este proceso con certeza¹⁵, que dependen del número de partículas por unidad de volumen, de las propiedades físico-bioquímicas de los agregados, de su densidad efectiva, geometría y

tensiones de resistencia. Desde un punto de vista empírico, Partheniades¹⁶ formuló la ecuación $t_s = a_2 Dr^{b_2}$, para calcular t_f la tensión de resistencia al corte, en función de la densidad diferencial de los flocos Dr , con a_2 y b_2 parámetros que dependen de los sedimentos. Para sedimentos de la bahía de San Francisco, Krone¹⁷ determinó $a_2=3.1$ y $b_2=8.3 \cdot 10^{-8}$.

3 MODELO DE FLOCULACIÓN

Para una mezcla de agua y sedimentos en reposo, la velocidad de sedimentación W_s puede ser escrita:

$$W_s = \frac{\partial C}{\partial t} / \frac{\partial C}{\partial z} \quad (7)$$

A partir de la teoría de Smoluchowski¹⁴, los trabajos de Hunt¹⁸ y otros investigadores, Farley y Morel¹⁹ supusieron la linealidad de la ecuación de balance que integra todos los procesos de agregación por colisiones binarias. Efectuaron las siguientes hipótesis necesarias para analizar la distribución de los agregados:

1. Se supone la esfericidad de las partículas antes y después de cada agregación.
2. Las funciones de colisión (para el movimiento Browniano, las tensiones de corte y la sedimentación diferencial) son aditivas.
3. La eficiencia de los mecanismos de agregación es independiente de los tamaños de las partículas.
4. La densidad de los flocos se mantiene constante.
5. La columna de agua es verticalmente homogénea con respecto a la concentración.

Para tales casos, la tasa de remoción de sólidos fue expresada como la suma de tres expresiones potenciales, mediante la siguiente expresión semiempírica:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -B_{ds} C^{2.3} - B_{sh} C^{1.9} - B_b C^{1.3} \quad (8)$$

donde los diferentes mecanismos de floculación están contemplados en los coeficientes: B_{ds} , B_{sh} y B_b para la sedimentación diferencial (importante para altas concentraciones), para la agregación por tensiones de corte (importante para concentraciones intermedias), y para el movimiento Browniano, mecanismo predominante para bajas concentraciones y tamaños de granos.

$$B_b = 1.33 \left(\frac{S}{h} \right)^{0.60} r_f^{-0.30} (a_b K_b)^{0.40} \quad (9)$$

$$B_{sh} = 10 \left(\frac{S}{h} \right)^{0.15} r_f^{-0.90} (a_b K_b)^{0.10} (a_{sh} K_{sh})^{0.75} \quad (10)$$

$$B_{ds} = 3.12 \left(\frac{S}{h} \right)^{-0.32} r_f^{-1.30} (a_b K_b)^{0.17} (a_{ds} K_{ds})^{1.15} \quad (11)$$

con $K_b = 2k_b T / 3m$, $K_{sh} = G/p$; $K_{ds} = (6/p)^{.333} (g/12n)(r_f - r_w)/r_w$, $(S/h) = (6p^2)^{.333} (g/3nh) (r_f - r_w)/r_w$, donde r_f es la densidad de los flocos, g es la aceleración de la gravedad, n es la viscosidad cinemática del fluido, T es la temperatura en grados Kelvin, a_b , a_{sh} y a_{ds} son parámetros de eficiencia de colisión de cada mecanismo y h , en este caso, es la altura de la columna de sedimentación. Los coeficientes K_{ds} , K_{sh} y K_b son obtenidos a partir de la frecuencia de colisión para cada mecanismo y S/h es un factor de escala del tiempo de sedimentación de las partículas. W_s entonces se determina con la expresión:

$$W_s = \left(\frac{\partial C}{\partial t} = -B_{ds} C^{2.3} - B_{sh} C^{1.9} - B_b C^{1.3} \right) / \frac{\partial C}{\partial z} \quad (12)$$

Los coeficientes están directamente relacionados con las funciones de frecuencia de colisión respectivas de cada mecanismo y una función del tiempo de sedimentación de cada floco, siendo funciones de G , r_f , r_w , u , la aceleración de la gravedad, g y la temperatura de la mezcla, T^{19} . Una aplicación del modelo de floculación a un tubo de sedimentación puede consultarse en Trento y Vinzón²⁰.

3.1 Parametrización de la desagregación por tensiones de corte turbulentas

El coeficiente K_{sh} debido a las tensiones de corte para incluir el efecto de desagregación, que se redefine del siguiente modo cuando $t_s \leq t_b$:

$$K_{sh}(x, y, t) = \frac{G}{p} - q G \left(1 + \frac{t_b}{t_s} \right)^f \quad (13)$$

donde el segundo término del miembro derecho representa la desagregación por tensiones de corte t_b . La tensión de resistencia que desarrollan los flocos se expresan con t_s según la ecuación de Partheniades, en la que q y f son coeficientes constantes. Esta ecuación empírica, no ha sido todavía verificada en laboratorio. Se destaca que tanto K_{sh} como G son funciones de las variables espaciales y el tiempo, en que ambos fueron constantes. Por lo tanto, K_{sh} es el resultado de la diferencia entre un proceso de agregación por colisiones de partículas, y otro de quiebre de los flocos, por tensiones de corte.

