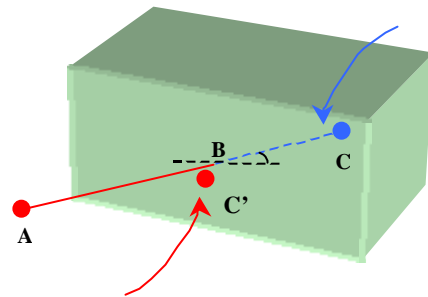
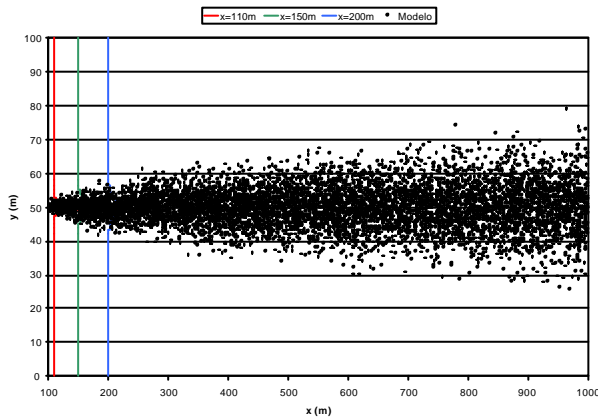
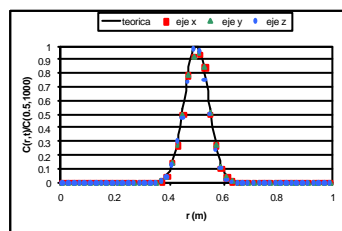


Modelo Lagrangeano para el transporte de contaminantes y material particulado en flujos turbulentos



$$dr_i = \left\{ U_i(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial K_{ij}(\mathbf{r}, t)}{\partial r_j} \right\} dt + (2K_{ij}(\mathbf{r}, t))^{1/2} dW_j(t)$$



Modelo Lagrangeano para el transporte de contaminantes y material particulado en flujos turbulentos

Presidente del INA:

Ing. Oscar V. Lico

Gerente de Programas y Proyectos:

Dr. Ing. Raúl Lopardo

Director del LHA:

Ing. Julio C. de Lío

Jefe de Programa:

Dr. Angel N. Menéndez

Equipo de trabajo:

Dr. Angel N. Menéndez

Téc. Julio Torchio

Dr. Pablo A. Tarela

Desarrollo e implementación computacional:

Dr. Pablo A. Tarela

Informe Producido por:

Dr. Pablo A. Tarela

RESUMEN

El problema de determinar el impacto de fuentes de emisión de contaminantes a partir de las tasas de emisión de masa, ya sea que estas estén en fase fluida o particulada, es clásico, y para abordarlo existen numerosas técnicas numéricas. En el Programa de Hidráulica Computacional se han desarrollado algunas herramientas para resolver este tipo de problemas, con énfasis en aquellas que representan el transporte y deposición de sedimentos. En este trabajo se incorpora una técnica alternativa al conjunto de modelos de simulación disponibles en el INA.

Este informe presenta un modelo computacional para simular el transporte de contaminantes y material particulado en flujos turbulentos complejos. Se describen brevemente los aspectos teóricos del modelo, basado en la técnica de simulación por seguimiento de partículas Lagrangeanas. Y se revisan los detalles del desarrollo del modelo matemático, y de su implementación computacional.

El modelo permite simular el transporte de contaminantes en flujos impermanentes, a través de la superposición de los efectos de advección, difusión efectiva, empuje (flotación y sedimentación) y reacción.

Se muestran algunas validaciones del modelo, comparando sus resultados con los de soluciones analíticas.

Descriptorios temáticos: transporte de contaminantes, transporte de sedimentos, sedimentación, modelo matemático, simulación numérica.

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN

2. REVISIÓN TEÓRICA

- 2.1 Derivación de la MEL
- 2.2 Funciones de deriva y difusión
- 2.3 Derivación del MDA

3. FORMULACIÓN DEL MODELO

- 3.1 Alcance
- 3.2 Discretización hidrodinámica
- 3.3 Advección
- 3.4 Difusión
 - 3.4.1 *Modelo de orden cero*
 - 3.4.2 *Modelo de orden uno*
 - 3.4.3 *Componente molecular*
 - 3.4.4 *Difusión efectiva*
- 3.5 Partículas con empuje propio
 - 3.5.1 *Sedimentación*
 - 3.5.2 *Flotación*
- 3.6 Reacción
- 3.7 Desplazamiento de las partículas
- 3.8 Condiciones de borde
 - 3.8.1 *Contornos sólidos reflejantes*
 - 3.8.2 *Contornos sólidos absorbentes*
 - 3.8.3 *Contornos semipermeables*
 - 3.8.4 *Contornos abiertos*
 - 3.8.5 *Superficie libre*
- 3.9 Paso de tiempo
- 3.10 Campo de concentración

4. VALIDACIÓN

- 4.1 Ensayo con difusión pura
- 4.2 Ensayo con advección pura
- 4.3 Descarga continua de contaminante en flujo uniforme

CONCLUSIONES

REFERENCIAS

ANEXO 1

Generación de números pseudo-aleatorios

1. INTRODUCCIÓN

En este trabajo se presenta un modelo de advección y dispersión de cúmulos de partículas dentro de un fluido, basado en la técnica de modelación estocástica Lagrangeana (MEL).

La MEL presenta como principal virtud la de entregar resultados con alta precisión en espacio y tiempo. Por ello, es especialmente apta para resolver problemas de transporte en capa límite de escala corta (problemas de campo cercano, descargas de contaminantes y transporte de sedimentos en ríos, etc.), en los cuales la precisión es importante y se pueden aceptar hipótesis simplificativas relacionadas a la dimensión (2D vs 3D) y donde la utilización de correlaciones turbulentas es justificable.

Para aquellos problemas en los cuales el transporte es de escala larga (transporte en grandes lagos, estuarios y el océano), usualmente se requiere menor precisión pero una modelación completamente tridimensional. Entonces, se utiliza un tipo diferente de MEL: un modelo de desplazamiento aleatorio (MDA).

Una propiedad fundamental de la MEL es que mantiene una concentración inicial uniforme de partículas uniforme para todo tiempo, es decir, la denominada condición de buena mezcla (CBM). Dependiendo del tipo de flujo, se deben tener en cuenta ciertas precauciones en la modelación para obtener la CBM (Brickman and Smith 2001). Algunos detalles son presentados en el trabajo.

Una corrida de MEL provee un ensayo de un posible ensamble de ensayos. Además, resulta necesario conocer a priori las propiedades dispersivas promedio del ensamble de estados turbulentos del flujo. Esto lleva al problema clásico de la modelación estocástica: determinar cuántas realizaciones (o partículas) son necesarias para obtener un resultado estadísticamente confiable. Se mostrará que la respuesta depende del problema específico bajo consideración.

2. REVISIÓN TEÓRICA

2.1 Derivación de la MEL

La teoría detrás de la MEL está bien descrita en la literatura (por ejemplo, ver Rodean 1996), por lo que aquí sólo se presenta una breve reseña.

El punto de partida para la MEL es la ecuación 3D de Langevin (Gardiner, 1983):

$$du_i = a_i(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)dt + b_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{u}, t)dW_j(t) \quad (2.1)$$

con

$$d\mathbf{r} = \mathbf{u}dt \quad (2.2)$$

siendo $\mathbf{u} = (u, v, w)^T$ la velocidad, $d\mathbf{u} = (du, dv, dw)^T$ el incremento diferencial de la velocidad, $\mathbf{r} = (x, y, z)^T$ el vector posición en un sistema de coordenadas Cartesiano, t el tiempo, $d\mathbf{r} = (dx, dy, dz)^T$, y dW_j es el incremento diferencial del "proceso de Weiner".

En (2.1), el primer término del miembro derecho es la deriva (determinística) y el segundo es la difusión (estocástica). El acierto del MEL consiste en determinar formas con sentido físico para las funciones a y b .

Si, por simplicidad, se reduce (2.1) a su versión 1D en la vertical (con coordenada asociada z), resulta:

$$dw = a(z, w, t)dt + b(z, w, t)dW(t) \quad (2.3)$$

la cual es una ecuación diferencial estocástica (EDE) que tiene asociada una función $P(z, w, t)$ de densidad de probabilidad (fdp) para w . La evolución de P está descrita por una ecuación de Fokker-Plank (FP):

$$\frac{\partial P(z, w, t)}{\partial t} = -\frac{\partial(wP)}{\partial z} - \frac{\partial(aP)}{\partial w} + \frac{1}{2} \frac{\partial(b^2 P)}{\partial w^2} \quad (2.4)$$

que establece que la misma se debe, en el espacio de fases, a la advección vertical de P (primer término del miembro derecho), la deriva de P (segundo término) y la difusión de P (tercer término, con difusividad b^2). Es decir, la evolución de la fdp está regida por una ecuación de advección-difusión.

La ecuación de FP es una forma diferencial de la ecuación de Chapman-Kolmogorov para un proceso Markoviano. En forma sencilla, tal proceso es uno en el cual la probabilidad de un dado

estado futuro es independiente del pasado, dependiendo solamente del presente más una regla de transición (fdp) que transforma desde el presente hacia el futuro. Estrictamente hablando, (2.4) describe la evolución de la fdp condicional $P(z, w, t | z_0, w_0, t_0)$, es decir, la probabilidad de que una partícula inicialmente en z_0 , con velocidad w_0 en t_0 sea observada en el entorno dz, dw de z, w en el instante t , el cual está relacionado con la fdp incondicional $P(z, w, t)$ a través de la hipótesis Markoviana.

2.2 Funciones de deriva y difusión

La ecuación de FP es la llave para hallar expresiones para las funciones a y b ya que provee un vínculo entre la fdp de la EDE y las propiedades estadísticas del flujo que pueden ser derivadas de la ecuaciones de gobierno Eulerianas.

Los métodos de solución tradicionales involucran la restricción fundamental de que la CBM sea verificada. Además, se requiere que la estadística del flujo representada por la MEL sea equivalente a la estadística derivada de la ecuaciones de gobierno Eulerianas. Thomson (1987) demostró que, en realidad, ambos requerimientos son idénticos.

Dos condiciones son importantes en la solución:

a) b tiene una forma universal. Para incrementos temporales dentro del subrango inercial la parte aleatoria de la MEL debería estar determinada a través de condiciones de similaridad, lo que se expresa como:

$$b = \sqrt{C_0 \epsilon} \quad (2.5)$$

donde ϵ es la tasa de disipación turbulenta y C_0 una constante universal $O(1)$.

b) La CBM requiere que $P = P_E$, es decir, la fdp de la MEL es la misma que la fdp del campo Euleriano. Además, la única fdp consistente es Gaussiana (aquella en la cual desaparecen todos los momentos impares),

$$P_E = P_E^G(z, w, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \mathbf{s}_w^2}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{w}{\mathbf{s}_w} \right)^2} \quad (2.6)$$

donde $\mathbf{s}_w^2 = \mathbf{s}_w^2(z, t)$ es la varianza de w (la fdp es Gaussiana en todas partes, pero su varianza es función de z y, eventualmente, de t).

2.3 Derivación del MDA

La MEL se considera válida para escalas de tiempo t en el rango

$$T_K < t < T_L \quad (2.7)$$

donde T_K es la escala de tiempo de Kolmogorov y T_L la escala de tiempo Lagrangeana

$$T_K = \sqrt{\frac{\nu}{\epsilon}} \quad (2.8)$$

$$T_L = \int_0^{\infty} r(t) dt \quad (2.9)$$

siendo ν la viscosidad cinemática y $r(t)$ la función de autocorrelación de velocidad.

Aunque existen soluciones para problemas 1D, en el caso de modelación estocástica 3D la complejidad de las mismas es tal que resulta preferible utilizar un MDA. Estos pueden considerarse como el *límite de difusión* de la MEL, es decir, son válidos para

$$T_L \rightarrow 0 \quad \text{ó} \quad t \gg T_L \quad (2.10)$$

En estos casos se obtienen soluciones generales. Por ejemplo, la siguiente expresión relaciona un desplazamiento infinitesimal con las componentes de deriva y dispersión del movimiento (Rodean, 1996):

$$dr_i = \left\{ U_i(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial K_{ij}(\mathbf{r}, t)}{\partial r_j} \right\} dt + (2K_{ij}(\mathbf{r}, t))^{1/2} dW_j(t) \quad (2.11)$$

donde K_{ij} es la difusividad de torbellino. La expresión (2.11) resulta ser una solución única del problema de difusión turbulenta. Aplicando la ecuación de FP y utilizando el hecho de que la concentración genérica C está relacionada con la fdp P se obtiene:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U_i \frac{\partial C}{\partial r_i} = \frac{\partial}{\partial r_i} \left(K_{ij} \frac{\partial C}{\partial r_j} \right) \quad (2.12)$$

la cual muestra que el MDA es equivalente a un modelo de advección-difusión. De esta manera, el MDA constituye una alternativa simple, única y 3D a la MEL, válida para escalas de tiempo mucho mayores que T_L .

