

VNIVERIDAD NACIONAL

AVENMA DE MEXICO

01157 UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO

MODELOS EULERIANO-LAGRANGEANOS EN FLUJOS A SUPERFICIE LIBRE: APLICACIÓN AL TRANSPORTE DE PARTÍCULAS SUSPENDIDAS Y AL CRECIMIENTO DE MICROORGANISMOS

ING. IVÁN SAÚL HERNÁNDEZ MÁRQUEZ

T E S I S PRESENTADA COMO REQUISITO PARA OBTENER EL GRADO DE MAESTRO EN INGENIERÍA (HIDRÁULICA)

DIRIGIDA POR: DR. HERMILO RAMÍREZ LEÓN





M 3 4 6 6 6 9



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Modelos Euleriano-lagrangeanos en Flujos a Superficie Libre: Aplicación al Transporte de Partículas Suspendidas y al Crecimiento de Microorganismos

IVÁN SAÚL HERNÁNDEZ MÁRQUEZ

DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO FACULTAD DE INGENIERIA U.N.A.M.

Febrero del 2003

Autorizo a la Diracción General de Biblioteces de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el Contenido de mi trabajo recepcional. NOMBRE: IVAN SAVL HERNANDEZ MARQUEZ FECHA: 09 A605TO 2005 FIRMA: ____

Al Padre Todo Poderoso, por ser mi fuerza, mi apoyo e inspiración.

> A mis padres, Saúl y Mercedes, y a mi hermana Carmen, por su amor, cariño y desprendimiento, los mejores padres y la mejor hermana.

> > A Margarita, con todo mi cariño y aprecio especial.

AGRADECIMIENTOS

A la Universidad Nacional Autónoma de México, por el apoyo brindado, para la elaboración de este trabajo de Tesis.

Al Instituto Mexicano de Tecnología del agua, por haberme albergado en sus instalaciones durante mi formación académica.

A la persona del Dr. Hermilo Ramírez, tutor de este trabajo de tesis, por el gran apoyo prestado para la realización de este trabajo, motivándome y alentándome para culminar con los objetivos propuestos.

En Especial al Licenciado Francisco Villavicencio, del Instituto Mexicano de Tecnología del Agua, generoso amigo, por su apoyo durante mi estancia en este país.

A todas las personas que me brindaron su amistad y apoyo, durante mi permanencia en el Instituto Mexicano de Tecnología del Agua, en especial al M.I. Roberto Mejía, al Dr. Rubén Morales, al M.I. Mauricio Escalante, a Chucho y Lyli, a la Sra. Marilu Barba, a Marilu hija, a Margarita Pedraza, a Alfonso Oláis, a los compañeros de tesis, Willinton, Clemente y Frank, a los maestros que me impartieron clases, a los compañeros de la DEPFI, todos buenos amigos y muy en especial a mis compatriotas y buenos amigos Adriana Camino y Boris Marañon.

A México, país hermoso y acogedor, que me dio la oportunidad y los medios para estudiar esta maestría.

Índice General

Índice	i
Relación de figuras y tablas	iv
Notación	xii
Resumen	xv
Abstract	xvi

Capitulo1. Introducción.

1.1 Introducción	1
1.2 Antecedentes	4
1.3 Justificación	6
1.4 Objetivos	8
1.4.1 Objetivo general	8
1.4.2 Objetivos específicos	8

CAPITULO 2 Dinámica del Flujo con Superficie Libre

2.1 Introducción	9
2.2 Ecosistema	10
2.2.1 Diversidad biológica y biodiversidad	11
2.2.2 Estructura de los ecosistemas	12
2.2.3 Funciones de los ecosistemas	13
2.2.4 Diferencia entre ecosistemas acuáticos y terrestres	13
2.3 Dinámica de lagos y ríos	14
2.3.1 Dinámica de lagos	14
2.3.2 Dinámica de ríos	15
2.4 Balance del sistema	16
2.4.1 Balance hídrico	16
2.4.2 Balance de masas	17
2.5 Ecuaciones básicas e instantáneas para el flujo incomprensible	18
2.5.1 Ecuaciones de la divergencia de la velocidad	18
2.5.2 Ecuación para el transporte de sustancias	19
2.6 Flujo turbulento	19
2.6.1 Teoremas de Reynolds	21
2.6.2 Ecuación de continuidad	22
2.6.3 Ecuación para la velocidad	22
2.7 El modelo к-є·····	25
2.7.1 Ecuación de la energía cinética de la turbulencia	25
2.7.2 Ecuación para la disipación de la energía cinética	26
2.7.3 Constante del modelo κ-ε·····	26

CAPITULO 3. Mecánica del transporte de partículas

3.1 Introducción	27
------------------	----

3.2 Los modelos de Calidad del Agua	29
3.2.1 Modelos eulerianos	29
3.2.2 Modelos lagrangeanos	31
3.3 Modelo Lagrangeano para el transporte de sólidos en suspensión	32
3.3.1 Introducción	32
3.3.2 Las ecuaciones del transporte sólido	33
3.3.3 Propiedades de los sedimentos	33
3.3.4 Modelo del movimiento de las partículas	36
3.3.5 Modelo del flujo y uso del campos de velocidades	40
3.3.6 Condiciones de frontera	42

CAPITULO 4. Aplicación al movimiento de partículas

4.1 Introducción		45
4.2 Descarga from	ntal a un estanque	46
4.2.1 Análisis	s hidrodinámico	47
4.2.1.1	Componente U de la Velocidad	52
4.2.1.2	Componente V de la Velocidad	53
4.2.1.3	Componente W de la Velocidad	54
4.2.1.4	Viscosidad turbulenta $\nu_{\rm T}$	55
4.2.1.5	Correlaciones dobles <i>uw</i> y <i>vw</i> en el fondo del canal	57
4.2.2 Movim	iento de las partículas	59
4.2.2.1	Perfiles de concentración y sembrado de partículas	59
4.2.2.2	Pruebas de ajuste	62
4.2.2.3	Simulación del movimiento de las partículas	69
4.3 Descarga late	ral a una corriente	87
4.3.1 Análisis	s hidrodinámico	88
4.3.1.1	Componente U de la Velocidad	90
4.3.1.2	Componente V de la Velocidad	91
4.3.1.3	Componente W de la Velocidad	92
4.3.1.4	Viscosidad turbulenta ν_{T}	93
4.3.1.5	Correlaciones dobles <i>uw</i> y <i>vw</i> en el fondo del canal	94
4.3.2 Movim	iento de las partículas	96
4.3.2.1	Simulación del movimiento de las partículas	96
4.4 Análisis de lo	s perfiles de concentración	104
4.4.1 Perfiles	de concentración para la descarga frontal	104
4.4.2 Perfiles	de concentración para la descarga lateral	108

CAPITULO 5. Aplicación al crecimiento de microorganismos

5.1 Introducción	110
5.2 Principales grupos de organismos	111
5.3 Las partículas depositadas en el fondo	114
5.4 Características de las poblaciones	117

5.5 Modelo de crecimiento poblacional	117
5.5.1 Crecimiento exponencial o ilimitado	118
5.5.2 Crecimiento logístico: el efecto de la capacidad de carga	122
5.6 Sembrado en la malla de fondo	127
5.6.1 Descarga frontal	128
5.6.2 Descarga lateral	130

CAPITULO 6. Conclusiones y Perspectivas

5.1 Conclusiones	131
5.2 Perspectivas	132

Bibliografía

Anexo 1. El modelo QUETZAL/3D

Anexo 2. Descripción de los modelos de transporte.