3.2 Calculo del diámetro de flocos

El modelo anteriormente descrito permite calcular W_s , sin embargo no da información acerca del diámetro medio de los flocos. El balance de fuerzas para un floco cayendo en forma estacionaria en un medio infinito puede describirse con la siguiente ecuación^{21,22}:

$$\frac{\rho D_f^3}{6} g(r_f - r_w) = C_D r_w W \frac{\rho D_f^2}{4} \frac{W_s^2}{2} \quad (14)$$

con C_D el coeficiente de arrastre, D_f el diámetro de los flocos y W la relación de resistencia experimentada por un floco relativa a la de una esfera sólida. Para flocos impermeables se puede adoptar $W=1$, aproximación justificable para condiciones de flujo reptante ($Re < 1$) alrededor del floco. Esta hipótesis es totalmente compatible para flocos con escalas espacial y de velocidades del mismo orden que la de la micoescala de Kolmogorov. Para calcular el coeficiente de arrastre C_D se empleará la conocida relación:

$$C_D = \frac{K}{Re} \quad (15)$$

válida para número de Reynolds de los flocos, $Re < 1$, con $Re = W_s D_f / u$, y K una constante que depende de la esfericidad del floco. A partir de estas relaciones, el diámetro de los flocos se puede calcular, luego de operar algebraicamente con las ecuaciones (14) y (15) con:

$$D_f = \sqrt{\frac{3 K m}{4 g D r_f} W_s} \quad (16)$$

con $D r_f = r_f - r_w$ la densidad diferencial de los flocos. Se adoptó²³ $K=45$ (con $W=1$). Para esferas con $0.2 < Re < 120$, Otras fórmulas²⁴ para C_D :

Tabla 1: Cálculo de C_D en función del Re

C_D	Intervalo de Re	
$\frac{24}{Re} (1 + 0.1315 Re^{(0.82-0.05w)})$	$0.1 < Re \leq 7$	(17)
$\frac{24}{Re} (1 + 0.0853 Re^{(1.093-0.105w)})$	$7 < Re \leq 120$	(18)

Con $w = \log_{10} Re$.

Para esferas impermeables, en el intervalo $1 < Re < 120$, se empleó la fórmula²⁵:

$$C_D = 0.28 \left(1 + \frac{9.06}{\sqrt{Re}} \right)^2 \quad (19)$$

en esta último caso, en que se define un coeficiente de arrastre $C_D=f(Re)$, con alguna de las ecuaciones (17), (18) y (19), se adoptó un procedimiento iterativo para calcular D_f .

4 MODELO DE PARTÍCULAS

En un trabajo pionero²⁶ se empleó el método de trayectoria de partículas para el cálculo de la vorticidad al resolver las ecuaciones de Navier Stokes, para el flujo bidimensional alrededor de un cilindro circular a alto número de Reynolds. Desde entonces los modelos de trayectoria de partículas han sido aplicados a una amplia variedad de problemas de ingeniería: flujos en medios porosos con sustancias conservativas y reactivas^{27,28,29}; en sistemas heterogéneos^{30,31,32}; en medios subterráneos fracturados^{33,34}; flujos turbulentos de masa y calor desde las paredes de un canal³⁵; derrames de aceite en el mar³⁶; transporte de sedimentos cohesivos en grandes cursos de agua³⁷, cálculo de resuspensión de sedimentos del lecho marino³⁸; para simular el transporte de solutos en aguas costeras³⁹. De igual modo, se han desarrollado modelos 3D híbridos para simular el transporte en el campo cercano y el lejano^{40,41}. Este método está incluido en la categoría de los Lagrangeanos, en los cuales el transporte del constituyente es dispersado en el escurrimiento como consecuencia del movimiento aleatorio de un gran número de partículas discretas pasivas. Están libres tanto de oscilaciones como de difusión numérica^{42,43}, y por lo tanto de concentraciones negativas y de pérdida de masa, problemas frecuentes en los tradicionales métodos en Diferencias Finitas y Elementos Finitos cuando el transporte está dominado por la advección⁴⁴. Estos métodos presentan dificultades en las cercanías de las fuentes, o, en general, donde se producen fuertes gradientes de concentraciones. Los modelos de partículas, en cambio, son muy apropiados para esa clase de problemas³⁹. El cálculo de concentraciones es realizado en forma independiente de la grilla numérica utilizada para la solución del cálculo de velocidades, motivo que también lo hace apropiado para la representación de fuentes puntuales y en línea. La principal desventaja del método es que, si el número de partículas utilizadas, NP , fuera insuficiente en relación con el tamaño de la grilla, la distribución calculada puede no ser una función suave, debido a la naturaleza estocástica de la etapa dispersiva⁴⁵. No obstante, el aumento de NP puede resultar en un incremento significativo del tiempo computacional. Matemáticamente, el proceso de transporte puede ser expresado para un dominio unidimensional