Las principales ventajas de las soluciones obtenidas con un MDA sobre aquellas provenientes de las ecuaciones de advección-difusión son:

- No se sobrestima la dispersión para tiempos menores a T_L
- Son más precisas en la zona de campo cercano
- Son más precisas en flujos sobre terrenos (geometría) complicados

3. FORMULACIÓN DEL MODELO

3.1 Alcance

El MDA presentado en este trabajo resuelve la siguiente generalización de la ecuación de advección-difusión (2.12), para el caso de un conjunto de especies reactivas:

$$\frac{\partial C_n}{\partial t} + U_i \frac{\partial C_n}{\partial r_i} = \frac{\partial}{\partial r_i} \left(K_{ij} \frac{\partial C_n}{\partial r_j} \right) + \mathbf{f}_{nm} \quad n, m = 1, N \quad (3.1)$$

donde C_n es la concentración de la n -ésima especie representada, \mathbf{f}_{nm} es un término de interacción entre las especies n y m , y N es el número total de especies. El término especie aquí indica cierta propiedad distintiva de la partícula (diámetro de sedimento o burbuja, tipo de huevo o larva, componente químico, nivel de temperatura, etc.).

Para el caso particular $n=m$, el término de interacción se reduce a

$$\mathbf{f}_{nn} = R_n \quad (3.2)$$

donde R_n es un término de reacción (química y/o biológica) debido al medio.

3.2 Discretización hidrodinámica

El modelo computacional está planteado actualmente sobre una malla espacial tridimensional estructurada, de forma rectangular y con elementos horizontales rectangulares. La red espacial vertical puede ser irregular, y provenir tanto de una discretización en coordenadas cartesianas como coordenadas sigma.

La figura 3.1 muestra el esquema de discretización de las variables hidrodinámicas necesarias para alimentar externamente el modelo. Se trata de una malla del tipo *staggered*. Se ha asociado la coordenada z con la vertical gravitatoria.

De esta manera, para flujos a superficie libre se pueden utilizar los campos de velocidad y de nivel de agua provenientes de los siguientes modelos:

- *Hidrobid* (2D) (Menéndez 1990)
- *Coherens* (3D) (MUMM 1999)

a los cuales se pueden sumar un gran número de modelos hidrodinámicos, especialmente aquellos discretizados mediante los métodos de diferencias finitas y volúmenes finitos. Para modelos basados

en el método de los elementos finitos, el presente esquema puede ser utilizado directamente si los elementos son tetraédricos, especialmente para aquellos de interpolación mixta y 27 nodos.

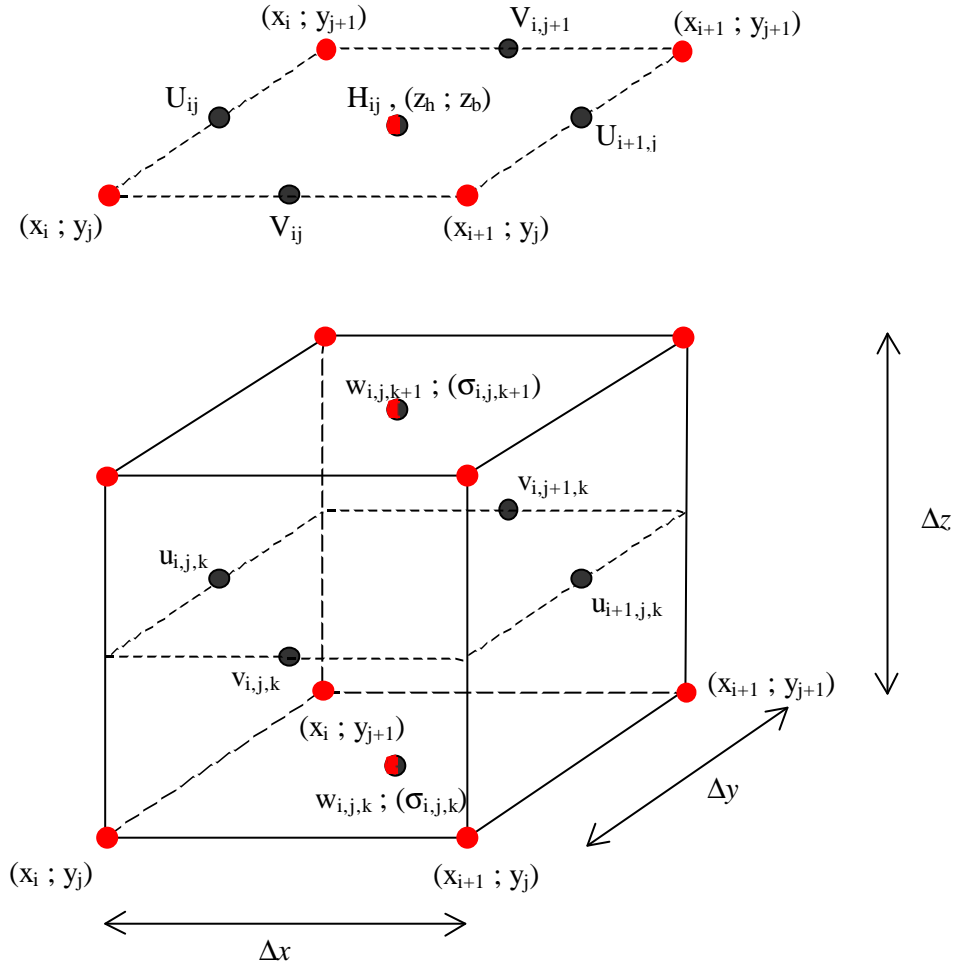


Figura 3.1 - Esquema de discretización de las variables hidrodinámicas 2D (arriba) y 3D (abajo). $H_{ij} = z_h - z_b$ indica la profundidad local, siendo z_h y z_b las cotas de la superficie libre y el fondo, respectivamente.

3.3 Advección

La MEL, y en particular el MDA, son especialmente aptos para simular el transporte advectivo, ya que tales representaciones excluyen la aparición de errores de truncamiento provenientes de la discretización de la ecuación de advección-difusión. Para controlar el error asociado al movimiento advectivo en un MDA sólo es necesario limitar el paso temporal entre dos movimientos sucesivos de la misma partícula (ver más adelante). Obviamente, una buena representación requiere de un campo de velocidades medias lo suficientemente denso en información espacial y temporal. Tal campo proviene de las soluciones obtenidas con alguno de los modelos hidrodinámicos mencionados en 3.2.

Para las discretizaciones útiles a este modelo (ver figura 3.1), la velocidad media advectiva $\mathbf{u}_{ap}=(u_{ap}, v_{ap}, w_{ap})^T$ de una partícula ubicada en el punto $\mathbf{r}_p=(x_p, y_p, z_p)^T$ de la celda (i, j, k) se determina mediante interpolación trilineal:

$$\begin{aligned} u_{ap} &= f_u u_{i,j,k} + (1-f_u)u_{i+1,j,k} \\ v_{ap} &= f_v v_{i,j,k} + (1-f_v)v_{i,j+1,k} \\ w_{ap} &= f_w w_{i,j,k} + (1-f_w)w_{i,j,k+1} \end{aligned} \quad (3.3)$$

donde

$$\begin{aligned} f_u &= \frac{1}{2} - \frac{dx_p}{\Delta x} & , & & dx_p &\equiv x_p - x_{i,j,k}^c \\ f_v &= \frac{1}{2} - \frac{dy_p}{\Delta y} & , & & dy_p &\equiv y_p - y_{i,j,k}^c \\ f_w &= \frac{1}{2} - \frac{dz_p}{\Delta z} & , & & dz_p &\equiv z_p - z_{i,j,k}^c \end{aligned} \quad (3.4)$$

siendo $\mathbf{r}^c = (x_{i,j,k}^c, y_{i,j,k}^c, z_{i,j,k}^c)^T$ el punto central del tetraedro que define la celda (i, j, k) y $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ sus dimensiones, de acuerdo a la definición de la figura 3.1.

El desplazamiento de cada partícula obedece a una suma de fenómenos, pero se puede determinar a partir de una velocidad efectiva. La primer componente de tal velocidad es la que se obtiene a partir de (3.3), presentándose a continuación las demás componentes representadas en este modelo.

3.4 Difusión

Los efectos turbulentos que dan lugar al carácter difusivo del flujo, se simulan aplicando la técnica de Monte Carlo o de “caminantes aleatorios”. La misma consiste en representar la magnitud del proceso difusivo a través de un coeficiente de difusividad K , de modo tal que la distancia media cuadrática recorrida por una partícula durante el intervalo de tiempo Δt es:

$$\mathbf{d}_{dp} = \sqrt{2K\Delta t} \quad (3.5)$$

El coeficiente K depende de las condiciones locales de turbulencia, y es en realidad una simplificación del tensor K_{ij} de difusividad de torbellino definido en (2.11).

3.4.1 Modelo de orden cero

Cuando las condiciones de turbulencia son tales que se puede asumir mezcla macroscópica isótropa, entonces el tensor de difusividad de torbellino se reduce a

$$K_{ij} = K_0 \mathbf{d}_{ij} \quad (3.6)$$

donde el coeficiente K_0 escala el nivel de turbulencia.

Utilizando la ecuación (3.5), se puede definir la velocidad “difusiva” de una partícula en la dirección j , para el caso del modelo de orden cero (mezcla pasiva), a través de:

$$u_{dp,j}^0 = \mathbf{a}_j \frac{\mathbf{d}_{dp}^0}{\Delta t} \quad (3.7)$$

donde

$$\mathbf{d}_{dp}^0 = \sqrt{2K_0\Delta t} \quad (3.8)$$

y \mathbf{a}_j representa el carácter aleatorio del flujo turbulento, y para turbulencia isotrópica tiene asociada una distribución de probabilidad Gaussiana. Si se cuenta con un generador de números aleatorios uniformemente distribuidos entre 0 y 1, $U_{01,j}$, entonces:

$$\mathbf{a}_j = \frac{U_{01,j} - E(U_{01,j})}{\mathbf{s}(U_{01,j})} \quad (3.9)$$

siendo $E(U_{01,j}) = 0.5$ y $\mathbf{s}(U_{01,j}) = 1/\sqrt{12}$ la esperanza y varianza de la distribución uniforme, respectivamente (ver Anexo 1 para detalles del generador utilizado).

Finalmente resulta:

$$u_{dp,j}^0 = (2U_{01,j} - 1) \sqrt{\frac{6K_0}{\Delta t}} \quad (3.10)$$

3.4.2 Modelo de orden uno

En muchos casos de flujos ambientales se puede asumir que la dispersión turbulenta es proporcional a la velocidad local. Por ejemplo, para flujos de corte a superficie libre donde existe una dirección principal de movimiento, resulta conveniente expresar el tensor de difusividad de torbellino localmente en la siguiente forma diagonal:

$$K_{ij} = K_j \mathbf{d}_{ij} \quad (3.11)$$

donde las direcciones implícitas en (3.11) son la longitudinal (dirección horizontal principal de movimiento, con coeficiente asociado K_L), la transversal (dirección horizontal perpendicular a la anterior, y coeficiente K_T) y la vertical (dirección de corte, con coeficiente K_V).

De este modo, la distancia media cuadrática recorrida por una partícula durante el intervalo de tiempo Δt y en la dirección j es:

$$d_{dp,j}^1 = \sqrt{2K_j \Delta t} \quad (3.12)$$

En este caso, los coeficientes de difusividad de torbellino se pueden expresar en términos de las propiedades (medias de Reynolds) locales del flujo:

$$K_j = c_j u_* h \quad (3.13)$$

donde h es la profundidad local y u_* es el módulo de la velocidad de corte, relacionado con la tensión de corte en el fondo, $\hat{\mathbf{o}}_b$, a través de:

$$\hat{\mathbf{o}}_b = \mathbf{r} u_* \quad (3.14)$$

con \mathbf{r} la densidad del agua.

En las ecuaciones (3.13), c_j son coeficientes empíricos asociados a las propiedades difusivas en cada dirección. La tabla 3.1 presenta algunos valores característicos de los mismos. Para más detalles se puede recurrir al trabajo pionero de Holley (1969), y también a los de Fisher (1973) y Holly (1977).

Tabla 3.1 – Valores característicos de los coeficientes empíricos de difusividad de torbellino.

Dirección	Valor típico	Observaciones
Longitudinal	5.93	Campo de velocidades promediado verticalmente (2DH)
	$0.07 \leq c_L \leq 0.23$	Flujo de corte 3D
Transversal	0.21	Campo de velocidades promediado verticalmente (2DH)
	$0.07 \leq c_T \leq 0.23$	Flujo de corte 3D
Vertical	$0.16 \leq c_V \leq 0.23$	

Así, para el caso del modelo de orden uno (mezcla activa), la velocidad “difusiva” asociada es:

$$u_{dp,j}^1 = (2U_{01,j} - 1) \sqrt{\frac{6K_j}{\Delta t}} \quad (3.15)$$

3.4.3 Componente molecular

Por generalidad, y aunque normalmente carece de importancia, se puede considerar la distancia media cuadrática debida a la difusión molecular:

$$d_{dp}^{molec} = \sqrt{2n\Delta t} \quad (3.16)$$

donde $\mathbf{n}=10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ es un valor de referencia de la viscosidad cinemática del agua, considerada uniforme e isotrópica.

La velocidad de difusión molecular asociada a la dirección j resulta:

$$\mathbf{u}_{dp,j}^{molec} = (2U_{01,j} - 1) \sqrt{\frac{6\mathbf{n}}{\Delta t}} \quad (3.17)$$

3.4.4 Difusión efectiva

La velocidad difusiva efectiva, $\mathbf{u}_{dp} = (u_{dp}, v_{dp}, w_{dp})^T$, de la partícula ubicada en el punto \mathbf{r}_p de la celda (i,j,k) se obtiene en el caso general a partir de:

$$\mathbf{u}_{dp} = \mathbf{u}_{dp}^0 + \mathbf{R}_q \mathbf{u}_{dp}^1 + \mathbf{u}_{dp}^{molec} \quad (3.18)$$

donde se ha aplicado la siguiente rotación, debida a la hipótesis de dirección principal (horizontal) de movimiento en un flujo de corte:

$$\mathbf{R}_q = \begin{vmatrix} \cos \mathbf{q} & \sin \mathbf{q} & 0 \\ \sin \mathbf{q} & -\cos \mathbf{q} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad (3.19)$$

siendo \mathbf{q} el ángulo comprendido entre la proyección del vector velocidad advectiva sobre el plano horizontal y el eje x , medido en sentido antihorario ($\mathbf{q} = \text{ang}(\mathbf{u} - \mathbf{u} \cdot \hat{z}, \hat{x})$).