Lista de Figuras

- **1.1** Pluma de sedimentos, (a) Pluma del río Magdalena de Colombia y (b) pluma del río Papagayo en la costa pacifica de Léxico.
- **2.1** Efectos de los flujos de energía, (a) flujo de energía rápido y (b) flujo de energía lento.
- **2.2** Hipótesis de los roles funcionales de la diversidad de especies dentro de los ecosistemas.
- **2.3** Variables de ajuste del sistema fluvial (Morisawa, 1985), (a) variables de primer orden y (b) variables de segundo orden.
- 2.4 Fluctuaciones de una cantidad turbulenta.
- **3.1** Esquema euleriano para el movimiento de partículas, sobre un dominio tridimensional.
- **3.2** Esquema Lagrangeano para el movimiento de partículas, sobre un dominio tridimensional.
- **3.3** Esfuerzo cortante actuante sobre las partículas que se mueven en flujos a superficie libre.
- **3.4** Traslación de velocidades U, V y W, de una malla hidrodinámica, a la posición de la partícula, mediante interpolación lineal.
- **3.5** Perfil de velocidades en el eje *x*, para flujo máximo.
- **3.6** Estructuras laminar y turbulenta para un perfil de velocidades y su influencia sobre el transporte de sedimentos.
- **3.7** Condición de frontera para el movimiento de las partículas, δ es el espesor de la subcapa laminar.
- **3.8** Ubicación de una partícula sobre el espesor de la subcapa laminar, vista tridimensional y malla de discretización.
- **4.1** Vista tridimensional del dominio en estudio, para el ingreso frontal de un canal hacia un estanque.

- 4.2 Condiciones iniciales para la emisión frontal, (a) perfil de velocidades medias y (b) campo turbulento, condiciones de κ y ε.
- **4.3** Malla numérica, para el dominio tridimensional.
- **4.4** Vistas bidimensionales de la malla numérica, (a) plano *xz*, (b) plano *xy* y (c) plano *yz*, [ingreso frontal y lateral].
- **4.5** Convergencia del campo tridimensional de velocidades medias encontradas en el dominio de estudio, en plano semilogarítmico, [ingreso frontal].
- **4.6** Convergencia estacionaria para el campo de velocidades medio, encontrada en el dominio de estudio, en plano log-log, [ingreso frontal].
- **4.7** Convergencia de la velocidad superficial en el centro del dominio (sobre el plano *xy*) y a lo largo del dominio (sobre el plano *yz*), [ingreso frontal].
- **4.8** Campos vectoriales de velocidad, (a) dominio tridimensional, y (b) vista tridimensional sobre planos *yz*, [ingreso frontal].
- **4.9** Campo vectorial de velocidades, (a) plano *xy* y (b) plano central *xz*, [ingreso frontal].
- 4.10 Líneas de corriente en el dominio de estudio [ingreso frontal].
- **4.11** Líneas de corriente, (a) plano superficial *xy* y (b) plano central *yz*, [ingreso frontal].
- 4.12 Campo tridimensional para la componente U de la velocidad, [ingreso frontal].
- **4.13** Evolución de la componente U, sobre el plano superficial *xy*, [ingreso frontal].
- 4.14 Campo tridimensional para la componente V de la velocidad, [ingreso frontal].
- **4.15** Campo de la componente V de la velocidad, sobre el plano superficial *xy*, [ingreso frontal].
- **4.16** Campo de la componente V de la velocidad, vista en planos *yz*, [ingreso frontal].
- 4.17 Campo tridimensional para la componente W de la velocidad, [ingreso frontal].

- **4.18** Campo de la componente W de la Velocidad, vista en planos *yz*, [ingreso frontal].
- **4.19** Vista tridimensional del campo de la viscosidad turbulenta ν_T , [ingreso frontal].
- **4.20** Campo de la viscosidad turbulenta v_T , planos *xy*, [ingreso frontal].
- **4.21** Campo de la viscosidad turbulenta v_T , planos *yz*, [ingreso frontal].
- **4.22** Campo de las correlaciones dobles \overline{uw} , sobre el fondo del canal, vista en planta sobre el plano *xy*, [ingreso frontal].
- **4.23** Campo de las correlaciones dobles \overline{vw} , sobre el fondo del canal, vista en planta sobre el plano *xy*, [ingreso frontal].
- **4.24** Campo tridimensional de las correlaciones dobles \overline{uw} , [ingreso frontal].
- **4.25** Campo tridimensional de las correlaciones dobles \overline{vw} , [ingreso frontal].
- **4.26** Campo tridimensional de las correlaciones dobles \overline{uv} , [ingreso frontal].
- 4.27 Perfil de concentraciones para sólidos en suspensión.
- 4.28 Perfil de concentraciones, sembradas desde el canal emisor, [ingreso frontal].
- 4.29 Cajas computacionales para el cálculo de las concentraciones.
- **4.30** Simulación del movimiento, para el ajuste del modelo de partículas, gráficos a escala sin distorsionar, [ingreso frontal].
- **4.31** Ajuste numérico computacional para el modelo de movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.5), φp=62 μm, [ingreso frontal].
- **4.32** Ajuste numérico computacional para el modelo de movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.6), $\phi p=62 \mu m$, [ingreso frontal].
- **4.33** Ajuste numérico computacional para el modelo de movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.7), φp=62 μm, [ingreso frontal].
- **4.34** Ajuste numérico computacional para el modelo de movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.8), φp=62 μm, [ingreso frontal].

- **4.35** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.9), $\phi p=62 \mu m$, [ingreso frontal].
- **4.36** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.10), $\phi p=62 \mu m$, [ingreso frontal].
- **4.37** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.11), $\phi p=62 \mu m$, [ingreso frontal].
- **4.38** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.9), φp=100 μm, [ingreso frontal].
- **4.39** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.10), φp=100 μm, [ingreso frontal].
- **4.40** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.11), $\phi p=100 \mu m$, [ingreso frontal].
- **4.41** Número de partículas que quedan en el dominio después de la simulación del movimiento, φp=62 y 100 μm, [ingreso frontal].
- **4.42** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.9), φp=200 μm, [ingreso frontal].
- **4.43** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.10), $\phi p=200 \mu m$, [ingreso frontal].
- **4.44** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.11), $\phi p=200 \mu m$, [ingreso frontal].
- **4.45** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.9), φp=300 μm, [ingreso frontal].
- **4.46** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.10), ϕp =300 μm , [ingreso frontal].
- **4.47** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.11), φp=300 μm, [ingreso frontal].
- **4.48** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.9), ϕp =500 μm , [ingreso frontal].

- **4.49** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.10), $\phi p=500 \mu m$, [ingreso frontal].
- **4.50** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.11), ϕp =500 μm , [ingreso frontal].
- **4.51** Número de partículas que quedan en el dominio después de la simulación del movimiento, para partículas de 200, 300 y 500 μm, [ingreso frontal].
- **4.52** Vista tridimensional del dominio en estudio, para el ingreso de una descarga lateral a una corriente.
- **4.53** Perfil de concentraciones, sembradas en una descarga lateral que ingresa a una corriente.
- **4.54** Condiciones iniciales para la emisión lateral, (a) perfil de velocidades y (b) campo turbulento para la descarga lateral.
- **4.55** Campos vectoriales de velocidad, para un dominio tridimensional, [ingreso lateral].
- **4.56** Líneas de corriente y vectores de velocidad, sobre el plano superficial, [ingreso lateral].
- 4.57 Campo tridimensional de la componente U de la velocidad, [ingreso lateral].
- **4.58** Campo de la componente U de la velocidad, sobre el plano superficial *xy*, [ingreso lateral].
- 4.59 Campo tridimensional de la componente V de la velocidad, [ingreso lateral].
- **4.60** Campo de la componente V de la velocidad, sobre el plano superficial *xy*, [ingreso lateral].
- 4.61 Campo tridimensional de la componente W de la velocidad, [ingreso lateral].
- **4.62** Componente W de velocidad, sobre planos *yz*, [ingreso lateral].
- **4.63** Vista tridimensional del campo de la viscosidad turbulenta v_{T} , [ingreso lateral].
- **4.64** Campo de la viscosidad turbulenta v_T , plano xy del fondo, [ingreso lateral].