$$x^{n+1} = x^n + \left(U + \frac{dD}{dx} \right) Dt + z \sqrt{2 D Dt} \quad (20)$$

donde x^{n+1} y x^n son las posiciones en los intervalos de tiempo $n+1$ y n , z es un número aleatorio normalmente distribuido, con media cero y variancia unitaria, U es la velocidad del fluido y D es un coeficiente de difusión no homogéneo. El segundo término del lado derecho de la ecuación (20) representa la suma de dos desplazamiento, uno por advección de la

partícula ($U Dt$), y otro por la inclusión de un término de “deriva” propio de condiciones de turbulencia no homogénea, en que la variación espacial del coeficiente de dispersión es importante⁴⁶. Los detalles de la inclusión del término fueron explicados por⁴⁷. El último término indica el desplazamiento aleatorio de la partícula. Hathhorn⁴⁸ demostró la equivalencia de resultados, entre el empleo de una variable z uniformemente distribuida vs. z normalmente distribuida, y que por siguiente significa un considerable ahorro de tiempo computacional. Entonces el número aleatorio z puede ser representado por una variable aleatoria independiente estandarizada, con distribución uniforme en el intervalo $(-0.5, 0.5)$, obtenida con un generador de números aleatorios de una computadora, que provee números r en el intervalo $(0;1)$, con media 0.5 y desvío $\sqrt{1/12}$. Entonces, la ecuación (20) puede expresarse del siguiente modo

$$x^{n+1} = x^n + \left(U + \frac{dD}{dx} \right) Dt + (2r - 1) \sqrt{6 D Dt} \quad (21)$$

La presencia de fuentes se representa mediante la inyección de un número finito de partículas, NP , a una tasa correspondiente con la descarga de la sustancia simulada. La masa de cada partícula i se representa por una cantidad de masa MP_i . Las partículas son desplazadas una determinada distancia en cada intervalo de tiempo Dt , debido al efecto combinado de la advección y la dispersión. En la elección de los intervalos temporal y espacial se impone la condición de que el máximo recorrido de una partícula, no supere el tamaño de la celda. De esta manera cada partícula necesita más de un paso de tiempo para pasar de una celda de cálculo a otra, evitando extrapolar las velocidades de la celda origen más allá de las celdas vecinas. Esta condición es importante cuando el campo de velocidades no es uniforme. La aplicación del método puede extenderse a problemas en dos y tres dimensiones. Las concentraciones se calculan contando la cantidad de partículas en cada celda de la grilla, multiplicando por la masa de cada partícula, dividiendo por el volumen de la celda y asignando la concentración a la coordenada del centro de la misma. Otras formas de calcular C y detalles del método pueden consultarse en Jin⁴⁹.

4.1 Cálculo de las velocidades de las partículas

Para el transporte de sustancias pasivas, la advección de la partícula es considerada idéntica a la velocidad de la corriente en el punto donde se encuentra la partícula. Por tal motivo, el algoritmo seleccionado para la interpolación de velocidades a cada intervalo de tiempo es una parte clave del modelo⁵⁰. La velocidad para cada partícula se obtiene a partir de las calculadas por el modelo hidrodinámico, en los nodos de la celda en que se encuentra la partícula. Para aplicaciones a casos reales, los esquemas de primer orden son adecuados según algunos autores³⁹. Hassan³¹ emplearon diferentes esquemas de interpolación de velocidades (lineal, bilineal, distancia inversa) destacando que los resultados obtenidos fueron semejantes. Para otros autores⁵⁰, son necesarios esquemas de tercer orden o mayor para garantizar cálculos seguros de la posición de la partícula. En este trabajo se implementaron interpolaciones bilineales, y de segundo orden en base a la expansión en serie de Taylor. De acuerdo con el clásico ensayo de Molenkamp⁴⁹ se observaron ventajas con la utilización de la

interpolación de segundo orden con respecto al esquema bilineal, siendo que el método lineal produce una trayectoria errática de la partícula transportada.

5 IMPLEMENTACION DEL MODELO Y RESULTADOS

Se implementó el modelo de partículas a un canal bidimensional, cuya planta y batimetría se muestra en la. El canal es rectangular con un ancho constante de 240 m y 7300 m de largo, por el que escurre un caudal de $400 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. Tiene un primer tramo de profundidad constante de 3 m entre las progresivas 0 a 3700 m (a una cota de 97 m), y un segundo tramo con profundidades linealmente variables, hasta 15 metros al final, como se muestra en la Figura 1 (las cotas están referidas a un plano arbitrario). En la sección de salida del canal actúa una oscilación del nivel con período de 12 horas y una amplitud de 0.70 m y una velocidad máxima de 0.30 ms^{-1} , que produce una variación gradual de velocidades a lo largo del canal. La simulación efectuada corresponde a una primera aproximación a un escurrimiento fluvial que descarga en un estuario sometido a una marea semidiurna.