3.5 Partículas con empuje propio

La CBM está planteada para partículas con flotación neutra, es decir, aquellas que actúan como parcelas de fluido. Desafortunadamente, no existe una teoría de MEL satisfactoria para partículas no pasivas.

Algunas soluciones pueden hallarse en la literatura (Swaford and Guest, 1991, Zhuang et al., 1989) pero cuando las velocidades de deposición o flotación son importantes se debe tener especial atención.

3.5.1 Sedimentación

Para partículas con densidad intrínseca superior a la del medio se considera una velocidad neta de caída actuando en la dirección vertical. Considerando partículas individuales cayendo en agua limpia, se utilizan las siguientes relaciones, en función del diámetro \mathbf{d}_j de cada especie, para determinar la velocidad de caída (Tarela 2000):

$$w_{sp,j} = \begin{cases} -\frac{\Delta_j g d_j^2}{18n} & d_j < 100 \text{ mm} \\ -\frac{10n}{d_j} \left\{ \sqrt{1 + \frac{0.01 \Delta_j g d_j^3}{n^2}} - 1 \right\} & 100 \text{ mm} < d_j < 1000 \text{ mm} \\ -1.1 \sqrt{\Delta_j g d_j} & d_j > 1000 \text{ mm} \end{cases} \quad (3.20)$$

donde $\Delta_j \equiv \mathbf{r}_{sp,j} / \mathbf{r} - 1$, siendo $\mathbf{r}_{sp,j}$ la densidad intrínseca de las partículas de la especie j , y g es la aceleración de la gravedad.

La expresión (3.20) se puede generalizar para casos donde la concentración es tal que modifica las propiedades de caída, la cual deja de ser libre (para detalles ver Tarela 2000).

3.5.2 Flotación

El caso complementario corresponde a especies con densidad intrínseca inferior a la del agua, de modo tal que aparece un efecto neto de flotación. Para simular estas especies se consideran partículas sometidas a la acción de la gravedad efectiva. Considerando que el recorrido vertical de una de tales partículas durante el intervalo Δt es lo suficientemente pequeño como para que su aceleración pueda considerarse constante, entonces la velocidad media del recorrido se puede expresar como:

$$w_{fp,j} = -\Delta_j g \Delta t \quad (3.21)$$

3.6 Reacción

La implementación en el modelo de los términos de interacción depende del tipo de fenómeno a simular. Para el caso particular del término de autointeracción, si se considera una reacción de primer orden resulta:

$$\mathbf{f}_{nn} = R_n = -K_n C_n \quad (3.22)$$

donde K_n es la tasa de reacción para la especie n . La ecuación (3.22) está planteada para el caso de un decaimiento neto de masa.

Se pueden aplicar dos tipos de simulación para este tipo de reacciones:

- *Simulación "Booleana"*: las partículas se crean o destruyen en cada paso de tiempo (cambia el número de partículas), pero conservan su masa mientras están en el fluido.

- *Simulación "Atenuada"*: se conserva el número de partículas simuladas, las cuales no conservan masa.

En el primer caso, se aplican leyes estocásticas de generación/destrucción de partículas, cuyas estadísticas responden a las respectivas tasas de reacción. Esta formulación es inherente al MDA, en el sentido de que las partículas conservan identidad, pero su implementación es algo más complicada.

En el segundo, la masa de cada partícula se modifica en función del tiempo y de la tasa de reacción. Aunque las partículas pierden identidad (especialmente cuando representan organismos) la implementación resulta directa.

En esta primera versión del modelo computacional se utilizará el concepto de *simulación atenuada*. Para determinar la evolución de la masa de cada partícula se resuelve la ecuación de movimiento de la respectiva especie, suponiendo ausencia de advección y difusión y despreciando la interacción con otras especies (la cual se modela aparte):

$$\frac{\partial C_n}{\partial t} = -K_n C_n \quad (3.23)$$

Aplicando una condición inicial apropiada, a partir de (3.23) se deduce que la masa de cada partícula sigue la ley:

$$m_n(t) = m_n(t_i) e^{-K_n(t-t_i)} \quad (3.24)$$

donde t_i es el instante a partir del cual comienza la reacción (usualmente el momento en el cual la partícula es inyectada en el fluido) y $m_n(t_i)$ la masa de la partícula al comienzo de la reacción.

3.7 Desplazamiento de las partículas

El desplazamiento de cada partícula durante el intervalo Δt se lleva a cabo adaptando la ecuación (2.2) para el MDA:

$$\Delta \mathbf{r}_p = \mathbf{u}_{ef} \Delta t \quad (3.25)$$

donde el desplazamiento y la velocidad efectiva de la partícula se calculan, respectivamente, como

$$\Delta \mathbf{r}_p = \mathbf{r}_p(t + \Delta t) - \mathbf{r}_p(t) \quad (3.26)$$

$$\mathbf{u}_{ef} = \mathbf{u}_{ap} + \mathbf{u}_{dp} + \mathbf{u}_{bp,j} \quad (3.27)$$

con

$$\mathbf{u}_{bp,j} = \begin{cases} w_{sp,j} \hat{z} & \Delta_j > 0 \\ 0 & \Delta_j = 0 \\ w_{fp,j} \hat{z} & \Delta_j < 0 \end{cases} \quad (3.28)$$

Para realizar el desplazamiento indicado por (3.25) se consideran simultáneamente las condiciones de borde impuestas sobre las partículas, y ciertas limitaciones en la magnitud del paso de tiempo. Tales condiciones se describen en los apartados que siguen.

3.8 Condiciones de borde

Sobre bordes sólidos debe ser implementado un esquema de reflexión/absorción. El mismo debe satisfacer la CBM, para lo cual es en general suficiente forzar la turbulencia a la homogeneidad cuando las partículas se aproximan a un contorno. Como siempre existe una capa límite sin resolver, esta condición se debe imponer artificialmente.

3.8.1 Contornos sólidos reflejantes

Si el desplazamiento (3.25) indica que la partícula se desplazaría desde el fluido hasta una zona seca (fuera del dominio de cálculo), y la partícula no es sedimentable, entonces se aplica una condición de reflexión. Para el caso de superficies sólidas con características no absorbentes (pueden ser tanto las paredes como el fondo del dominio de cálculo), el modelo contempla tres esquemas de reflexión:

A) Esquema de reflexión conservativa

En este caso la interacción de la partícula con el borde sólido se realiza sin pérdida de energía cinética. El movimiento durante el intervalo Δt se compone de dos trayectorias rectilíneas, siguiendo la ley de Snell (ver figura 3.2):

- En primer lugar, desde la posición inicial (punto **A**, a tiempo t) hasta la intersección con el borde sólido (punto **B**) determinada por la trayectoria prevista por (3.25)
- En segundo lugar, desde el punto de intersección **B** hasta la imagen especular del punto final previsto por (3.25) (el punto **C'**), con la cara que define el borde sólido como plano de simetría (trayecto \overline{BC} en la figura 3.2)

Como resultado de la conservación de la energía resulta $\overline{AC'} = \overline{AB} + \overline{BC}$.

B) Esquema de reflexión no conservativa

En este caso la interacción de la partícula con el borde sólido se realiza con pérdida parcial de energía cinética. El movimiento durante el intervalo Δt se compone de dos trayectorias rectilíneas, siguiendo la ley de Snell (ver figura 3.3):

- El primer tramo (\overline{AB}) es idéntico al del caso sin pérdida de energía.
- El segundo tramo va desde el punto de intersección **B** y en la dirección de la imagen especular del punto final previsto por (3.25) (el punto **C'**), con la cara que define el borde sólido como plano de simetría (trayecto $\overline{BC''}$ en la figura 3.3).

Como resultado de la pérdida de energía durante el proceso de interacción, resulta $\overline{AC'} > \overline{AB} + \overline{BC''}$. En efecto, $\overline{BC''} = e_k \overline{BC'}$, donde $0 < e_k < 1$ cuantifica la fracción de energía perdida en el choque.

C) Esquema de reflexión mínima

En este caso la interacción de la partícula con el borde sólido se realiza con pérdida total de energía cinética. En realidad, corresponde al límite $e_k \rightarrow 0$ del esquema de reflexión no conservativa. El movimiento durante el intervalo Δt se compone de dos trayectorias rectilíneas (ver figura 3.4):

- El primer tramo (\overline{AB}) es idéntico al del caso sin pérdida de energía.
- El segundo corresponde a desplazar la partícula una distancia pequeña respecto del punto B, hacia el interior del fluido y en forma perpendicular al plano que define el borde (trayecto $\overline{BC''}$ en la figura 3.4).

Por defecto, el modelo asume que en el segundo desplazamiento $\overline{BC''} = e \min(\Delta x, \Delta y)$, donde $e \ll 1$.

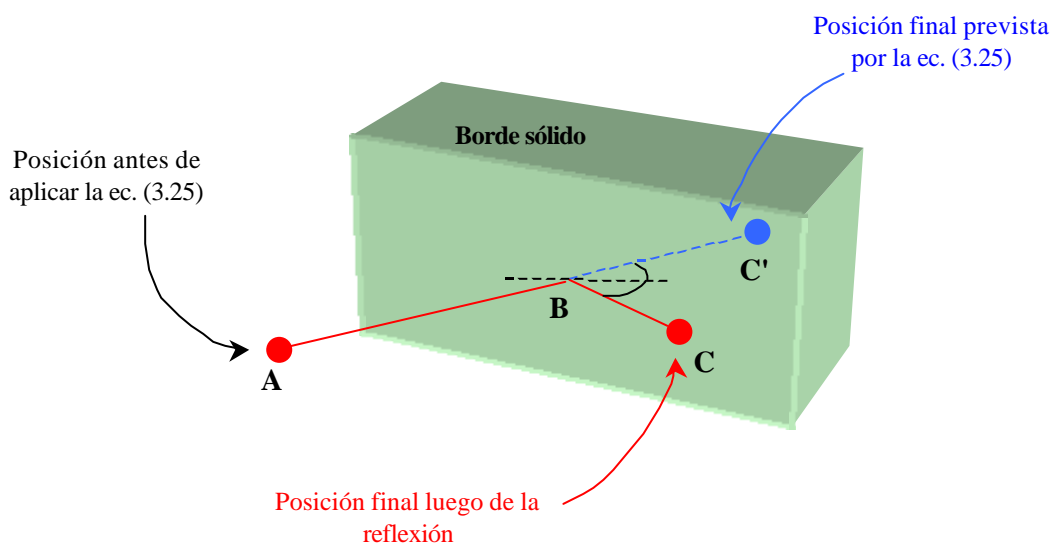


Figura 3.2 - Esquema de reflexión conservativa: $\overline{BC} = \overline{BC'}$.

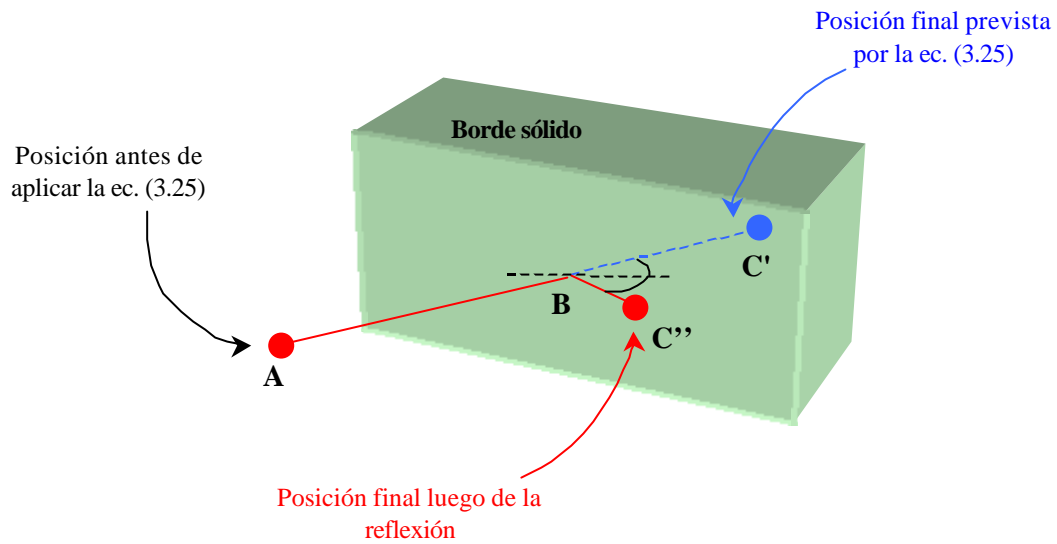


Figura 3.3 - Esquema de reflexión no conservativa: $\overline{BC''} < \overline{BC'}$.