- **4.65** Campo de las correlaciones dobles \overline{uw} , sobre el fondo del canal, vista en planta sobre el plano *xy*, [ingreso lateral].
- **4.66** Campo de las correlaciones dobles \overline{vw} , sobre el fondo del canal, vista en planta sobre el plano *xy*, [ingreso lateral].
- **4.67** Campo tridimensional de las correlaciones dobles \overline{uw} , [ingreso lateral].
- **4.68** Campo tridimensional de las correlaciones dobles \overline{vw} , [ingreso lateral].
- **4.69** Campo tridimensional de las correlaciones dobles \overline{uv} , [ingreso lateral].
- **4.70** Simulación del movimiento de partículas, gráficos a escala sin distorsionar, [ingreso lateral].
- **4.71** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.9), φp=62 μm, [ingreso lateral].
- **4.72** Simulación del movimiento de partículas (ingreso lateral), para partículas de 62 μm de diámetro y empleando la ecuación (4.10).
- **4.73** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.11), φp=62 μm, [ingreso lateral].
- **4.74** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.9), φp=500 μm, [ingreso lateral].
- **4.75** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.10), φp=500 μm, [ingreso lateral].
- **4.76** Simulación del movimiento de partículas, empleando la ecuación (4.11), φp=500 μm, [ingreso lateral].
- **4.77** Numero de partículas que quedan en el dominio, después de la simulación del ingreso lateral, para partículas de 62 y 500 μm, [ingreso lateral].
- 4.78 Partículas sedimentadas en el fondo (descarga frontal); (i) diámetro de 62 μm, (ii) diámetro de 300 μm y (iii) diámetro de 500 μm.
- **4.79** Perfiles de concentraciones para partículas de 62, 300 y 500 μ m, obtenidos al centro del plano *xy* y sobre el eje *x*, para el ingreso frontal.

- **4.80** Perfiles de concentración, (a) perfiles promedio al centro del plano *xy* y sobre el eje *x* [ingreso frontal], (b) perfiles de concentración de la presa Sanmenxia en China y (c) perfiles de concentración de la presa Sautet en Francia.
- **4.81** Partículas sedimentadas en el fondo (descarga lateral); (i) diámetro de 62 μm, (ii) diámetro de 500 μm.
- **4.82** Perfile de concentraciones para partículas de 62 μm de diámetro, obtenidas para la descarga lateral.
- **4.83** Perfile de concentraciones para partículas de 500 μ m de diámetro, obtenidas para la descarga lateral.
- 5.1 Principales grupos de organismos.
- 5.2 Influencia de las corrientes en la disposición de las partículas sobre el fondo [ingreso frontal], (a) componente U de la velocidad, (b) líneas de corriente y (c) partículas sedimentadas en el fondo, ϕp =500 μm .
- 5.3 Influencia de las corrientes en la disposición de las partículas sobre el fondo [ingreso lateral], (a) campo ν_T , (b) líneas de corrientes y (c) partículas sedimentadas en el fondo, ϕp =500 µm.
- 5.4 Crecimiento de poblaciones para un grupo de microorganismos, que quedaron depositados en el fondo de un estanque, para una tasa de crecimiento μ_k =2.08.
- **5.5** Crecimiento de poblaciones para un grupo de microorganismos, que quedaron depositados en el fondo de un estanque, para diferentes tasas de crecimiento μ_k .
- **5.6** Crecimiento de poblaciones para un grupo de microorganismos, que quedaron depositados en el fondo de un estanque y están sometidas al movimiento.
- 5.7 Disposición espacial de una comunidad de microorganismos [ingreso frontal] (a) para un tiempo inicial t=0, (b) sistema estático y (c) sistema dinámico.
- **5.8** Curva de crecimiento de una población, influenciada por su capacidad de carga, (a) crecimiento limitado y (b) crecimiento limitado natural.
- **5.9** Crecimiento de poblaciones (modelo logístico), para una comunidad de microorganismos depositadas en el fondo de un canal.

- **5.10** Comparación del crecimiento de poblaciones, empleando modelos de crecimiento limitado y modelos de crecimiento logístico.
- 5.11 Disposición espacial de una comunidad de microorganismos [descarga lateral],
 (a) para un tiempo inicial t=0, (b) sistema estático y (c) sistema dinámico.
- **5.12** Comparación de modelos de crecimiento ilimitado, (a) sistema estático y (b) sistema dinámico.
- 5.13 Condición inicial del sembrado de partículas en el fondo.
- **5.14** Movimiento de partículas sembradas en el fondo, afectadas por las corrientes del ingreso frontal, (a) tridimensional, (b) plano *xy*, (c) plano *xz* y (d) plano *yz*.
- **5.15** Componentes de las velocidades y campos turbulentos sobre el fondo, (a) campo ν_T , (b) correlación doble \overline{uw} , (c) correlación doble \overline{vw} , (d) componente U, (e) componente V y (f) componente W.
- **5.16** Movimiento de partículas sembradas en el fondo, afectadas por las corrientes del ingreso lateral, (a) tridimensional, (b) plano *xy*, (c) plano *xz* y (d) plano *yz*.
- 6.1 Simulación numérica para el ingreso frontal, $\phi p=500 \mu m$, (a) vista tridimensional, (b) plano *xy*, (c) plano *xz* y (d) plano *yz*, para la condición de frontera tipo I.
- 6.2 Simulación numérica para el ingreso frontal, $\phi p=500 \mu m$, (a) vista tridimensional, (b) plano *xy*, (c) plano *xz* y (d) plano *yz*, para la condición de frontera tipo II.

Lista de Tablas

- **1.1** Modelos numéricos para la evaluación de la calidad del agua en ríos y lagos.
- **2.1** Fito-biomasa estimada en la litosfera y la hidrosfera de los ecosistemas terrestres y acuáticos, según Walter (1976).
- **2.2** Composición y dinámica de los ambientes lacustres (PNUMA, 1987).
- **2.3** Constantes del modelo κ-ε estándar.
- 3.1 Clasificación de granos, según la American Geophysical Union.
- **3.2** Parámetros a emplear en el modelo de transporte de partículas.
- **4.1** Registro de las partículas simuladas, para el ingreso lateral.

Notación

В	Biomasa [], ec. (5.3).
B ₀	Biomasa en el tiempo inicial [], ec. (5.4).
B _{i,s}	Biomasa que ingresa y sale del sistema [], ec. (5.1).
Bt	Biomasa en el tiempo t [], ec. (5.4).
С	Sustancia escalar [], ec. (2.6).
с	Concentración volumétrica de los sedimentos [gr/m³], ec. (3.5).
Ca	Concentración volumétrica de referencia en nivel a [gr/m³], ec. (4.1).
Сμ	Coeficiente experimental [],ec. (2.26).
d	Diámetro de la criba [m], ec. (3.4).
D	Derrames [], ec. (2.3).
D.	Diámetro característico de la partícula [], ec. (4.4).
d ₅₀	Diámetro de partícula para el cual pasa el 50% del material [μ m], ec.
	(3.10).
d90	Diámetro de partícula para el cual pasa el 90% del material [μ m], ec.
	(4.2).
D_{f}	Coeficiente de difusión [], ec. (2.6).
dh	Coeficiente de difusión $[m^2/s]$, ec. (4.5, 4.6 y 4.10).
d_m	Diámetro medio [m], ec. (3.3).
Е	Evaporación superficial del sistema durante un $\Delta t [m^3/s]$, ec. (2.1).
g	Aceleración de la gravedad $[m/s^2]$, ec. (2.5).
h	Profundidad del agua [m], ec. (4.1).
k	Coeficiente de velocidad, representa la frecuencia de creación
	destrucción, en el crecimiento de poblaciones [], ec. (5.2).
K	Máxima capacidad de carga [# de individuos], ec. (5.6).
L	Carga total [], ec. (2.3).
0	Perdida a través de los desagües propios del sistema para un periodo
	$\Delta t [m^3/s]$, ec. (2.1).