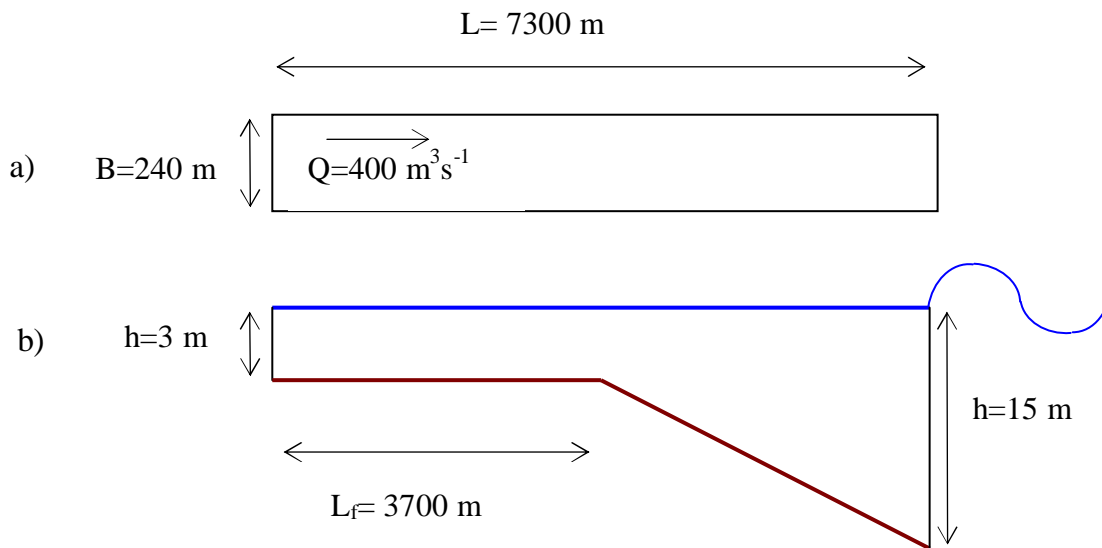


Figura 1: a) Vista en planta de un canal rectangular, y b) perfil batimétrico y onda de marea ingresante por el borde de aguas abajo.

Se simuló la variación espacial y temporal de concentraciones de sedimentos suspendidos, tamaños de flocos, y velocidades de sedimentación. Se adoptaron intervalos espaciales de 60

m y temporal de 60 s, un coeficiente de dispersión longitudinal $D_{yy}=0.12 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ y transversal $D_{xx} = 0.01 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, calculados según Elder⁵¹. Las tensiones de corte críticas para erosión y depositación fueron $t_e=0.30 \text{ Nm}^{-2}$ y $t_d=0.10 \text{ Nm}^{-2}$, respectivamente. Se calculó la desagregación de flocos por tensiones de corte según la ecuación de Partheniades, adoptando $Dr_f=200 \text{ kg m}^{-3}$. El ingreso de masa al sistema se simuló mediante cuatro fuentes en línea ubicadas en el extremo de aguas arriba del tramo fluvial, suministrando cada una 100 partículas por Dt , equivalente a una condición de borde $C=0.075 \text{ gl}^{-1}$. Se adoptaron condiciones de borde reflejantes en los bordes cerrados, para lo cual se realizó un experimento numérico en base a una solución analítica⁵² para una fuente en línea vertical continua en un flujo turbulento. Los resultados mostraron un buen funcionamiento del modelo con la adopción de condiciones reflejantes. La condición inicial se definió mediante concentraciones nulas de sedimentos en la totalidad del dominio. Se ejecutó el modelo para un tiempo de 72 horas, necesiándose de un primer intervalo de 8 horas para lograr que los sedimentos alcancen el borde de salida del estuario. Se muestran parámetros de disipación G , concentraciones de sedimentos suspendidos C , W_s y D_f calculados en la Figura 2 para $t=63$ hs, en la Figura 3 para $t=66$ hs y en la Figura 4 para $t=69$ hs, tiempos correspondientes al nivel de agua h más alto en el estuario, al mismo nivel en todo el tramo, y al nivel más bajo en el estuario, respectivamente. Estos resultados fueron logrados con parámetros de eficiencia de colisión de cada mecanismo, $a_b=a_{sh}=a_{ds}=0.15$. El modelo calcula D_f aproximadamente uniformes y más pequeños en el tramo fluvial y fuertemente variables en el tramo “estuarino” y mayores, en correspondencia con los menores niveles de turbulencia del escurrimiento, parametrizados con G . Cuando aumenta el nivel en el “estuario” disminuyen C y G , cuyo correlato es el aumento de las velocidades de sedimentación, y de los tamaños de flocos por un menor nivel de turbulencia disponible para el quiebre de flocos, tal como se advierte en la Figura 2. La disminución de nivel en el “estuario”, respecto del equilibrio de niveles (Figura 3), implica un aumento relativo de G y de las concentraciones en todo el tramo fluvial, que produce menores D_f y W_s , como se advierte en la Figura 4. Se calcularon D_f y W_s , máximos de $36 \mu\text{m}$ y 0.15 mms^{-1} respectivamente, en el tramo fluvial, y $81 \mu\text{m}$ y 0.78 mms^{-1} en el “estuario”, respectivamente. Los resultados muestran erosión neta a lo largo de todo el tramo fluvial y por el contrario, depositación, en el tramo de estuario.