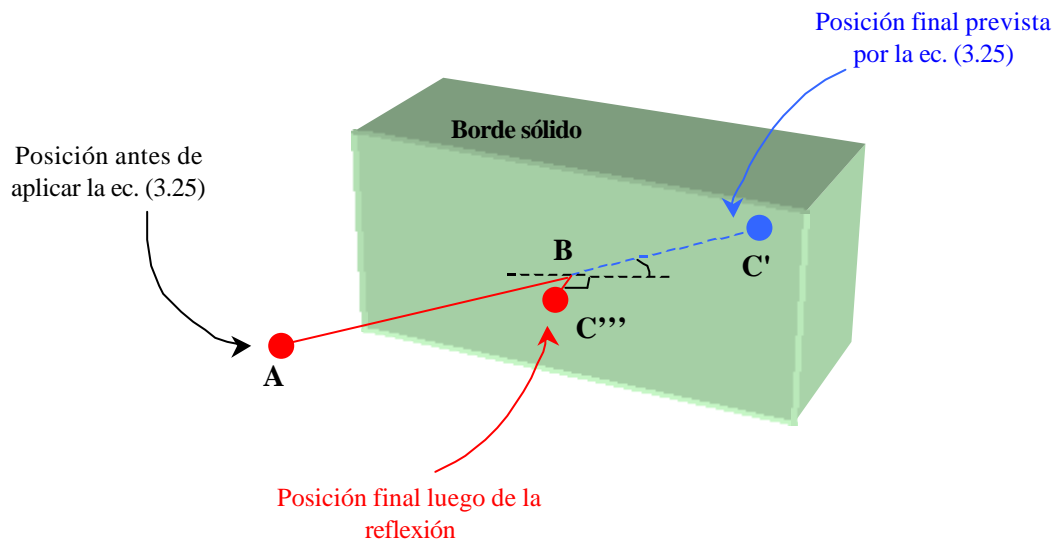


Figura 3.4 - Esquema de reflexión mínima: $\overline{BC'''} \ll \overline{BC'}$.

3.8.2 Contornos sólidos absorbentes

Si el desplazamiento (3.25) indica que la partícula se desplazaría desde el fluido hasta una zona seca (fuera del dominio de cálculo), y la partícula es sedimentable, la condición a aplicar es de absorción. Para bordes sólidos con propiedades absorbentes (pueden ser tanto las paredes como el fondo del dominio de cálculo), el modelo contempla dos esquemas:

A) Esquema de absorción total

En este caso la interacción de la partícula con el borde sólido se realiza con pérdida total de energía cinética. Corresponde al caso $e_k = 0$ del esquema de reflexión no conservativa. El movimiento durante el intervalo Δt se compone de una única trayectoria rectilínea, que va desde la posición inicial (punto **A**, a tiempo t) hasta la intersección con el borde sólido (punto **B**) determinada por la trayectoria prevista por (3.25) (ver figura 3.5).

Una vez absorbida, la partícula podrá ser eliminada del cálculo o reinyectada desde el punto **B**, dependiendo de las propiedades de la misma y las del borde sólido.

B) Esquema de absorción parcial

En este caso, el proceso de absorción está gobernado por una función de probabilidad que depende tanto de las propiedades de la partícula como de las condiciones del flujo y las del borde sólido. Si P_s es la probabilidad de que la partícula sea absorbida, se define el parámetro de destino como:

$$\mathbf{p} = U_{01} - P_s \quad (3.29)$$

Si $\mathbf{p} < 0$ se considera que la partícula será absorbida en este instante, y su posición final se calcula de acuerdo al esquema de absorción total. Una vez absorbida, la partícula podrá ser eliminada del cálculo o inyectada nuevamente desde el punto **B** (ver figura 3.5), dependiendo de las propiedades de la misma y las del borde sólido.

En cambio, si $\mathbf{p} > 0$ se considera que la partícula no será absorbida, y su posición final se calcula de acuerdo a alguno de los esquemas de reflexión.

Este esquema es especialmente apto para simular la sedimentación de material cohesivo (sedimentos con $d_j < 62\mu\text{m}$). En este caso se puede utilizar la expresión de Krone (1962) para la probabilidad de deposición:

$$P_s = P_d = \begin{cases} 0 & \mathbf{t}_b > \mathbf{t}_{d,j} \\ 1 - \frac{\mathbf{t}_b}{\mathbf{t}_{d,j}} & \mathbf{t}_b < \mathbf{t}_{d,j} \end{cases} \quad (3.30)$$

donde $\tau_b = |\hat{\mathbf{o}}_b|$ y $\tau_{d,j}$ es la tensión crítica de deposición de la especie j (para detalles ver Tarela 2000).

Si se considera que el borde sólido es erosionable, entonces la partícula podrá ser inyectada nuevamente desde el punto **B** (ver figura 3.5) siguiendo un procedimiento idéntico al recién señalado. En este caso, se define un nuevo parámetro de destino en función de la probabilidad de erosión (Partheniades 1962):

$$P_s = P_e = \begin{cases} 0 & \tau_b < \tau_{e,j} \\ M_e \left(\frac{\tau_b}{\tau_{e,j}} - 1 \right) & \tau_b > \tau_{e,j} \end{cases} \quad (3.31)$$

donde M_e es la tasa de erosión cuando la tensión de corte en el fondo es igual al doble de la tensión crítica de erosión de la especie j ($\tau_{e,j}$).

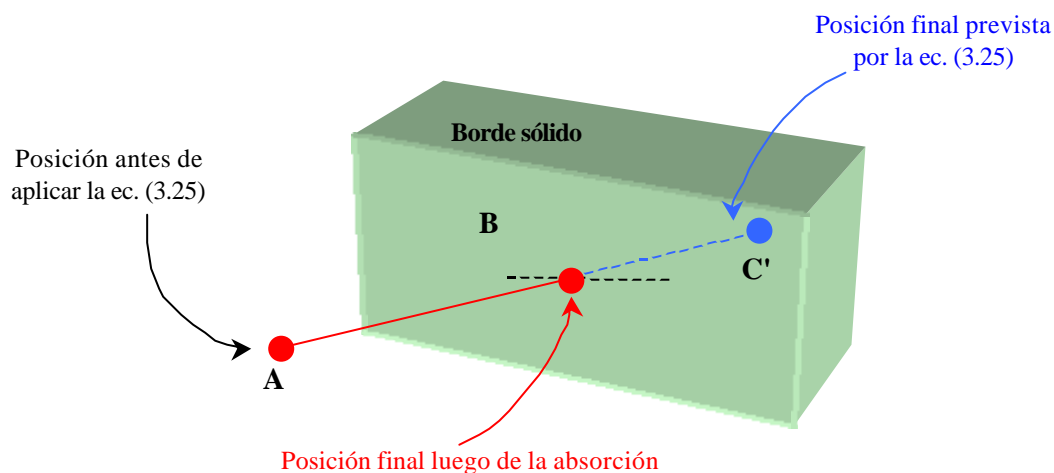


Figura 3.5 - Esquema de absorción.

3.8.3 Contornos semipermeables

Para el caso de bordes semipermeables, en general se define una función de probabilidad que establece qué chances tiene una partícula de atravesarlo, provisto que la ecuación (3.25) indica un desplazamiento a través del mismo. La función de probabilidad, representada a través de un mecanismo estocástico en el MDA (similar al caso de deposición de sedimentos cohesivos), depende de las propiedades particulares del borde semipermeable.

3.8.4 Contornos abiertos

Se define como contorno abierto a toda cara de una celda de fluido que pertenece a la superficie del dominio de cálculo, y que implica la continuidad del fluido en la zona exterior al dominio mencionado. Entre los contornos abiertos se cuentan las superficies de entrada y salida de fluido, aberturas en paredes sólidas, esclusas de fondo, etc. Según esta definición, las paredes sólidas, el fondo del vaso hidráulico y la superficie libre no son contornos abiertos.

Cuando el movimiento definido por (3.25) es tal que la partícula se desplaza más allá del dominio de cálculo, atravesando un borde abierto, entonces la misma es descartada, eliminándose del cálculo a partir de ese momento.

3.8.5 Superficie libre

En general, en la superficie libre se impone flujo nulo de partículas. Si el desplazamiento (3.25) propone que la partícula atraviesa la superficie libre, el mismo es restringido de modo que la misma es ubicada en el punto de intersección entre su trayectoria y la superficie. En el próximo paso de tiempo la partícula puede “escapar” de la superficie libre por efecto de la turbulencia o el empuje propio (en caso que corresponda), de modo que vuelve a incorporarse a la columna de agua.

Existen algunos casos particulares en los cuales las partículas no vuelven a sumergirse:

- *Flotación permanente*: cuando las partículas tienen una densidad inferior a la del fluido para todo tiempo y la turbulencia no es lo suficientemente intensa como para producir su inmersión temporal, las mismas viajan permanentemente en superficie,
- *Inmiscibilidad*: para partículas que representan un fluido inmiscible con densidad inferior a la del medio, se impone como condición en la superficie libre la restricción a la inmersión, de modo que el movimiento resulta confinado a tal superficie.
- *Volatilidad*: para partículas volátiles que alcanzan la superficie libre, se impone una condición de liberación a la atmósfera en función de las propiedades locales de volatilidad.

Para flujos en régimen impermanente, donde las posiciones de la superficie libre y el fondo pueden variar en el tiempo, se realiza la siguiente transformación lineal (cambio de escala) en cada paso temporal:

$$z_p'(t + \Delta t) = z_b(t + \Delta t) + [z_p(t + \Delta t) - z_b(t)] \frac{h(x_p, y_p, t + \Delta t)}{h(x_p, y_p, t)} \quad (3.32)$$

donde $z_p'(t + \Delta t)$ es la nueva posición vertical de la partícula, z_b es la coordenada vertical del fondo en la celda donde se encuentra la partícula, $z_p(t + \Delta t)$ es la posición vertical de la partícula calculada con (3.25), y $h(x_p, y_p, t)$ la profundidad local a tiempo t en la celda donde se encuentra la partícula.

De esta manera, (3.32) redistribuye en la vertical las partículas, de modo de compensar la variación temporal de la profundidad local. Nótese que (3.32) asegura que las partículas que quedaron en la superficie libre luego de aplicar (3.25) y las condiciones de borde, permanecen en la superficie libre al modificarse su posición por efectos de impermanencia. Lo mismo ocurre con aquellas partículas que quedaron en el fondo. Además, resulta $z_p \leq h \forall t$.

3.9 Paso de tiempo

Típicamente, la MEL utiliza una discretización temporal explícita para la componente estocástica. En turbulencia inhomogénea, donde T_L cambia con la posición, resulta tentador utilizar un esquema adaptivo donde el paso de tiempo cambia de acuerdo al valor local de T_L , en lugar de uno en el cual $\Delta t < \min(T_L)$.

Sin embargo, tal esquema puede conducir a un sesgo en los desplazamientos, que entonces presentan una deriva sin realidad física (Wilson and Flesch, 1993). Luego, resulta más seguro utilizar el clásico esquema de discretización con paso temporal constante.

En este último caso, el paso temporal entre desplazamientos consecutivos de las partículas está limitado, de modo de asegurar que las partículas sigan las líneas de corriente del flujo:

$$\Delta t \leq \Delta t_{max} \equiv \min \left(\frac{\Delta x}{\max |\mathbf{u}_{ef} \cdot \hat{x}|}, \frac{\Delta y}{\max |\mathbf{u}_{ef} \cdot \hat{y}|}, \frac{\min(\Delta z)}{\max |\mathbf{u}_{ef} \cdot \hat{z}|} \right) \quad (3.33)$$

Una forma alternativa a (3.33), más simple de evaluar, es:

$$\Delta t \leq \min (\Delta t_a, \Delta t_d, \Delta t_b) \quad (3.34)$$

donde se consideran por separado los efectos advectivos, difusivos y de empuje, siendo

$$\Delta t_a = \min \left(\frac{\Delta x}{\max |u|}, \frac{\Delta y}{\max |v|}, \frac{\min(\Delta z)}{\max |w|} \right) \quad (3.35)$$

$$\Delta t_d = \min \left(\frac{\min(\Delta x^2, \Delta y^2)}{6(\sqrt{K_0} + \sqrt{K_L} + \sqrt{\mathbf{n}})^2}, \frac{\min(\Delta z^2)}{6(\sqrt{K_0} + \sqrt{K_V} + \sqrt{\mathbf{n}})^2} \right) \quad (3.36)$$

$$\Delta t_b = \frac{\min(\Delta z)}{\max |\mathbf{u}_b \cdot \hat{z}|} \quad (3.37)$$

con la velocidad de empuje definida por (3.28).

En el caso de flujos impermanentes, en general el paso de tiempo del MDA resulta inferior al de la discretización hidrodinámica. En tales circunstancias, los campos hidrodinámicos se interpolan linealmente para obtener los valores temporales intermedios requeridos:

$$\mathbf{j}(t) = f^n \mathbf{j}^n + f^{n+1} \mathbf{j}^{n+1} \quad (3.38)$$

donde $\mathbf{j}(t)$ es el campo hidrodinámico interpolado en el instante t ,

$$f^n = \frac{(n+1)\Delta t_{hidr} - t}{\Delta t_{hidr}}, \quad f^{n+1} = \frac{t - n\Delta t_{hidr}}{\Delta t_{hidr}} \quad (3.39)$$

con Δt_{hidr} el paso de discretización del modelo hidrodinámico, $\mathbf{j}^n = \mathbf{j}(n\Delta t_{hidr})$, $\mathbf{j}^{n+1} = \mathbf{j}(n\Delta t_{hidr} + \Delta t_{hidr})$ los correspondientes campos obtenidos con el modelo hidrodinámico, y n tal que $n\Delta t_{hidr} \leq t \leq (n+1)\Delta t_{hidr}$.