Р	Presión [N/m ²], ec. (2.5).
Pdep	Probabilidad para la deposición de las partículas [], ec. (3.11).
p _i	Porcentaje en peso, para un grano de diámetro d _i [], ec. (3.3).
Presusp	Probabilidad para la resuspensión de las partículas [], ec. (3.12).
q	Carga hidráulica por unidad de área superficial del lago $[(m^3/s)/m^2]$,
	ec. (2.2).
Q	Carga hidrológica total de los tributarios durante el periodo $\Delta t \ [m^3/s]$,
	ec. (2.1).
R	Lluvia total directa caída en el sistema durante un $\Delta t [m^3/s]$, ec. (2.1).
r(w)	Velocidad de llenado promedio [m/s], ec. (2.2).
S	Sedimentación [], ec. (2.3).
S	Gravedad específica [], ec. (3.4).
T(w)	Tiempo de llenado teórico del sistema [s], ec. (2.2).
U*	Velocidad cortante en el fondo [m/s], ec. (4.1).
U,V,W	Velocidades medias del fluido, en la dirección x , y y z respectivamente
	[m/s], (cap. 2, 3, 4 y 5).
ui	Velocidad fluctuante en el fluido [m/s], ec. (2.15).
$U_{i,j,k}, V_{i,j,k}, W_{i,j,k}$	Velocidades medias en las direcciones x , y y z que actúan sobre una
	partícula fluida [m/s], ec. (3.6).
$\overline{u_i u_j}$	Esfuerzos de Reynolds [m²/s²], ec. (cap. 3 y 4).
V	Volumen de control en un sistema [], ec. (5.1).
Ws	Velocidad de caída de una partícula, [m/s], ec. (3.4) y (cap. 4).
W _{s,m}	Velocidad de caída de una partícula en suspensión [m/s], ec. (3.5).
x_i^n, y_j^n, z_k^n	Posición de una partícula sólida en las coordenadas (x,y,z) , para el
	instante de tiempo n [m], ec. (3.6).
$x_i^{n+1}, y_j^{n+1}, z_k^{n+1}$	Posición de una partícula sólida en las coordenadas (x,y,z) , para el
	instante de tiempo $n+1$ [m], ec. (3.6).

Símbolos griegos

δ	Espesor de la subcapa laminar [m], (cap. 3).
ΔS_t	Cambios en el sistema [], ec. (2.3).
Δt	Paso de tiempo lagrangeano [s], ec. (3.6).
$\frac{\Delta V}{\Delta t}$	Cambio de volumen del sistema [m³/s], ec. (2.1).
e	Disipación de la energía cinética turbulenta [], ec. (2.26).
фр	Diámetro de la partícula [].
γ	Coeficiente empírico adimensional, para la velocidad de caída [], ec.
	(3.5).
Γ_{c}	Termino de creación destrucción [], ec. (2.6).
к	Energía cinética turbulenta [], ec. (2.26).
μ_k	Tasa especifica de crecimiento [], ec. (5.4).
μ _{kmax}	Tasa especifica de crecimiento máxima [], ec. (5.6).
ν	Coeficiente de viscosidad cinemática [s²/m], ec. (2.5 y 3.4).
$\boldsymbol{\nu}_{\mathrm{T}}$	Viscosidad turbulenta [m²/s], ec. (cap. 3 y 4).
$V_{T(i,j,k)}$	Coeficiente de viscosidad turbulenta que actúa sobre una partícula
	sólida en el tiempo $n [s^2/m]$, ec. (3.6).
ρ	Densidad del fluido [kg/m³], ec. (2.5).
ρ_s	Densidad del sólido [kg/m³], ec. (3.10).
στ	Constante de Von Karman [], ec. (2.27).
τ _{crit}	Esfuerzo cortante crítico para el inicio del movimiento de las
	partículas [N/m²], ec. (3.10).
$ au_{i}$	Esfuerzo cortante en el fondo, $\tau_1=\tau_x$ y $\tau_2=\tau_y$, en la dirección x y y
	respectivamente [N/m²], ec. (3.7).
$ au_{\mathrm{T}}$	Esfuerzo cortante turbulento [N/m²].
$ au_v$	Esfuerzo cortante viscoso [N/m²].
θ_{cr}	Parámetro critico de Shield [], ec. (4.2).

RESUMEN

Los problemas de contaminación producidos por el hombre, nos lleva a desarrollar tecnologías para recuperar y administrar nuestras fuentes de recursos naturales; en este trabajo se pone especial interés en el agua y en particular en sistemas de ríos. Para el análisis de ríos, además de conocer los procesos físicos, se deben también conocer los procesos y funciones que afectan al ecosistema, lo anterior permite plantear una estrategia de modelación, acorde con las necesidades del hombre, de forma que al explotar el ecosistema, no se dañen sus elementos importantes, de este modo se podrá aprovechar los recursos naturales a lo largo del tiempo y a costos rentables. En el presente estudio se analiza el comportamiento del movimiento de partículas en flujos a superficie libre, considerando dos casos de descarga a corrientes, el primero representa una descarga frontal (ingreso a embalses) y el segundo una descarga lateral (ingreso de efluentes), ambos casos son posteriormente acoplados a un modelo de crecimiento de microorganismos.

El esquema del modelo euleriano lagrangeano que se presenta, está dividido en tres partes. La primera parte soluciona la hidrodinámica de las corrientes, empleando un esquema euleriano; el modelo proporciona los campos de velocidades, los campos de viscosidades turbulentas y los campos de correlaciones dobles, éstas dos últimas son incorporadas al modelo del movimiento de partículas, para representar el movimiento producido por el efecto de la dispersión turbulenta y la condición de frontera en el fondo. La segunda parte corresponde al movimiento en sí de las partículas, por efectos de los campos hidrodinámicos, las partículas que ingresan al dominio en estudio para ser movidas son sembradas en forma de un perfil de concentraciones, que luego son transformadas a su equivalente en partículas considerando diámetros homogéneos. La tercera parte corresponde a la aplicación del crecimiento de microorganismos, asumiendo que las partículas que quedaron asentadas en el fondo después de la simulación, representan a comunidades de microorganismos, que a la vez son afectadas por el movimiento producido por las corrientes en el fondo.

Los resultados de las simulaciones para el ingreso frontal, muestran que la sedimentación se inicia con partículas de 200 µm de diámetro, y aumentan en función al diámetro; para el ingreso lateral el asentamiento se da hasta con partículas de 62 µm de diámetro. Se obtuvieron perfiles de concentración, para todas las simulaciones, y se compararon cualitativamente con perfiles medidos en campo, para la presa Sianmenxia en China y Sautet en Francia. Para la simulación del crecimiento de microorganismos, se tomó en cuenta el efecto de las corrientes en el fondo, esto permitió apreciar cómo las partículas son acumuladas en ciertos puntos del dominio, lo cual influye en la densidad de las poblaciones que es un limitante ambiental que afecta directamente al tamaño de las poblaciones.

ABSTRACT

The problems of contamination taken place by the man, it takes us to develop technologies to recover and to administer our sources of natural resources; in this work it becomes special interest in the water and in particular in systems of rivers. For the analysis of rivers, besides knowing the physical processes, one should also know the processes and functions that affect to the ecosystem, the above-mentioned it allows to outline a modelling strategy, chord with the man's necessities, so that when exploiting the ecosystem, their important elements are not damaged, this way he/she will be able to take advantage the natural resources along the time and at profitable costs. Presently study is analysed the behaviour of the movement of particles in flows to free surface, considering two cases of discharge to currents, the first one represents a front discharge (I enter to reservoirs) and the second a lateral discharge (offload entrance), both cases are coupled later on a model of growth of micro organisms.

The outline of the pattern euleriano lagrangeano that is presented, is divided in three parts. The first part solves the hydrodynamic of the currents, using an outline euleriano; the pattern provides the fields of speeds, the fields of turbulent viscosities and the fields of double correlations, these two last they are incorporate to the pattern of the movement of particles, to represent the movement taken place by the effect of the turbulent dispersion and the frontier condition in the bottom. The second part corresponds to the movement in yes of the particles, for effects of the hydrodynamic fields, the particles that enter to the domain in study to be moved are sowed in form of a profile of concentrations that then are transformed to its equivalent one in particles considering homogeneous diameters. The third part corresponds to the application of the growth of micro organisms, assuming that the particles that were seated in the bottom after the simulation, represent to communities of micro organisms that at the same time are affected by the movement taken place by the currents in the bottom.