6 CONCLUSIONES

Los primeros resultados del modelo de partículas, implementado a un dominio muy simplificado, proporcionan resultados alentadores en cuanto al funcionamiento correcto de los mecanismos de floculación. Se espera avanzar en las determinaciones de las tensiones de resistencia de los flocos y la elaboración de un algoritmo capaz de parametrizar la densidad variable de los flocos.

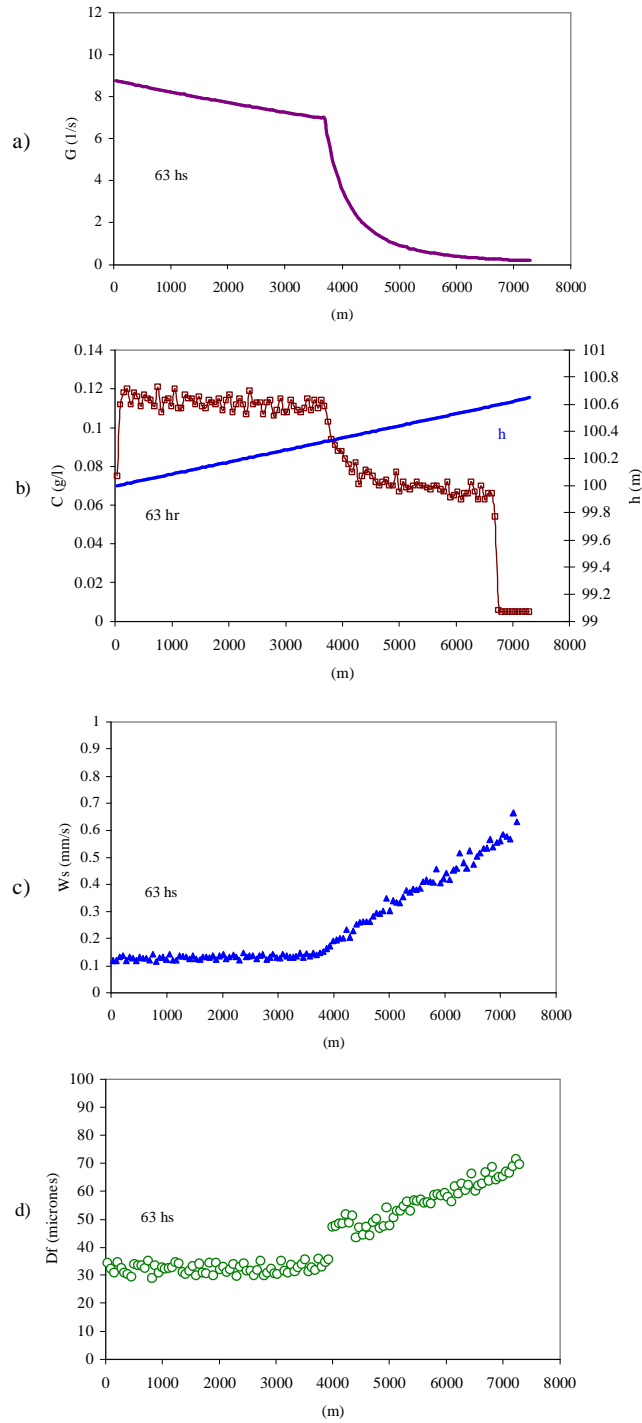


Figura 2: Variables en $t=63$ horas. a) Parámetro de disipación G , b) Distribución de concentraciones C y nivel de agua h , c) Velocidad de sedimentación W_s , y d) Diámetro de flocos D_f .