3.10 Campo de concentración

Para obtener los campos continuos de concentración se requiere de una transformación que actúe sobre la distribución discreta de partículas. El modelo trabajo por defecto con el esquema PIC (*Particle In Cell*), que consiste en subdividir en forma regular la grilla original y determinar la concentración (uniforme) de la especie j en cada subcelda s mediante:

$$C_{s,j} = \frac{\sum_{p \in s} m_{p,j}}{\nabla_s} \quad (3.40)$$

donde $m_{p,j}$ es la masa de la partícula p de la especie j y ∇_s es el volumen de la subcelda s

$$\nabla_s = \frac{\Delta x \Delta y \Delta z_k}{N_x N_y N_z} \quad (3.41)$$

siendo Δz_k la altura de la celda de la grilla original dentro de la cual se encuentra la subcelda s y N_i el número de subdivisiones de cada celda de la grilla original en la dirección i .

Entre sus principales ventajas, el método PIC conserva la masa (por definición) y resulta de fácil implementación.

Si se desea conocer la concentración en un entorno particular (por ejemplo, en una estación de seguimiento), se puede utilizar la expresión:

$$C_{D,j} = \frac{\sum_{p \in D} m_{p,j}}{\mathbf{ph}_D R_D^2} \quad (3.42)$$

donde D es un dominio cilíndrico vertical centrado en el punto de interés, con radio R_D y altura h_D . La expresión (3.42) está pensada para el caso de un flujo a superficie libre.

Alternativamente al método PIC, la ecuación (3.42) se puede aplicar simultáneamente sobre los nodos de una grilla más fina que la original, de modo de entregar un resultado con más detalle del campo de concentraciones en una zona reducida del dominio de cálculo (manteniendo aproximadamente el esfuerzo computacional). Respecto de aquel método, esta alternativa produce un suavizado del campo de concentraciones, y no conserva la masa.

Una variante similar consiste en repartir una fracción de la masa contenida en la celda de cálculo en las 26 celdas adyacentes. El método, denominado kPIC, conserva la masa contenida en la totalidad de las partículas, pero produce suavizado.

4. VALIDACIÓN

4.1 Ensayo con difusión pura

Este ensayo consiste en simular la inyección puntual (en $\mathbf{r}=\mathbf{r}_0$) e instantánea (en $t=0$), en un fluido en reposo, de una masa M_0 de un contaminante pasivo cuya densidad específica es idéntica a la del fluido (de modo de inhibir procesos de flotación o sedimentación). Luego, el único mecanismo de transporte activo es la difusión molecular, de modo que este ensayo permite observar el comportamiento del módulo de caminante aleatorio del modelo.

Bajo tales condiciones, se puede obtener una solución analítica para la evolución temporal de la concentración de contaminante en función de la posición:

$$C(\mathbf{r}, t) = \frac{M_0}{(4\pi t)^{3/2}} e^{-\left(\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)}{4\pi t}\right)} \quad (4.1)$$

Se consideró que el fluido es agua y $M_0=0.1\text{g}$. Se tomó como dominio un cubo de 1 m de lado, con \mathbf{r}_0 el punto medio del mismo. En la discretización se representó la masa inyectada a través de 10^5 partículas de masa $m_p=1\mu\text{g}$, se aplicó una grilla $\Delta r=0.05\text{m}$ de lado en cada dirección y se utilizó un paso de cálculo de acuerdo a (3.36)

$$\Delta t = 10\text{sec} < \Delta t_{dif} = \frac{\Delta r^2}{6\pi} \approx 420\text{sec} \quad (4.2)$$

Se simuló la evolución del sistema durante un tiempo de 50000sec (es decir, del orden de $100\Delta t_{dif}$). La figura 4.1 muestra la distribución espacial de partículas para $t=2000$, 10000 y 40000sec, en sendos cortes en el plano xy . En todos los casos las distribuciones presentan simetría de revolución alrededor del punto de inyección, mostrando que la difusión es simulada en forma isótropa (lo mismo se constató en los planos yz y xz).

En la figura 4.2 se muestran, para los primeros 5000sec de la simulación, distintos perfiles de concentración a lo largo de los ejes principales de la grilla de cálculo. Para obtener las concentraciones se aplicó el método PIC sobre celdas del mismo tamaño que las de la grilla de discretización del flujo. La comparación con las soluciones analíticas dadas por (4.1) para distintos instantes muestra un buen acuerdo.

El grado de precisión de los resultados de este ensayo se puede analizar a través de la figura 4.3. En la misma se presentan los errores relativos entre los resultados del modelo y la solución analítica, para distintos tiempos. El acuerdo es mejor en la zona central de las distintas campanas, una zona definida aproximadamente por el ancho estándar de las mismas. Más allá de esta zona se presentan dos regiones (simétricas, a ambos lados de cada campana):

- Cerca del borde externo de la nube de partículas, el número de partículas es relativamente bajo, de modo que la representación es más pobre que en la zona central, y los errores aumentan.
- En el exterior de la nube de partículas, la concentración calculada es nula, aunque la solución analítica prevé concentraciones no nulas en todo el dominio de cálculo (una limitación del modelo matemático asociado a tal solución, que presupone propagación de información con velocidad infinita). Entonces, el modelo Lagrangeano representa mejor la realidad en esta zona.

A modo de ejemplo, se muestra el efecto en el método PIC del tamaño de la celda de cálculo de la concentración. En este caso se utilizaron celdas de tamaño $\Delta r=0.02\text{m}$.

Para $t=1000\text{sec}$ (figura 4.4), el ajuste mejora respecto del caso anterior (lo cual se manifiesta en una banda de error más pequeña). Esto se debe a que el número de partículas es suficientemente elevado dentro de la mancha de contaminante como para permitir obtener una buena estadística de conteo con celdas más pequeñas.

En cambio, Para $t=5000\text{sec}$ (figura 4.5), el ajuste empeora, lo cual se aprecia tanto en la distribución de concentración como en el error calculado. Esto se debe a que la estadística se empobrece mientras el tamaño de la celda se reduce, si el número de partículas no es lo suficientemente grande.

Se observa, entonces, que cada distribución de partículas puede presentar un tamaño de grilla óptimo para el cálculo de las concentraciones mediante el método PIC, pero el mismo puede variar en función del tiempo.

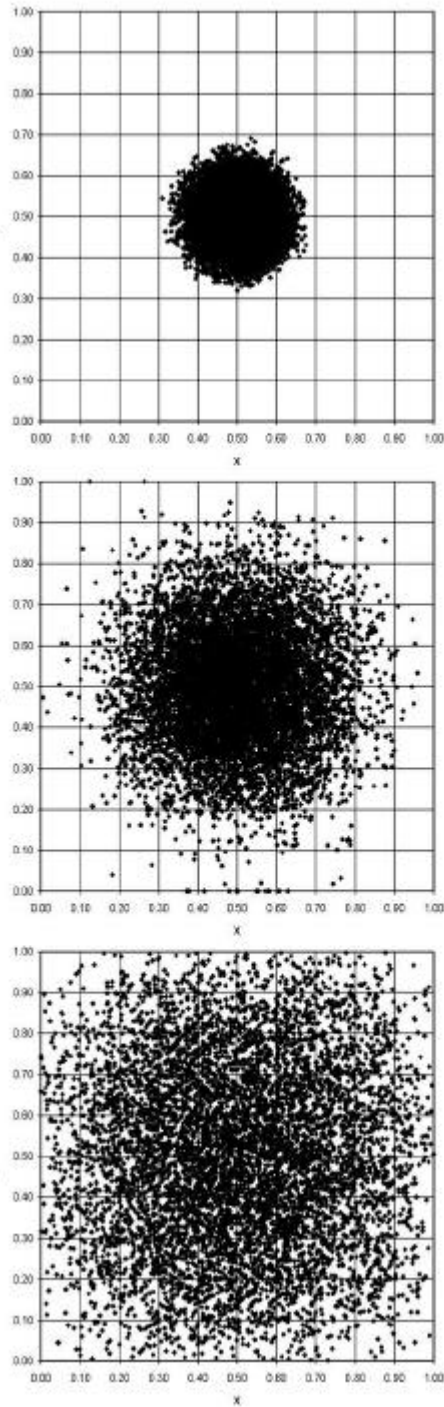


Figura 4.1 - Distribución de partículas para $t=2000\text{sec}$ (arriba), $t=10000\text{sec}$ (centro) y $t=40000\text{sec}$ (abajo).

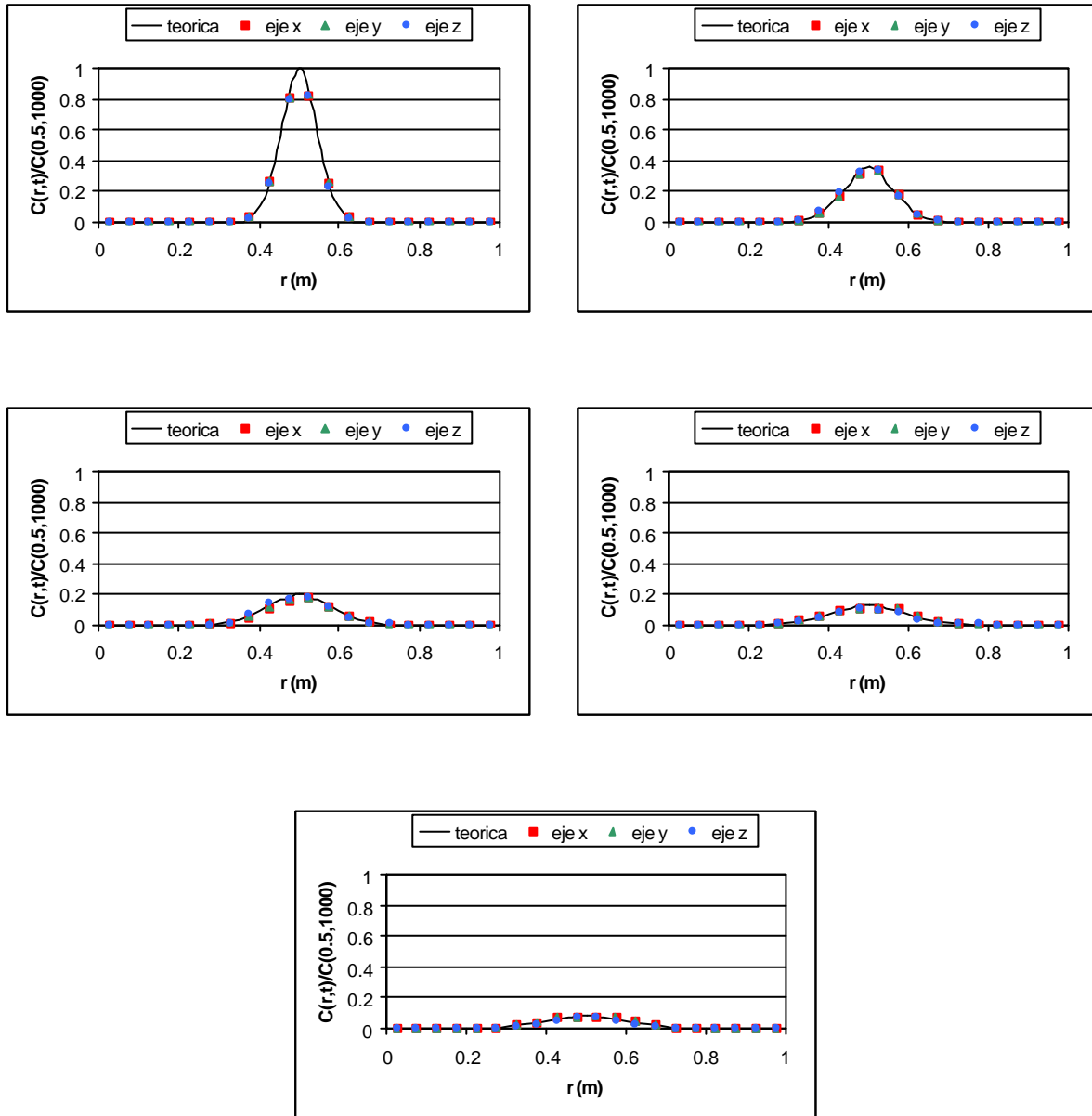


Figura 4.2 - Distribución de partículas sobre los ejes de la grilla de cálculo. En orden lexicográfico: $t=1000$ sec, 2000 sec, 3000 sec, 4000 sec y 5000 sec.