The results of the simulations for the front entrance, show that the sedimentation begins with particles of 200 mm of diameter, and they increase in function to the diameter; for the lateral entrance the establishment is given until with particles of 62 mm of diameter. Concentration profiles were obtained, for all the simulations, and they were compared qualitatively with profiles measured in field, for the prey Sianmenxia in China and Sautet in France. For the simulation of the growth of micro organisms, it was taken into account the effect of the currents in the bottom, this allowed to appreciate how the particles are accumulated in certain points of the domain, that which influences in the density of the populations that is an environmental obstacle that affects directly to the size of the populations.

Capitulo1 Introducción

1.1 Introducción

El hombre en su afán de desarrollo genera actividades que tienden a simplificar las estructuras y las funciones de los ecosistemas, a ese proceso se le llama la aceleración del flujo de energía. La energía y los elementos minerales fluyen con rapidez entre el sistema físico y biológico, y el capital energético acumulado tiende a disiparse rápidamente hacia el espacio. Dentro de los efectos de acelerar los flujos de energía están: disminución de especies, fragmentación del hábitat (división del hábitat de las especies en islas), destrucción del hábitat, contaminación, deforestación, sobreexplotación agraria, emisiones de CO_2 , incendios, alteración del ciclo hidrológico del agua, etc. En un caso mas particular podemos poner como ejemplo la fauna natural de un río que es bastante diversa, aunque generalmente menos que la de un lago y en todo caso mas diversa de la que pueda haber en el mismo río después de recibir aguas contaminadas, la menor diversidad de especies en el río con agua contaminada no es simplemente debido a la contaminación de las aguas del río que puedan hacer imposible la vida de los individuos de ciertas especies mas sensibles, si no también por que toda contaminación introduce cambios o fluctuaciones y un sistema fluctuante tiende a generar un sistema con baja diversidad biológica.

En nuestro pensamiento actual, la naturaleza es un recurso ilimitado y por ser autoregenerable carece de un valor de cambio. Actualmente es posible cuantificar las externalidades positivas o negativas que se derivan de la explotación de los recursos naturales, como es el caso de los daños producidos por la contaminación, deforestación y otros; un estimado actual de los servicios ecosistémicos proporcionados por la naturaleza, ascienden en dinero a 3 veces el Producto Interno Bruto (PIB) de todos los países de este planeta; de lo anterior concluimos que la tierra y el agua son capitales valiosos y depende de nosotros cuidarla y administrarla para obtener el mayor beneficio posible.

Se creía equivocadamente que el agua era un recurso abundante, renovable e inagotable y que sus contenedores naturales eran invulnerables, esto generó un manejo irresponsable del recurso (sobreexplotación y contaminación), generando efectos como inundaciones, contaminación de los mares, deshielos, alteración de los climas entre otros, estos efectos han hecho que cada día la vida del hombre sea mas difícil por tener que tolerar una atmósfera sucia y por tener que pagar mas por los alimentos y el agua que bebe.

Los efectos de la contaminación están presentes en todas las formas y en todas partes; hoy en día es difícil encontrar elementos en total estado natural, debido a que las diversas actividades del hombre han provocado perturbaciones a escala global. Un componente importante en los aspecto de la contaminación es el transporte de sólidos en suspensión, como indicadores de la calidad de las aguas. Los sólidos en suspensión viajan a través del fluido, y adheridas a su superficie o atrapadas dentro de su capa limite, se transportan sustancias contaminantes, bacterias y algunos tipos de metales.



Figura 1.1: Pluma de sedimentos, (a) Pluma del río Magdalena de Colombia y (b) pluma del río Papagayo en la costa pacifico de México.

En la figura 1.1, se aprecia la magnitud de la emisión de las plumas de sedimentos de dos ríos; el contenido de las plumas de sedimentos esta compuesto de muchos elementos, entre ellos sustancias contaminantes, nutrientes o simplemente una elevada carga de partículas en suspensión; actualmente son muchas las personas que estudian ese y otros fenómenos relacionados al transporte. Este trabajo de tesis, aporta mas de una aplicación numérica computacional, que permite abordar problemas de contaminación de aguas, por efectos de los sólidos en suspensión. El dominio en estudio se ubica sobre un micro ecosistema, que esta representado en forma simplificada, por un ingreso (lateral o frontal) a una corriente.

Una primera aplicación, es el ingreso de una corriente de agua a un cuerpo receptor con condiciones hidroambientales diferentes; en esta aplicación se analizaron dos casos. El primero representa el ingreso frontal de una corriente a un estanque por medio de un canal emisor, por ese mismo canal se siembran partículas sólidas de diámetros uniformes de 62, 100, 200, 300 y 500 µm, el sembrado se hace en forma de perfiles de concentración y las partículas son movidas por campos de velocidades y campos turbulentos proporcionados por un modelo hidrodinámico del tipo κ - ϵ tridimensional; el modelo hidrodinámico proporciona campos vectoriales de velocidades, componentes de velocidades U, V y W, campos de viscosidades turbulentas y correlaciones dobles \overline{uw} y \overline{vw} . El movimiento de partículas esta dividida en un movimiento advectivo y un movimiento dispersivo (turbulento), el movimiento advectivo se da por las velocidades medias U, V y W, y el movimiento dispersivo se da por la influencia de la viscosidad turbulenta ν_T . La condición de frontera en el fondo para el movimiento de partículas, se ubica sobre la subcapa laminar, allí se calcula el esfuerzo cortante actuante y se le compara con el esfuerzo cortante critico de la partícula, para obtener la probabilidad de resuspensión o sedimentación; adicionalmente se asumió que la probabilidad para la resuspensión siempre sea mayor o igual al 90%, con esto se logra mover a las partículas, casi siempre que lleguen a la frontera; también se probaron otras condiciones de probabilidad, apreciándose formas diferentes de sedimentación. El segundo caso de aplicación de ingreso de corrientes, esta representado por el ingreso lateral de una corriente a un cauce, los principios que rigen a este análisis son los mismos que los dados para el caso del ingreso frontal, la diferencia esta en que el ingreso es lateral y por el cauce principal se mantiene un gasto constante. Adicionalmente a estos dos casos de estudio, la estructura del código numérico queda preparado para representar el transporte de sustancias tales como la Demanda Bioquímica del Oxigeno (DBO), el Oxigeno Disuelto (OD), los Nitrógenos orgánicos (Norg) y los Fósforos orgánicos (Porg).

Se considera también una segunda aplicación que toma en cuenta dos modelos de crecimiento de microorganismos. Esta aplicación tiene como condición inicial, la posición de todas las partículas que quedan asentadas en el fondo del canal como resultado de la primera aplicación, posteriormente se asume que las partículas representan a una comunidad de bacterias y que están sujetas a un crecimiento poblacional. El primer modelo, representa un crecimiento de bacterias sin limites en el tiempo (crecimiento ilimitado). El segundo modelo representa un crecimiento limitado en el tiempo y considera un tamaño máximo para la población (crecimiento logístico), este modelo se apega mas a la realidad, ya que el crecimiento de microorganismos es afectado por condiciones medioambientales, como puede ser la falta de alimentos, falta de espacio, entre otros. Los modelos antes mencionados se simulan de dos formas: (a) teniendo en cuenta que las comunidades de bacterias no se mueven del lugar donde quedaron depositadas y (b) las comunidades de bacterias se mueven en el espacio, por efectos de las corrientes hidrodinámicas que se presentan en el fondo; el hecho de incluir el movimiento en el fondo, permite conocer el efecto que tiene la dinámica del movimiento en el tamaño de las poblaciones.

Adicionalmente a las dos aplicaciones anteriores, se realizo una simulación del movimiento, teniendo como condición inicial un sembrado de partículas en el fondo del canal; las partículas sembradas poseen un diámetro de 62 μ m y están repartidas homogéneamente sobre el fondo del canal. Esta aplicación se realizo con el fin de conocer la forma del movimiento y la influencia del campo hidrodinámico en el fondo.

El modelo hidrodinámico empleado para este estudio, es el QUETZAL/3D, y fue desarrollado sobre un enfoque euleriano, sus resultados son presentados en archivos de texto y luego graficados con el software TECPLOT; el modelo que describe el movimiento de los sólidos en suspensión se desarrolló bajo un esquema Lagrangeano y sus gráficos son presentados en MATLAB.