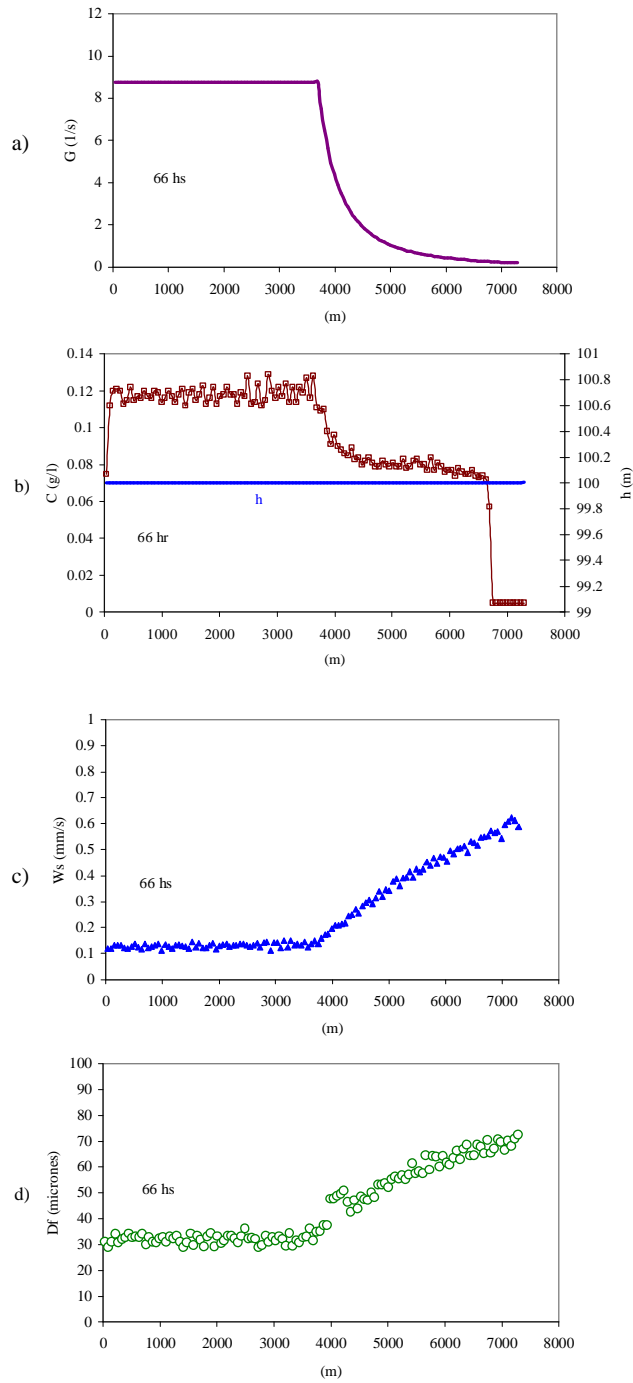


Figura 3: Variables en $t = 66$ horas. a) Parámetro de disipación G , b) Distribución de concentraciones C y nivel de agua h , c) Velocidad de sedimentación W_s , y d) Diámetro de flocos D_f .

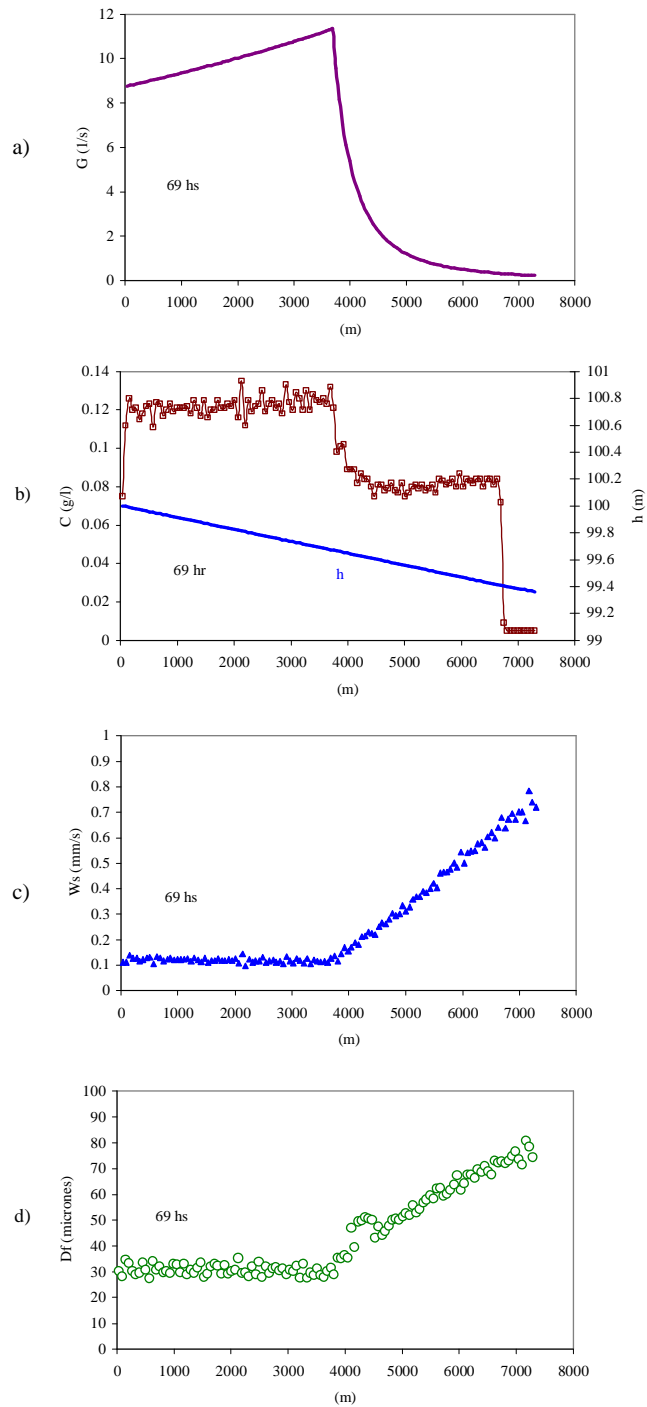


Figura 4: Variables en $t=69$ horas. a) Parámetro de disipación G , b) Distribución de concentraciones C y nivel de agua h , c) Velocidad de sedimentación W_s , y d) Diámetro de flocos D_f .