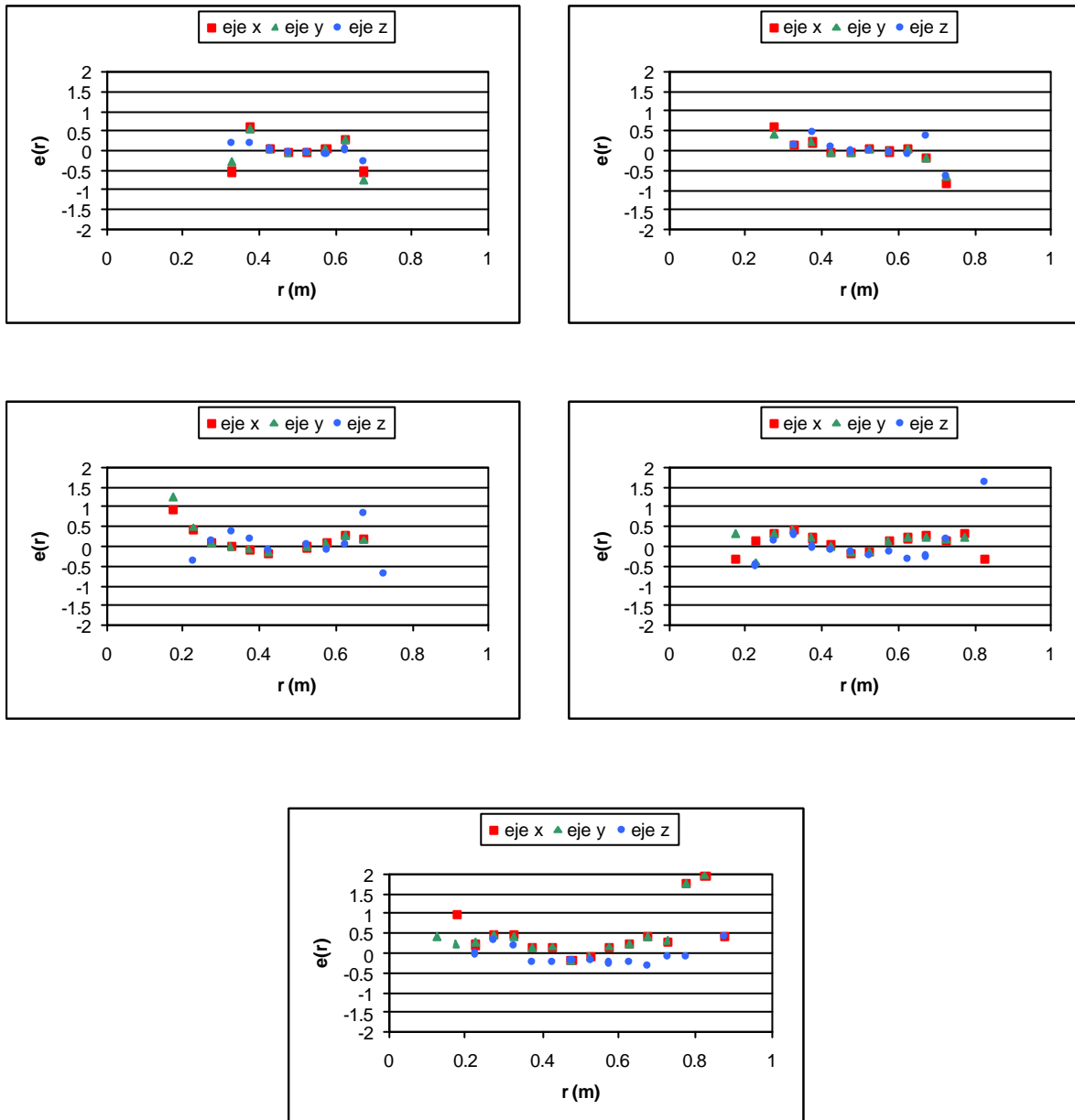


Figura 4.3 – Error relativo entre los resultados del modelo y la solución analítica. En orden lexicográfico: $t=1000\text{sec}$, 2000sec , 3000sec , 4000sec y 5000sec .

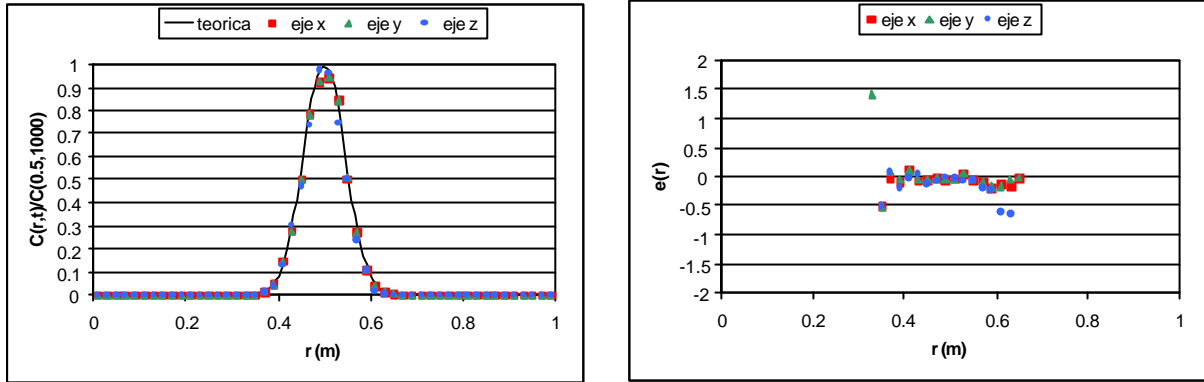


Figura 4.4 – Efecto del tamaño de celda en el cálculo de la concentración. Izquierda: concentración sobre los ejes para $t=1000\text{sec}$, Derecha: error relativo correspondiente.

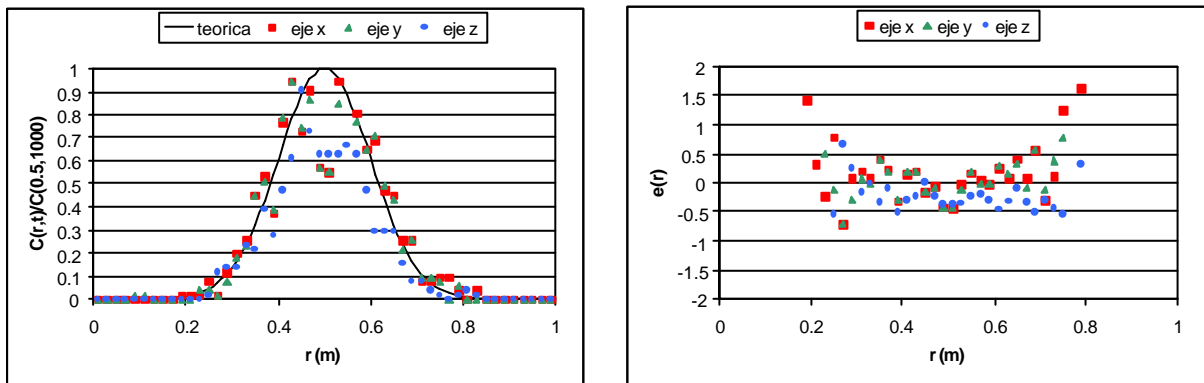


Figura 4.5 – Efecto del tamaño de celda en el cálculo de la concentración. Izquierda: concentración sobre los ejes para $t=5000\text{sec}$, Derecha: error relativo correspondiente.

4.2 Ensayo con advección pura

Este ensayo consiste en simular el transporte de una mancha de contaminante pasivo inyectada en un flujo en rotación estacionaria y uniforme. Se considera que el flujo es laminar, y que no hay procesos de flotación o sedimentación. Luego, el único mecanismo de transporte activo es la advección, de modo que este ensayo permite observar el comportamiento del módulo advectivo del modelo.

El ensayo se realiza de forma tal que la rotación está confinada en el plano xy , de modo que el campo de velocidades viene dado por:

$$\mathbf{u} = \hat{\mathbf{U}} \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (4.3)$$

siendo $\hat{\mathbf{U}} = \Omega \hat{\mathbf{z}}$, con Ω la frecuencia angular de rotación, \mathbf{r} el vector posición en el plano xy y \mathbf{r}_0 el centro de rotación en el mismo plano.

Bajo tales condiciones, la ecuación de transporte del contaminante es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial Cu}{\partial x} + \frac{\partial Cv}{\partial y} = 0 \quad (4.4)$$

Como distribución inicial, se tomó una mancha de contaminante circular cuya concentración decae desde el centro hasta el borde:

$$C = \begin{cases} 1 - \frac{r}{R} & r < R \\ 0 & r \geq R \end{cases} \quad (4.5)$$

donde $r = \sqrt{(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2}$ es la distancia desde el centro de la mancha (ubicado en x_1, y_1) y R es el radio de la misma.

Se utilizó un dominio cuadrado de 40 m de lado, con \mathbf{r}_0 el punto medio del mismo. Para el campo de velocidades se definió una frecuencia $\Omega = \pi/1200 \text{sec}^{-1}$. Para la mancha se consideró un radio $R=5\text{m}$ y se la centró en $x_1=10\text{m}$ e $y_1=20\text{m}$. En la discretización se representó la mancha inyectada a través de 3600 partículas de igual masa y distribuidas convenientemente (ver figura 4.6). Se aplicó una grilla $\Delta r=1\text{m}$ de lado en cada dirección, de modo tal que el paso de cálculo queda restringido de acuerdo a (3.35)

$$\Delta t < \Delta t_{adv} = \frac{\Delta r}{u_{max}} \approx 25 \text{sec} \quad (4.6)$$

donde se consideró la máxima velocidad actuante sobre la mancha inicial.

Se simuló la evolución del sistema durante un tiempo de 2400sec (es decir, tal que la mancha realice una rotación completa alrededor del centro del dominio).

La figura 4.7 muestra la distribución espacial de partículas luego de la primer rotación, para el caso $\Delta t = 80\text{sec}$. Esto permite observar el efecto de la violación de la condición (3.35), que produce una dispersión masiva del cúmulo de partículas, el cual pierde la forma original, aumentando su radio, a la vez que describe una trayectoria helicoidal cuyo radio respecto del centro de rotación es también creciente. Obsérvese que aproximadamente la mitad de las partículas ha abandonado el recinto de cálculo luego del primer giro.

La figura 4.8 muestra la distribución espacial de partículas luego de la primer rotación, para el caso $\Delta t = 20\text{sec}$, es decir, un paso algo inferior al máximo admisible. Ahora la mancha conserva aproximadamente su forma, y aparece simétricamente distribuida respecto del eje x . Sin embargo, se observa que el centro de la mancha se ha desplazado respecto de su posición inicial, e incluso la mancha aumento algo su radio, indicando un comportamiento similar al del caso anterior.

Esta patología se puede minimizar reduciendo el paso de cálculo, como lo muestra la figura 4.9 para el caso $\Delta t = 1\text{sec}$. Ahora la mancha, como entidad, prácticamente conserva el radio inicial, y está centrada en la posición original. No obstante, el detalle de la distribución original de partículas está distorsionado, observándose fuertes curvaturas de las líneas de asociadas a los contornos de igual concentración.

En este caso, el problema no proviene de la magnitud del paso de tiempo, sino que subyace en una pobre representación del campo de velocidades. La interpolación lineal dentro de cada celda de cálculo es insuficiente para representar la curvatura de las líneas de corriente. Para mostrar que éste es el problema, se realizó el mismo ensayo pero utilizando una discretización del campo de velocidades definida sobre una grilla con $\Delta r = 0.1\text{m}$ en cada dirección. El resultado se presenta en la figura 4.10, que muestra una distribución prácticamente idéntica a la inicial.

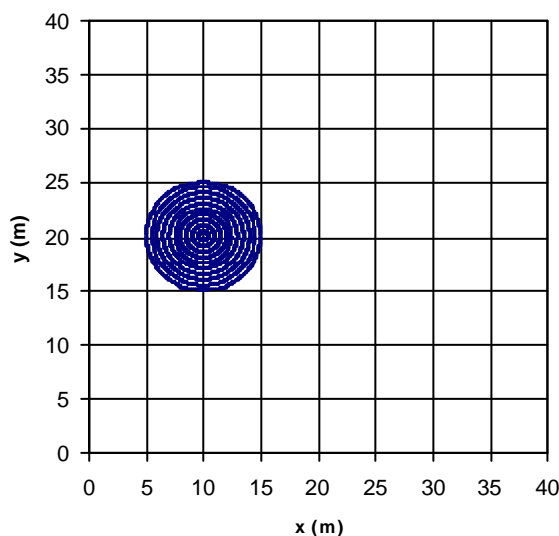


Figura 4.6 – Distribución inicial de partículas para representar la mancha circular de contaminante.

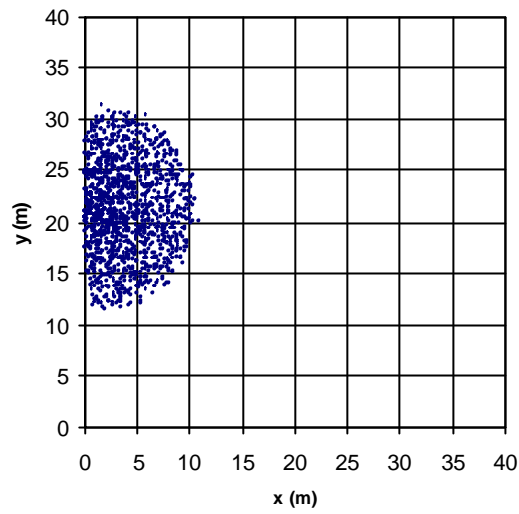


Figura 4.7 – Distribución de partículas luego de la primer rotación ($\Delta t = 80\text{sec}$).

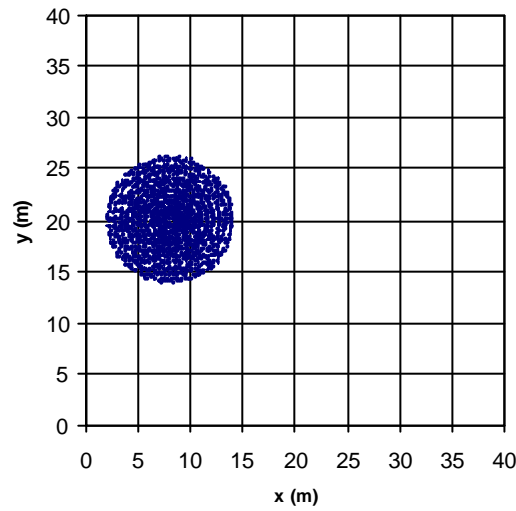


Figura 4.8 – Distribución de partículas luego de la primer rotación ($\Delta t = 20\text{sec}$).