1.2 Antecedentes

Desde finales del siglo XIX hasta la actualidad, muchos estudios han sido realizados para determinar el comportamiento de la dinámica de las corrientes en lagos, mares, cauces naturales y canales. En la primera mitad del siglo XX, se desarrollaron las teorías del transporte y de 1960 a la actualidad se cuentan con herramientas computacionales que permiten modelar sistemas de ríos, lagos o mares que involucran una gran cantidad de variables y áreas geográficas completas. El efecto turbulento presente en la naturaleza, se resuelven mediante el empleo de modelos de turbulencia, que pueden ser de orden cero, uno, dos o modelos algebraicos. Para analizar un sistema de ríos o lagos, contamos con modelos de tipo: (a) hidrodinámicos, que solucionan las ecuaciones del movimiento, para obtener campos de velocidades y campos turbulentos; (b) modelos de mecánica del transporte, sirven para representar los fenómenos de sedimentación erosión, la mayoría de sus principios son empíricos y con mucha frecuencia se ayudan de la experimentación; (c) los modelos de calidad del agua, que sirven para simular el comportamiento de sustancias bajo efectos físicos y químicos, como son el movimiento y las reacciones químicas entre sustancias, la mayoría de estos modelos simplifican los aspectos físicos, pero sus alcances prácticos hacen de ellos una herramienta útil para el diagnostico y prevención de sistemas naturales; en la tabla 1 se presenta una cronología de modelos de calidad del agua en ríos, lagos y mares, realizados desde 1925 hasta la fecha.

Año	Lugar	Descripción del modelo	Autor
1925	EEUU	Modelo de Oxigeno Disuelto, para analizar la capacidad de	Streeter-Phelps
		auto depuración del río Ohio	
1963	EEUU	Modelo de oxigeno disuelto, para descargas múltiples en un	Texas Water
		estuario, (DOSAG).	Developed Board
1968	Australia	Modelo de calidad del agua en lagos, modelos estadísticos	Richard Vollenweider
		para relacionar el estado trófico de los lagos con	
		características de su cuenca, bajo efectos del fósforo.	
1974	EEUU	Modelo para el análisis de la temperatura en sistemas multi	Hydrologic
		segmentados, (LAKECO)	Engineering Center
1970s	EEUU	Modelos para el análisis de la estratificación térmica, (TVA y	Cornell Aeronautical
		WRE).	Lab.
1970s	EEUU	Modelado de lagos pequeños y medianos, empleando	Jorg Imberger
		ecuaciones de conservación de la energía cinética producida	
		por el viento.	
1980	Canadá	Modelos de circulación y mezclado, para predecir las	Simons
		concentraciones de fósforos en los lagos.	
1976	EEUU	Modelos de recirculación de nutrientes, sedimentación del	EPA
		fitoplancton y de los nutrientes, y cargas de materiales.	
1980s	EEUU	Modelo para la evaluación, en estado estacionario, de las	EPA
		sustancias químicas orgánicas en sistemas acuáticos,	
1000		(EXAMS II).	
1980s	EEUU	Modelo para simular la hidrología de una cuenca y la	EPA
1000		calidad del agua receptora	ED 4
1980s	EEUU	Modelo para calcular la especiación acuosa, se basa en el	EPA
1000-		equilibrio termodinamico.	
1980s		Modelo para el analisis de los compuestos químicos toxicos	
		(MARTON)	
109/		(WASIOA). Modele para evaluar el impacto por motales tévicos en	
1704		sistemas acuáticos (MEXAMS)	
1981	Canadá	Modelo que determina las concentraciones del fitoplancton	Bukata, R. P.
	_ linud	v de sólidos suspendidos v disueltos.	
1987	Zurich	Modelo para determinar la velocidad de sedimentación v	Weilenmann
		distribución de partículas en la columna de agua.	

Tabla 1: Modelos numéricos para la evaluación de la calidad del agua en ríos y lagos.

Para saber en qué condiciones se encuentra un río o un lago se analizan una serie de parámetros de tipo físico, químico y biológico, que luego se comparan con parámetros aceptados internacionalmente que indicarán la calidad del agua para la preservación de ecosistemas y los distintos usos como son: consumo, actividades recreativas y actividades productivas.

Las partículas que viajan suspendidas en un flujo, o se arrastran por el fondo, son el medio de transporte de algunas sustancias, por eso se les considera como indicadores de la calidad del agua. Las sustancias transportadas por las partículas viajan adheridas a ellas y pueden ser contaminantes o materia orgánica, son pocas las sustancias que viajan en estado inalterado, a excepción de algunos metales. Las partículas son movidas por las corrientes hidrodinámicas y ala vez están sujetas a mecanismos físicos como el desgaste y la abrasión, también son propensas a reacciones químicas y biológicas. Para el modelo de transporte presentado en este trabajo se consideran dos de las propiedades mas importantes de las partículas, como son la densidad y la velocidad de caída.

Sustancias tales como: la DBO, el OD, los N_{org} y los P_{org}, son indicadores universales de parámetros de calidad del agua y cuentan con un mayor número de registros, por lo común son preferidos ante otros parámetros, siendo su característica mas importante, la capacidad de inferir en comportamientos mas globales del medio en estudio. En este estudio el esquema y la estructura del modelo permite acoplar las ecuaciones para el transporte de las sustancias arribas mencionadas, pero para las aplicaciones que presentamos, no nos fue posible implementarlas, debido al dominio del estudio, esto por que tales sustancias reaccionan en distancias muy grandes, en algunos casos pueden alcanzar miles de metros, sobrepasando así el dominio de nuestro estudio.

La modelación numérica ofrece una alternativa adicional ala toma de muestras en el campo, por ser casi siempre mas económica, lo deseable es emplear un modelo confiable con datos fiables, para obtener una buena aproximación del comportamiento de un sistema; en la realidad las mediciones de parámetros físicos, químicos, microbiológicos, estudio biológico de riberas y lechos de ríos, se hace esporádicamente.

1.3 Justificación

Los cuerpos de agua son fuentes que se emplean en el consumo humano, para fines industriales y actividades recreativas, su importancia es tal que no se puede prescindir de dicho elemento. Actualmente su uso y gestión se rige de elementos de juicios que valoran su gran importancia, debido a la escasez del recurso y a la contaminación a la que están sujetas las masas de agua. Desde un punto de vista material, la contaminación genera grandes perdidas económicas, esto se refleja en los gastos adicionales de productos utilizados para potabilizar el agua, pérdidas de fuentes de ingreso por la destrucción de la riqueza pesquera, pérdidas por retraimiento del turismo de zonas afectadas, gastos para reponer o reparar estructuras (conductos y construcciones en general) en contacto con el agua contaminada, entre otros.

Continuamente se aportan soluciones tecnológicas al problema de la contaminación, deseando mejorar las condiciones del ambiente en que vivimos. Actualmente es importante aprovechar los recursos naturales sin degradarlos, para poder seguir sirviéndonos de ellos en el tiempo, para ello también se cuenta con muchas acciones que se encaminan a recuperar cuerpos de agua, que desde hace mucho tiempo han servido como contenedores de volcados de efluentes industriales y cloacales. Para abordar el problema tecnológicamente se requiere conocer aspectos como la física que rige el movimiento, las reacciones químicas y biológicas que se presentan en el sistema y el conocimiento de los ecosistemas, para así poder mantener un ecosistema (artificial) que nos sirva como fuente de insumos; un ecosistema favorable no implica un ecosistema simple y totalmente artificial, ya que es indispensable contar con elementos naturales como son el aire, los nutrientes y muchos otros compuestos esenciales para la vida.

No siempre es posible contar con información básica relacionada a los recursos naturales de los ecosistemas. Aspectos tales como la disponibilidad de nutrientes, contenido de contaminantes y su dinámica en función de la radiación solar y la interacción con y entre los componentes bióticos de los sistemas acuáticos son poco estudiados o se encuentran en fases tempranas de investigación. Otro aspecto poco tratado es la dinámica de las corrientes, encontrándose parcialmente involucrado en la modelación de los sistemas (debido a su complejidad); Conocer la dinámica de las corrientes facilitaría el entendimiento de fenómenos como: los mecanismos de transporte, suspensión, resuspensión, deposición y arrastre de los sedimentos, así como otros procesos químicos y biológicos.