REFERENCIAS

- [1] K.R. Dyer, *Coastal and Estuarine Sediment Dynamics*, J. Wiley, London, UK, 342, (1986).
- [2] D. Eisma, A.J. Bale, M.P. Dearnaley, M.J. Fennessy, W. van Leussen, M.A. Maldiney, A. Pfeiffer and J.T. Wells, "Intercomparison of in situ suspended matter (floc) size measurements", *Journal of Sea Research* **36** (1/2): 3-14, (1996).
- [3] A.J. Mehta, E. Hayter, W.R. Parker, R.B. Krone and A. Teeter, "Cohesive Sediment Transport I: Process Description", *J. of Hydraulic Engineering*, **115**(8), 1076-1093 (1989).
- [4] J.K. Edzwald, J.B. Upchurch and C.R. O'Melia, "Coagulation in Estuaries", *Environmental Science & Technology*, **8**(1), 58-63, (1974).
- [5] R.J. Gibbs, "Effect of Natural Organic Coatings on the Coagulation of Particles", *Environmental Science & Technology*, **17** (4), 237-240, (1983).
- [6] R. Ariathurai, A Finite Element Model for Sediment Transport in Estuaries, Ph. D. Thesis, Department of Civil Engineering, University of California, Davis, (1974).
- [7] J. Jiang and A.J. Mehta, "Fine-Grained Sedimentation in a Shallow Harbor", *J. of Coastal Research*, **17**, 2, 389-393, (2001).
- [8] P.Y. Burban, J. Xu, J. McNeil and W. Lick, "Settling speeds of flocs in fresh water and seawater", *J. of Geophysical Research*, **95**, 18213-18220, (1990).
- [9] W. van Leussen, "The variability of settling velocities of suspended fine-grained sediment in the Sem estuary", *J. of Sea Research*, **41**, 109-118 (1999).
- [10] C-H Tsai, S. Iacobellis and W. Lick, "Flocculation of Fine-Grained Lake Sediments Due to a Uniform Shear Stress", *J. Great Lakes Res.*, **13** (2), 135-146, (1987).
- [11] P.G. Saffman and J.S. Turner, "On the collision of drops in turbulent clouds", *J. of Fluid Mechanics*, **1**, 16-30, (1956).
- [12] I. Nezu and H. Nakagawa., "Turbulence in open-channel flows", International Association for Hydraulic Research, Monograph Series, Balkema, Rotterdam, (1993).
- [13] L.C. van Rijn, *Principles of sediment transport in rivers, estuaries and coastal seas*, The MIT Press, (1993).
- [14] M. Smoluchowski, "Versuch einer Mathematischen Theorie der Koagulations-kinetic Kolloid Lösungen", *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, Leipzig, **92**, 129-168, (1917).
- [15] J.C. Winterwerp, On the dynamics of high concentrated mud suspension, Doctoral Thesis, Technische Universiteit Delft, (2000).
- [16] E. Partheniades, "Turbulence, flocculation, and cohesive sediment dynamics", *Nearshore and Estuarine Cohesive Sediment Transport*, 42. Coastal and Estuarine Studies, A. J. Mehta, ed. A., Geophys. Union, Washington, DC, 40-59, (1993).
- [17] R.B. Krone, Flume studies of the transport of sediment in estuarial shoaling process, Final report, Hydr. Engrg. Lab. And Sanit. Engrg. Res. Lab., University of California, Berkeley, CA, (1962).
- [18] J.R. Hunt, "Self-similar particle-size distributions during coagulation: theory and experimental verification", *J. of Fluids Mechanics*, **122**, 169-185 (1982).

- [19] K.J. Farley, F.M. Morel, "Role of coagulation in the kinetics of sedimentation", *Environmental Science Technology*, **20**, 187-195, (1986).
- [20] A. Trento, S. Vinzón, Velocidade de Sedimentação dos Flocos, 5º Encontro Nacional de Engenharia de Sedimentos, ENES, São Paulo, Brasil, 285-293, (2002).
- [21] R.M. Wu and D.J. Lee, "Hydrodynamic drag force exerted on a moving floc and its implication to free-settling tests", *Water Research*, **32**, n. 3, 760-768 (1998).
- [22] G. Neale, N. Epstein and W. Nader, "Creeping flow relative to permeable spheres", *Chemical Engineering Science*, **28**, 1865-1874 (1973).
- [23] N. Tambo and Y. Watanabe, "Physical Characteristics of Floccs-I. The Flocc Density Function and Aluminium Flocc", *Water Research*, **13**, 409-419 (1979).
- [24] J.H. Masliyah and M. Polikar, "Terminal velocities of porous spheres", *Canadian J. Chem. Engng.*, **58**, 299-302 (1980).
- [25] F. Concha and E.R. Almerdra, "Settling velocities of particulate system. I. Settling velocities of individual spherical particles", *Int. J. Min. Process.*, **5**, 349-367 (1979).
- [26] Chorin, A. J., "Numerical study of slightly viscous flow", *J. of Fluid Mechanics*, **57**, 4, 785-796, (1973).
- [27] S.W. Ahlstrom, H. Foote, R. Arnett, C. Cole and R. Serne, "Multicomponent mass transport model: theory and numerical implementation", *Rep. BNWL 2127*, Battelle Pacific northwest Lab., Richland, Washington, (1977).
- [28] T.A. Prickett, T. G. Naymik and C. G. Lonquist, "A Random Walk solute transport model for selected groundwater quality evaluations". *Bulletin Illinois State Water Survey*, **65** (1981).
- [29] G. Uffink, "A random walk model for the simulation of macrodispersion in a stratified aquifer", *IAHS Publ.*, **146**, 103-114 (1985).
- [30] A.F. Tompson, "Numerical simulation of chemical migration in physically and chemically heterogeneous porous media", *Wat. Res. Research*, **29**, 11, 3709-3726 (1993).
- [31] A. Hassan, R. Andricevic and V. Cvetkovic, "Computational issues in the determination of solute discharge moments and implications for comparison to analytical solutions". *Advances in Water Resources*, **24**, 607-619 (2001).
- [32] A. Abulaban and J. L. Nieber, "Modeling the effects of nonlinear equilibrium sorption on the transport of solute plumes in saturated heterogeneous porous media", *Advances in Water Resources*, **23**, 893-905 (2000).
- [33] C.V. James and C. V. Chrysikopoulos, "An efficient particle tracking equation with specified spatial step for the solution of the diffusion equation", *Chemical Engineering Science*, **56**, 6535-6543 (2001).
- [34] C.V. James and C. V. Chrysikopoulos, "Effective velocity and effective dispersion coefficient for finite-sized particles flowing in a uniform fracture", *J. of Colloid and Interface Science*, **263**, 288-295 (2003).
- [35] M. Sommerfeld, "Analysis of collision effects for turbulent gas-particle flow in a horizontal channel: Part I. Particle transport", *Int. J. of Multiphase Flow*, **29**, 675-699 (2003).