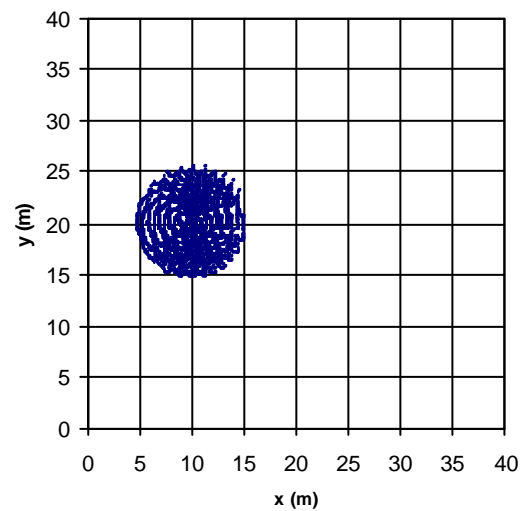


Figura 4.9 – Distribución de partículas luego de la primer rotación ($\Delta t = 1\text{sec}$).

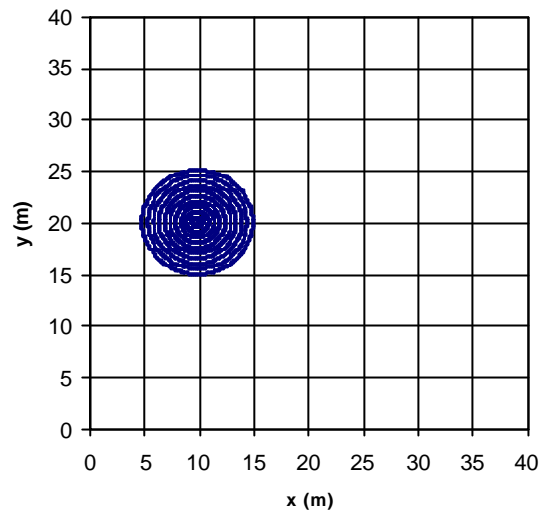


Figura 4.10 – Distribución de partículas luego de la primer rotación ($\Delta t = 1 \text{ sec}$).

Este ensayo pone de manifiesto una de las propiedades más importantes de la representación Lagrangeana del transporte de contaminantes, al poder resolverse problemas sin influencia de la difusión artificial presente, en mayor o menor medida, en todos los métodos numéricos basados en la discretización de la ecuación de transporte. Por ejemplo, la figura 4.11 muestra el resultado de este ensayo aplicando distintas técnicas numéricas para manejar el término de advección, y el método de diferencias finitas (MUMM 1999). Todas presentan diferencias significativas respecto de la solución teórica.

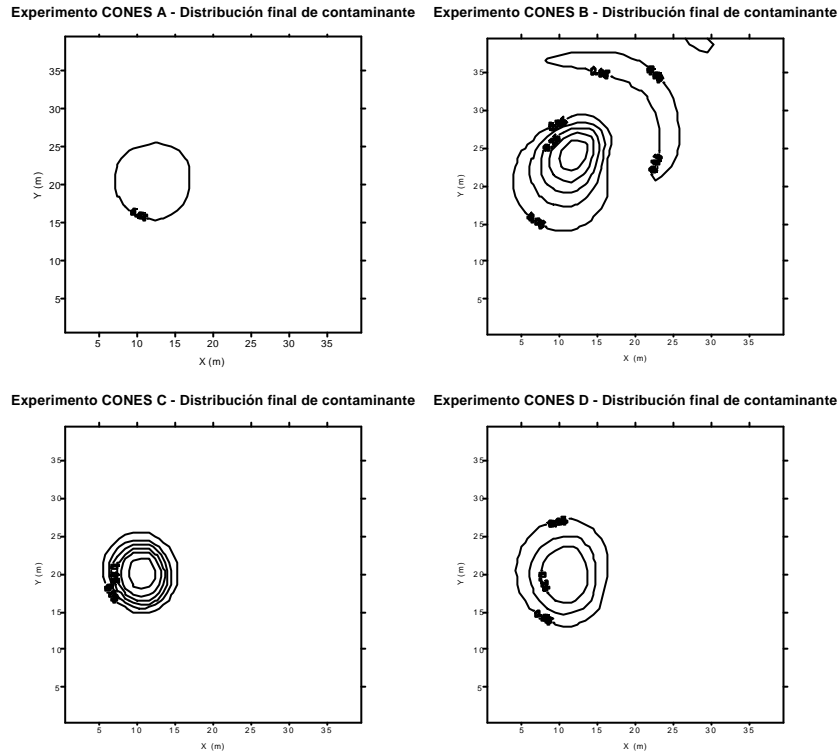


Figura 4.11 – Soluciones obtenidas aplicando distintas técnicas de discretización de la ecuación (4.4). A=upwind, B=Lax – Wendroff, C=TVD “superbee”, D=TVD monótona.

4.3 Descarga continua de contaminante en flujo uniforme

Se trata del flujo estacionario de un contaminante pasivo derramado sobre un flujo uniforme. Considerando que el flujo es uniforme en la dirección x , y que el contaminante se derrama en el punto x_0, y_0 , entonces la concentración aguas abajo del derrame viene dada por:

$$C(x, y) = \frac{c_f q_f}{2h\sqrt{\rho u K_T (x - x_0)}} e^{-\left(\frac{(y-y_0)^2 u}{4K_T (x-x_0)}\right)} \quad (4.7)$$

donde c_f y q_f son la concentración y el caudal de la fuente, respectivamente. La ecuación (4.7) presupone que no hay interferencia entre la mancha de contaminante y el cuenco, esto es, que el ancho del canal es infinito.

Para el ensayo se consideró un campo de velocidad uniforme $u=1\text{m/s}$. El problema se trató en forma bidimensional en planta, sobre un dominio regular de 1000 m de extensión en la dirección del flujo y 50 m de ancho. Para los pasos de la red de cálculo se tomaron $\Delta x=10\text{m}$, $\Delta y=1\text{m}$. A los efectos del cálculo de los parámetros de dispersión se consideró una profundidad $h=5\text{m}$ y un coeficiente de rugosidad de Manning $n=0.025$.

Para el paso de tiempo utilizado para descargar conjuntos de partículas en el punto de inyección se tomó $\Delta t=1\text{seg.}$, simulándose el flujo durante un tiempo de 1000 seg. Se tomaron conjuntos de 10, 100 y 1000 partículas inyectadas en cada paso de tiempo, lo que lleva el total de partículas al final de la simulación a 10.000, 100.000 y 1.000.000, respectivamente.

Se realizaron diferentes comparaciones entre los resultados del modelo y la solución analítica (4.7). La figura 4.12 presenta la evolución relativa de la concentración máxima (en $y=y_0$) sobre la coordenada x . Los tres tipos de ensayos realizados (cada uno con diferente número de partículas inyectadas), muestran que el modelo responde cualitativamente bien. Además, se observa que el aumento del número de partículas inyectadas produce convergencia entre los resultados numéricos y la solución analítica.

Lo anterior se visualiza mejor aún en la figura 4.13, que contrasta resultados teóricos vs. resultados del modelo independizándose de la coordenada espacial.

En la figura 4.14 se observa la distribución de partículas en la zona de campo cercano e intermedio, hasta unos 100 m aguas abajo del punto de inyección. Se han superpuesto las distribuciones teóricas a los 10 m, 50 m, y 100 m de la inyección, en escala arbitraria, para visualizar las diferencias entre uno y otro tipo de resultado. Resulta interesante observar que la desviación estándar de la solución analítica, identificada en cada punto por el ancho medio de las campanas de la figura 4.13, es representado correctamente por el campo de partículas.

Finalmente, la figura 4.15 muestra la distribución de partículas a distancias de hasta 1 km respecto de la inyección. El patrón observado luce realista.

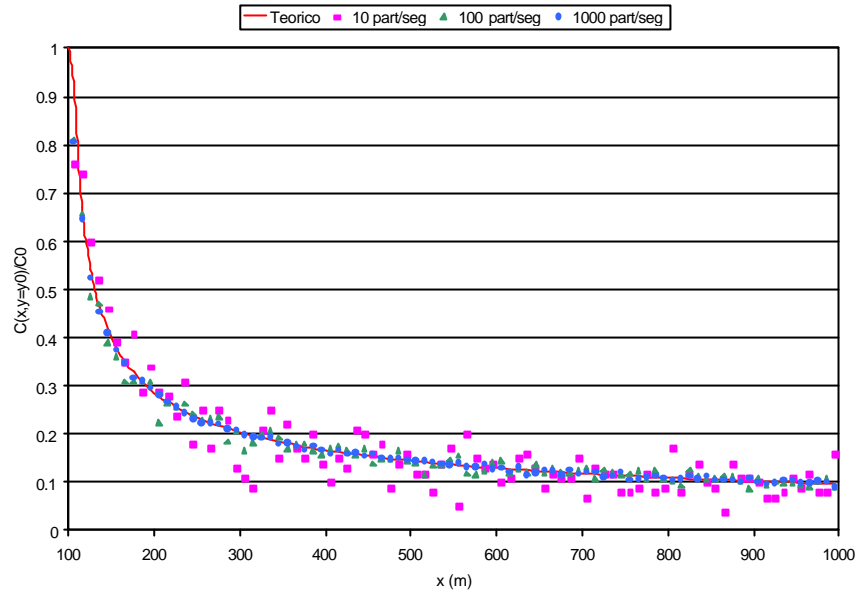


Figura 4.12 - Evolución de la concentración aguas abajo de un derrame estacionario en un flujo uniforme.

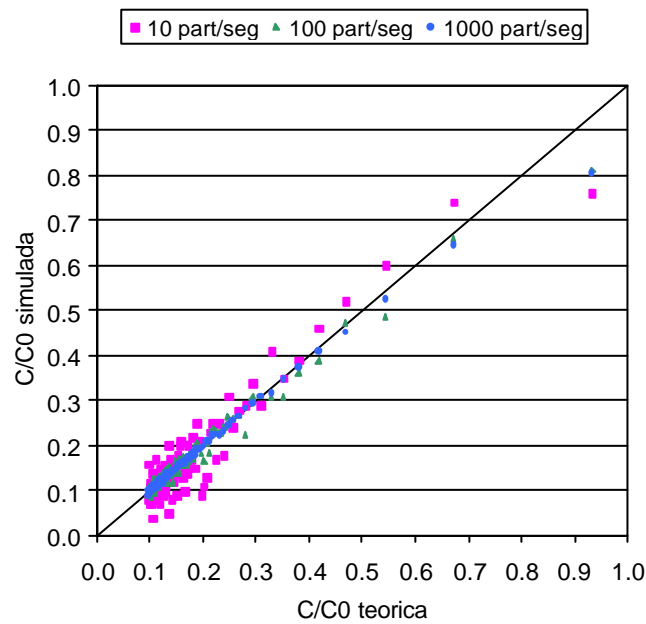


Figura 4.13 - Comparación entre resultados de modelo y solución analítica para un derrame estacionario en un flujo uniforme.

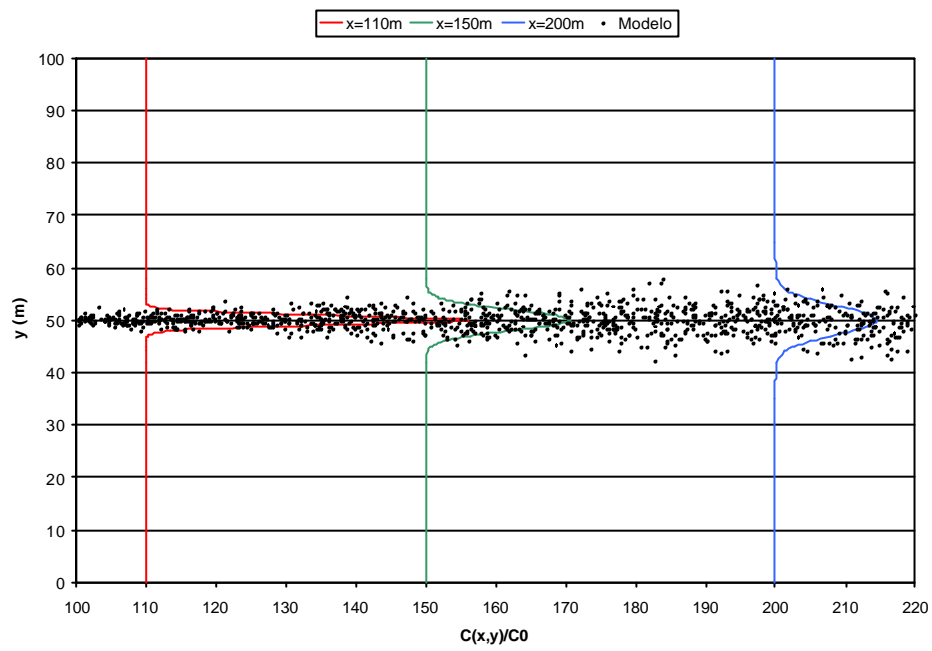


Figura 4.14 - Campo cercano e intermedio para un derrame estacionario en un flujo uniforme. Las líneas continuas representan la solución analítica.