El estudio mediante un modelo de transporte de partículas en suspensión y su aplicación al crecimiento de microorganismos, son una muestra del interés que se tiene por contribuir en implementar herramientas de diagnostico efectivos y económicos, para la calidad de las aguas; estos modelos pueden ser usados en estudios preliminares, de mediano y corto alcance, buscando conocer la dinámica y algunos de los procesos internos de los cuerpos de agua que están sujetas a la contaminación, alteración y degradación de funciones y procesos de los ecosistemas.

1.4 Objetivos

1.4.1 Objetivo general

Proporcionar un modelo numérico que represente cualitativamente la dinámica del transporte de sedimentos en suspensión, para los casos de ingresos de ríos a lagos y de afluentes a cauces principales, así como encontrar la influencia de la dinámica de las corrientes en el proceso biológico del crecimiento de microorganismos. También se desea proporcionar un elemento de ayuda a quienes deseen saber cual es el comportamiento simulado del movimiento de partículas, para aplicaciones químicas y biológicas.

1.4.2 Objetivos específicos

- Aplicar y validar un modelo hidrodinámico en tres dimensiones que permita el estudio de la interacción de dos flujos con diferentes condiciones físicas.
- Determinar la importancia del empleo de campos de intensidades turbulentas, representadas por su coeficiente de viscosidad turbulenta ν_{T} , en el movimiento dispersivo de las partículas.
- Mediante la comparación de los esfuerzos cortantes en el fondo con los esfuerzos cortantes críticos de las partículas, determinar la deposición y el transporte.
- Acoplar dos modelos de crecimiento de microorganismos al modelo de movimiento de partículas y evaluar el tamaño de la población asumiendo a las partículas como bacterias.

Capitulo 2 Dinámica del Flujo con Superficie Libre

2.1 Introducción

El conocimiento del funcionamiento de los sistemas naturales, permiten promover una explotación adecuada de los recursos, y también realizar actividades de recuperación de sistemas dañados por la sobreexplotación y contaminación. En este capitulo se presenta una visión integral de los ecosistemas; auque no es posible realizar un modelo numérico computacional que simule un ecosistema compuesto de muchos elementos, es necesario conocer los principios básicos del funcionamiento de los sistemas naturales, para así poder tomar decisiones para un manejo integral.

Conociendo los principios que rigen a los procesos y funciones de los ecosistemas, se plantean las ecuaciones del movimiento, que sirven para representar a las corrientes que se presentan en canales y cauces naturales, lo anterior constituye un elemento básico para poder representar algunas interrelaciones que se producen dentro del flujo, tales como son el transporte de partículas, transporte de sustancias, mecanismos de erosión y sedimentación, reacciones químicas y biológicas, y en un futuro quizás la interrelación de componentes vivos e inertes, es decir un ecosistema.

Las leyes de la dinámica de fluidos están bien establecidas y pueden ser formuladas de varias maneras. El caso más habitual es el de suponer que el comportamiento de un sistema físico esta completamente determinado por las leyes de conservación. Existen tres leyes físicas fundamentales, que a excepción de los fenómenos relativistas y nucleares, se aplican a todos y cada uno de los flujos, independientemente de la naturaleza del fluido que se esté considerando, estas leyes son: la ley de la conservación de la masa (ecuación de continuidad y ecuación de conservación de especies cuando se aplica en un medio no homogéneo), segunda ley de Newton (ecuación de momentum) y primera ley de la termodinámica (ecuación de energía).

2.2 El ecosistema

El ecosistema es un conjunto de elementos (vivos e inertes) que interaccionan entre si. Los elementos que le componen pierden protagonismo, para reconocer a las interacciones y procesos como su cuestión esencial. Los ecosistemas pueden considerarse naturales, como muchas montañas y otros lugares silvestres, y artificiales, como la habitación donde trabajamos. Las características que podrían considerarse comunes a todos los ecosistemas, vienen determinados por el flujo de energía y el ciclo mas o menos cerrado que describen los elementos químicos al pasar desde los componentes del ambiente físico al biológico y viceversa.

El ecosistema no representa una entidad física, tampoco es una unidad en el espacio, ni la suma del biotopo (componentes inertes) y la biocenosis (componentes vivos), mas bien es la organización de la trama ecológica que subyace en el lugar, las relaciones ocurren en el tiempo y en el espacio, sin que tengamos que apreciar ninguna discontinuidad.

Los limites de la trama ecológica, si los tiene habría que delimitarlos subjetivamente, así por ejemplo: la superficie de un bosque puede medirse sin dificultad, pero no el ecosistema forestal, que en la realidad no cuenta entre sus propiedades con la del tamaño. Algunos procesos ecológicos se detienen en alguna frontera identificable por el aspecto del espacio a uno y otro lado de ella, pero otros muchos no. Igualmente un lago se extiende por donde es visible la lamina de agua que llena la cubeta inundada, pero los arroyos que lo alimentan pueden nacer en fuentes muy alejadas de esa lamina, el polvo y los propagulos que llegan al lago pueden generarse también muy lejos de esta lamina, sin embargo intervienen en las tramas ecológicas de toda la masa de agua que hay debajo. En el lago hay plancton, del que depende grandemente la vida en el agua, en los arroyos no, pero los nutrientes que transportan pueden alimentar a ese plancton. El lago es fácilmente delimitable, el ecosistema lacustre no lo es tanto, a menos que se definan de manera expresa algunas de las relaciones que constituyen el objeto de estudio y los limites espaciales hasta donde pueden ser medidas.

En la figura 2.1 se presentan los flujos de energía que pueden ocurrir en un ambiente natural o artificial, cada letra representa a una especie (animal o vegetal) o a cualquier otro elemento que forme parte del ecosistema. El flujo de energía rápido, es un sistema dinámico, influenciado por un alto flujo de nutrientes, que favorece a algunas pocas especies, esto provoca que la diversidad biológica tienda a disminuir, un ejemplo de los flujos de energía rápido son los monocultivos, allí la diversidad biológica por metro cuadrado esta conformada por una sola especie que es favorecido por nutrientes e insecticidas artificiales. El flujo de energía lento a diferencia del flujo acelerado, es un sistema que permite un mayor número de especies (alto valor de la diversidad de especies); la mayor presencia de especies en este sistema, se explica por el efecto de que a menor cantidad de nutrientes, todas las especies están en igualdad de condiciones de persistir, regulándose así y de forma natural la cadena trófica.



Figura 2.1: Efectos de los flujos de energía, (a) flujo de energía rápido, disminución de la diversidad aumento de los monocultivos, y (b) flujo de energía lento, alta diversidad.

2.2.1 Diversidad Biológica y Biodiversidad.

La diversidad biológica es un concepto asociado a una característica emergente de los ecosistemas y que representa un indicador de cambio de los mismos. Es mucho mas que una lista de especies (taxonomía), es un sistema complejo de relaciones, es un lenguaje que se puede entender.

La biodiversidad es una expresión de la discontinuidad de la vida en la tierra, en toda sus manifestaciones (especies, individuos, genes, comunidades y todas las posibles escalas de organización biológica); se emplea para tratar de explicar la potencialidad de un territorio, sin ningún interés naturalista, se preocupa mas en entender cuales son los factores que

regulan ciertos parámetros y de su incidencia social, dejando de lado la base científica, la biodiversidad es como un alfabeto, un archivo de la naturaleza (lista de especies).

Si hacemos una analogía entre la biodiversidad y la diversidad biológica, la primera seria como un alfabeto (a, b, c, d, e, f, ..., z) y la segunda a pesar de contener letras del alfabeto, es también capaz de transmitir un mensaje, así por ejemplo: En la UNAM se forman Maestros en Ingeniería Hidráulica.