- [36] R. Proctor, A. Elliot and R. Flather, “Forecast and Hindcast Simulations of the Braer Oil Spill”, *Marine Pollution Bulletin*, **28**, n. 4, 219-279 (1994).
- [37] S. Vinzón and A.M. Paiva, “Modeling the Sediment Concentration Profiles at the Amazon Shelf”, In: *Fine Sediment Dynamics in the Marine Environment, Proc. Marine Science*, 5, edited by J. Winterwerp and C. Kranenburg, Elsevier (2002).
- [38] T.G. Hill, S. E. Jones and J. D. Prandler, “Derivation of sediment resuspension rates from acoustic backscatter time-series in tidal waters”, *Continental Shelf Research*, **23**, 19-40 (2003).
- [39] R. Periañez and A.A. Elliot, “Particle-tracking method for simulating the dispersion of non-conservative radionuclides in coastal waters”, *J. of Env. Radioactivity* **58**, 13-33, (2002).
- [40] D.W. Dunsbergen, *Particle models for transport in three-dimensional shallow water flow*, Ph. D. dissertation, Report 94-8, Communications on Hydraulic and Geotechnical Engineering, Delft University of Technology, Delft. (1994).
- [41] Y.D. Kim, I. W. Seo, S. W. Kang and B. C. Oh., “Jet integral-particle tracking hybrid model for single buoyant jets”, *J. Hydraul. Eng.*, v. 128, n. 8, pp. 753-760 (2002).
- [42] A. Hassan and M. Mohamed, “On using particle tracking methods to simulate transport in single-continuum and dual continua porous media”, *J. of Hydrology*, 275, 242-260, (2003).
- [43] J. Bodin, G. Porel and F. Delay, “Simulation of solute transport in discrete fracture networks using the time domain random walk method”, *Earth and Planetary Science letters*, **208**, 297-304, (2003).
- [44] E. LaBolle, G. Fogg and A. Tompson, “Random-walk simulation of transport in heterogeneous porous media: Local mass-conservation problem and implementation methods”, *Wat. Res. Research*, **32**(3), 583-593, March, (1996).
- [45] S. Zimmermann, P. Koumoutsakos and W. Kinzelbach, “Simulation of pollutant transport using a particle method”, *J. of Computation Physics*, **173**, 322-347, (2001).
- [46] W. Kinzelbach and G. Uffink, “The random walk method and extensions in groundwater modeling, Transport processes in Porous Media”, edited by J. Bear and M. Corapcioglu, 761-787, Kluwer Academic, Norwell, Mass., (1991).
- [47] P. Kitanidis, “Particle-tracking equations for the solution of the advection-dispersion equation with variable coefficients”, *Water Res. Research*, **30** (11), 3225–3227, (1994).
- [48] W. Hathhorn, “Simplified approach to particle tracking methods for contaminant transport”, *J. Hydraul. Eng., ASCE*, **123** (12), 1157-1160, (1997).
- [49] X.Y. Jin, Quasi Three-Dimensional Numerical Modelling of Flow and Dispersion in Shallow Water, Department of Civil Engineering, Delft Univ. of Technology, (1993).
- [50] C.D. Narayanan C. D. Lakehal and G. Yadigaroglu, “Linear stability analysis of particle-laden mixing layers using Lagrangian particle tracking”, *Powder TechnologyI*, **15**, 122-130 (2002).
- [51] J.W. Elder, “The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow”, *J. of Fluid Mechanics*, **5**(4), 544-560, (1959).

- [52] E.R. Holley, J. Siemons and G. Abraham, "Some aspects of Analysing transverse diffusion in rivers", *J. of the Hydraulics Research*, **10**(1), 27-57 (1972).