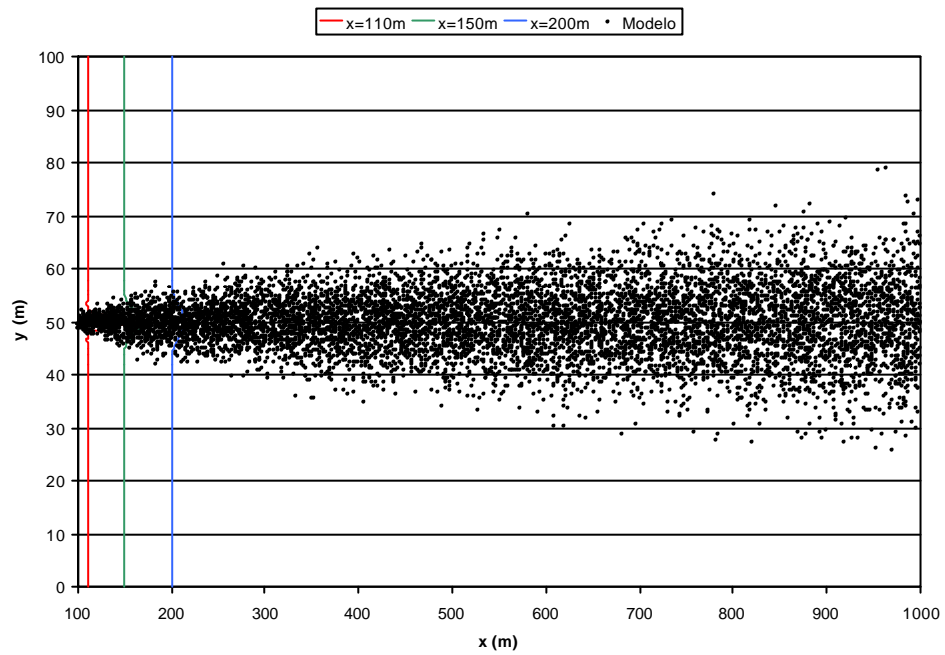


Figura 4.15 - Campo lejano para un derrame estacionario en un flujo uniforme. Las líneas continuas representan la solución analítica cerca del derrame.

CONCLUSIONES

Se planteó en forma teórica e implementó en un código computacional relativamente amigable, un modelo de transporte de contaminantes para flujos turbulentos complejos.

Se describieron en detalle los aspectos técnicos que conforman esta nueva herramienta del Programa de Hidráulica Computacional.

Se presentó la validación del modelo, a través de comparaciones con soluciones teóricas.

El modelo está siendo aplicado a un par de problemas prácticos, con resultados iniciales promisorios. En ellos se intenta realizar una validación con datos de campo, que escapa los alcances del presente Informe Técnico, dirigido a presentar las bases teóricas del modelo y su implementación computacional.

Las corridas preliminares realizadas en los problemas prácticos muestran que el tiempo de cálculo necesario para obtener resultados de interés ingenieril es relativamente alto. A partir de esta condición restrictiva, se planteó la paralelización del código, para su uso en cluster de PC o máquinas paralelas. Se está encarando este tema a través del convenio de interacción técnica entre el INA y la Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad de Buenos Aires.

REFERENCIAS

Brickman, D. And Smith, P.C., *Lagrangian Stochastic Modelling in Coastal Oceanography*, accepted with revision by JOAT (2001)

Fisher, H.B., *Longitudinal dispersion and turbulent mixing in open channel flow*, Annual Review of Fluid Mechanics, vol. **5**, Annual Reviews Inc., Palo Alto (1973)

Gardiner, C.W., *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural sciences*, Springer-Verlag, Berlin (1983)

Holley, E.R., *Unified view of diffusion and dispersion*, Journal of the Hydraulics Division, Proceedings of the ASCE, **95** HY2, pp. 621-631 (1969)

Holly, F.M., *Accurate calculations of transport in two dimensions*, Journal of the Hydraulics Division, Proceedings of the ASCE, **103** HY11, pp. 1259-1277 (1977)

Krone, R.B., *Flume studies of the transport of sediment in estuarial shoaling processes*, Hydraulic Engineering Laboratory, University of California, Berkeley (1962)

Menéndez, A.N., *Sistema Hidrobid II para Simular Corrientes en Cuencos*, Revista Int. de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería, **6**, pp. 25-36 (1990)

MUMM, Management Unit of the Mathematical Models of the North Sea (1999)

Partheniades, E., *A study of erosion and deposition of cohesive soils in salt water*, Ph.D. Thesis, University of California, Berkeley (1962)

Rodean, H.C., *Stochastic Lagrangian models for turbulent diffusion*, American Meteorological Society, 45 Beacon St., Boston MA 02108 (1996)

Swaford, B.L. and Guest, F.M., *Lagrangian statistical simulation of the turbulent motion of heavy particles*, Boundary Layer Meteorology, **54**, pp. 147-166 (1991)

Tarela, P.A., *Sedimentación en reservorios: modelación matemática y simulación numérica*, Tesis de Doctorado en Ingeniería, Fac. de Ingeniería, Univ. de Buenos Aires (2000)

Wilson, J.D. and Flesh, T.K., *Flow boundaries in random flight dispersion models: Enforcing the well-mixed condition*, J. of Applied Meteorology **32**, pp. 1695-1707, (1993)

Zhuang, Y., Wilson, J.D. and Lozowski, E.P., *A trajectory-simulation model for heavy particles motion in turbulent flow*, Journal of Fluids Engineering, **111**, pp. 492-494 (1989)

ANEXO 1

Generación de números pseudo-aleatorios

Para determinar los parámetros aleatorios se emplea un generador de números pseudo-aleatorios basado en el método de la sucesión lineal congruencial (SLC):

$$X_{n+1} = aX_n + c \pmod{\eta} \tag{A1.1}$$

Se utilizaron los siguientes valores para los coeficientes de la ec. (A1.1)

$$\begin{aligned} \eta &= 2^{31} - 1 \\ a &= 7^7 \\ c &= 0 \\ X_0 &= 314159265 \end{aligned} \tag{A1.2}$$

esto es, se trata de una sucesión multiplicativa.

Obsérvese que el período de esta SLC es, a lo sumo, del orden de $2(2^{30}-1)$.

Entonces se pueden obtener números pseudo-aleatorios U_n distribuidos uniformemente mediante

$$U_n(X_n) = \frac{X_n}{\eta} \tag{A1.3}$$

Para verificar la bondad del método se realizaron una serie de ensayos. En primer lugar se comprobó que $E(U) \cong 0.5$ y $Var(U) \cong 0.0833$, según se muestra en la tabla que sigue, para distintos números totales generados (N):

Tabla A1.1 – Esperanza y varianza del generador para distintos números totales generados.

N	E		Var	
	E_N	Error relativo (%)	Var_N	Error relativo (%)
1,000	0.493762	-1.248	0.0815234	-2.172
10,000	0.504129	0.826	0.0839441	0.733
100,000	0.501315	0.263	0.0833688	0.043
1,000,000	0.499739	-0.052	0.08337	0.044

Para visualizar que la distribución fuera aproximadamente uniforme se realizó el histograma que se muestra en la figura A1.1. En este caso se generaron $N=100,000$ números y se los clasificó en 100 clases C_k de manera tal que

$$C_k = \{U_n : 0.01(k - 1) \leq U_n < 0.01k\} \quad 1 \leq k \leq 100 \quad (A1.4)$$

Obsérvese que $1 \notin C_j$ para ningún j ya que η no es un valor obtenible con la relación de recurrencia (A1.1).

En la figura A1.1 se muestra la frecuencia relativa con que los valores generados se distribuyen en las clases C_k . Se aprecia que la distribución es “visualmente uniforme”.

Como otra forma de verificar la calidad del generador se realizó el test espectral que se presenta en la figura A1.2. Para observar el grado de falta de aleatoriedad se graficaron los pares de valores (U_{n+1}, U_n) . En la mencionada figura se representan 4000 de esos pares en el cuadrado unitario. Se observa que la distribución de puntos es homogénea, indicando que la correlación entre un valor y su sucesor es baja en algún sentido. Aunque este test no asegura que el generador sea “bueno”, un mal generador normalmente no es capaz de pasarlo (observándose correlaciones visibles como líneas oblicuas, por ejemplo).

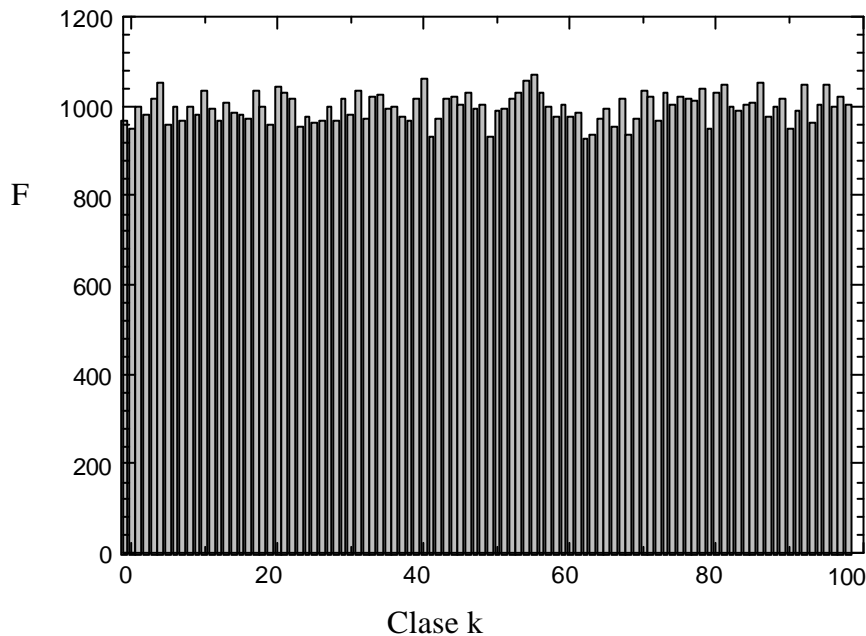


Figura A1.1 - Frecuencia relativa para distribución uniforme.
 Generador utilizado = multiplicativo, $N=100,000$

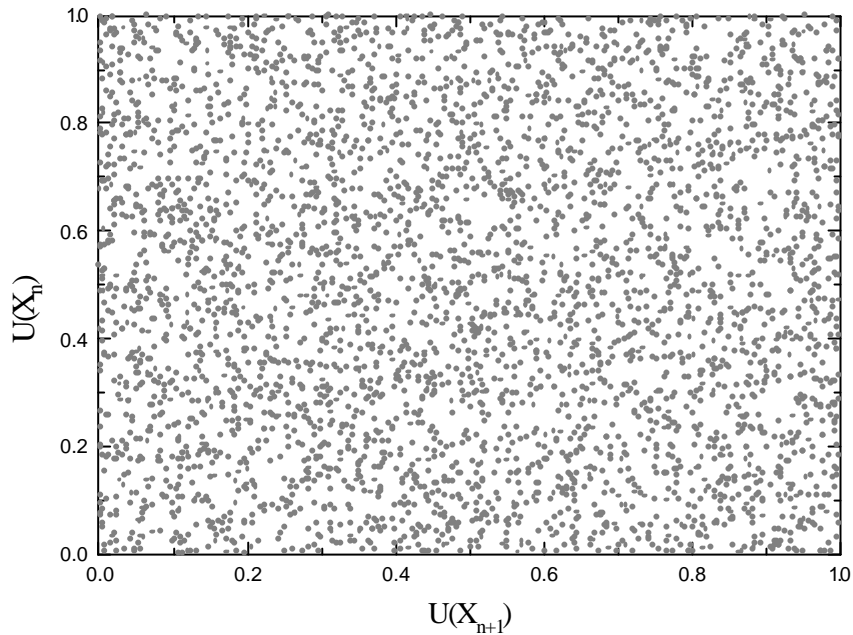


Figura A1.2 - Mapa de dispersión.
Generador utilizado = multiplicativo, N=100,000

Finalmente se realizó el test chi-cuadrado sobre la sucesión aleatoria obtenida. Para ello se calculó el estadístico

$$\sigma_{NGL} = \sum_{k=1}^{NGL+1} \frac{(F(U_k) - Np_k)^2}{Np_k} \tag{A1.5}$$

donde $F(U_k)$ es el valor de la frecuencia relativa de la clase C_k , N es el número de generaciones, $p_k=0.01$ y NGL es el número de grados de libertad con que se desea realizar el test (es decir, $NGL+1$ es el número de clases C_k). Se obtuvieron los siguientes resultados:

Tabla A1.1 – Test chi-cuadrado para el generador utilizado.

N	σ_{20}	σ_{10}
1,000	9.76	6.15
10,000	17.95	12.36
100,000	23.05	8.67
1,000,000	25.88	9.35

Para 20 grados de libertad el test chi-cuadrado indica que $\sigma > 31.41$ en el 5% de las ocasiones, y que $\sigma > 10.85$ en el 95% de los casos. Para 10 grados de libertad estos valores son: $\sigma > 18.31$ en el

5% de los casos y $\sigma > 3.94$ con probabilidad 0.95. Se observa entonces que el generador pasa el test (al menos con este juego de valores). Se debe hacer notar que para $N=10,000,000$ el valor esperado obtenido con este generador se acerca más al valor teórico que para los casos presentados anteriormente, aunque la varianza se aleja algo más del valor teórico que en el caso $N=1,000,000$. Para $N=100,000,000$ se registraron ciertas anomalías en ambos parámetros, por lo que no se utilizó este generador para obtener más de 10,000,000 de números pseudo-aleatorios.

De los test mostrados hasta aquí se puede inferir que las ecs. (A1.1) a (A1.3) proporcionan una forma aceptable de generar algunos cientos de miles de números pseudo-aleatorios uniformemente distribuidos.

En general, esta performance es suficiente a los efectos de su aplicación al MDA, ya que, eventualmente, se puede reiterar la serie de valores generados sin que esto se ponga de manifiesto en los resultados como una falta de aleatoriedad.