La diversidad biológica y la biodiversidad son aproximaciones y por si solas son incompletas. En la figura 2.2, se tiene un esquema que permite explicar, una forma de relacionar los procesos ecosistémicos con el numero de especies, teniendo en cuenta los roles funcionales de la diversidad de especies.



Número de Especies

Figura 2.2: Hipótesis de los roles funcionales de la diversidad de especies dentro de los ecosistemas, formado por los siguientes grupos funcionales (a) optimo, (b) natural, (c) natural redundante y (d) sin relación.

2.2.2 Estructura de los ecosistemas

La estructura de un ecosistema de agua dulce esta integrada por componentes abióticos, nutrientes, elementos de traza y componentes bióticos. Los componentes abióticos están representados por sustancias inorgánicas, incluidas en ciclos materiales y por lo general están controladas por mecanismos como: la abrasión, las precipitaciones atmosféricas, la evaporación, el clima, entre otros.

Los nutrientes representados comúnmente por fósforo y nitrógeno, son fundamentales para la producción en lagos y arroyos, es común que el

fósforo se convierta en el factor limitante para la productividad debido a su escasa ocurrencia natural. Estos nutrientes y otros elementos de traza tales como el hiero, manganeso, molibdeno y zinc, son de vital importancia para la biología de los ecosistemas.

2.2.3 Funciones de los ecosistemas

Un ecosistema puede ser analizado desde un punto de vista funcional en los siguientes términos:

- *Circuitos de energía*, todos los procesos vitales son acompañados por transferencia de energía.
- Ciclos de nutrientes, conformado por los ciclos biogeoquímicos de los nutrientes mas importantes.
- Patrón de distribución y productividad de los organismos en el espacio y en el tiempo.
- *Cadenas alimenticias*, cadena alimenticia de pastizales, cadena alimenticia de detritus y las cadenas tróficas.

2.2.4 Diferencia entre ecosistemas acuáticos y terrestres

Para explicar la diferencia fundamental entre los ecosistemas acuáticos y terrestres, debemos entender primero dos conceptos sencillos, (a) la biomasa, que es la representación de toda forma de vida sobre una superficie que puede estar sobre la tierra, bajo la tierra o en el agua, (b) la taza de renovación, que representa el cociente entre la producción y la biomasa, así por ejemplo una tasa de renovación alta, representa una menor diversidad, y lo contrario representa una mayor diversidad. Los productores de la hidrosfera pertenecen en mayor parte al fitoplancton, siendo casi exclusivamente algas unicelulares. Su tasa de renovación se mide en horas y días, es decir poseen una tasa de renovación alta. Los productores de la litosfera, en cambio son principalmente plantas superiores de biomasa elevada y largos periodos de reproducción, en algunos casos se mide en años, esto representa una tasa de renovación baja; en la Tabla 2.1 se presenta una estimación entre los ecosistemas terrestres y acuáticos.

Tabla	2.1:	Fito-biomasa	estimada	en	la	litosfera	y	la	hidrosfera	de	los
ecosist	emas	s terrestres y a	cuáticos, se	egúi	n W	/alter (197	76)				

	Área 10º km²	Biomasa 10º ton	Producción anual 10º ton
Litosfera	149	2,000.0	150
Hidrosfera	361	2.8	60

Comparando los valores de la tabla 2.1 y recurriendo al concepto de tasa de renovación, se puede decir que existe mas diversidad en la litosfera que

en la hidrosfera, siendo la relación de biomasa entre litosfera e hidrosfera igual a 700, mientras que para la producción es de 2.5.

2.3 Dinámica de lagos y ríos

2.3.1 Dinámica de lagos

El cuerpo de agua de un lago, esta compuesta por la suma total de agua que recibe directamente de su cuenca de drenaje e indirectamente de las subcuencas de los tributarios que confluyen al lago. Todos ellos constituyen partes integrales del ciclo natural del agua. Los aspectos generales relacionadas a la dinámica de los lagos se tratan en la Tabla 2.2.

Área de drenaje (cuenca)	Probables consecuencias	Integración de consideraciones		
y actividades humanas	ambientales adversas	ambientales al desarrollo		
Asentamientos humanos	Carga ambiental para la	Ordenamiento del desarrollo		
Fuente de efluentes	población	Infraestructura		
públicos		Desarrollo		
		Saneamiento de viviendas		
		Esfuerzos públicos y		
		comunitarios		
Generación de energía	Fuente puntual de	Control de contaminación		
eléctrica	contaminación	Efluentes		
		Residuos descargas		
Noncian toriona				
Negocios, turismo		Productos		
		Procesos		
Transporte	Maxaaaaida	Control do accidentes		
	Navegación	Control de accidentes		
Obras civiles	Alteración irreversible del	Diseños de ingeniería, uso del		
	estado del medio ambiente	suelo, localización, rutas, diseño.		
		Tecnología, operación,		
Agricultura	Fuentes no puntuales de	agricultura sostenible,		
Forestaciones	contaminación	forestaciones pesca.		
Pesca		-		
B		Pesticidas regulación de		
Keservas de vida	Degradación de los recursos	fertilizantes, manejo de suelos,		
Silvestre Poseuro potresion	ambientales naturales	irrigación, ríos, planicies de		
rarques naturales		inundación y montañas		
Antecedentes naturales		Conservación natural		
Contaminación	Interrupción del soporte de	Protección de la vida suvestre		
transfronteriza (natural)	la vida de los sistemas	Protección del património		
. ,	ampientales			
		Control de inundaciones/sequía		

Tabla 2.2: Composición y dinámica de los ambientes lacustres (PNUMA, 1987).

Un río posee un flujo de agua, pero un lago consiste almacena el agua. Debido a los largos periodos de llenado de lagos, estos no pueden limpiarse tan rápidamente como los ríos. La provisión de nutrientes, productos químicos persistentes y metales pesados que se depositan en los sedimentos de fondo son muy difíciles de remover, como consecuencia precisamente de la larga duración del periodo de llenado. Por otra parte los ecosistemas lacustres son altamente sensibles a los cambios que se producen en sus cuencas de drenaje. Para la conservación ambiental de un lago es esencial contar con una aproximación ecológica, que tome debida cuenta de los complejos y delicados sistemas ambientales como interacciones entre suelo, agua y biosfera.

2.3.2 Dinámica de ríos

Para diferentes regímenes de caudales líquidos y sólidos, se desarrollan ríos de diferente ancho, profundidad, velocidad del flujo, tipo de trazado en planta, rugosidad del sustrato, etc. En la figura 2.3, se presenta en forma grafica, los proceso de la dinámica de los ríos.



Figura 2.3: Variables de ajuste del sistema fluvial (Morisawa, 1985), (a) variables de primer orden y (b) variables de segundo orden.
Analizando las interrelaciones entre el río y su cuenca, podemos diferenciar dos tipos de variables, (a) las variables de primer orden, como son el régimen de caudales y su carga sólida; proceden de la cuenca y son resultados de sus características hidrológicas, teniendo un carácter independiente del comportamiento del cauce, y (b) las variables de segundo orden, como son el ancho, profundidad, velocidad de las aguas, rugosidad, tipo de trazado, etc., son las que utiliza el río para adaptarse a las primeras, teniendo por ello un carácter dependiente de éstas.

Como en cualquier otro ecosistema, en un río, debemos distinguir entre la estructura del sistema y su funcionamiento. Por estructura nos referimos a las interrelaciones de sus tres componentes: (a) la comunidad biológica, (b) los recursos materiales y energéticos y (c) el hábitat físico. Por funcionamiento entendemos el conjunto de procesos biológicos, físicos y químicos controladores del flujo de materia y de energía que atraviesa el ecosistema. Lo mas adecuado para el entendimiento de los ecosistemas fluviales, es tener un enfoque funcional, es decir permitir la formación de un ecosistema cuidando las funciones y procesos que se producen dentro de ella, donde el recurso material y energético esta representado por los nutrientes orgánicos y diversos tipos de materia orgánica.

2.4 Balance del sistema

2.4.1 Balance hídrico

La carga hidrológica o descarga hídrica de los principales tributarios se obtiene de mediciones en estaciones. Las mediciones son de vital importancia para caracterizar y estudiar los cauces, por eso las mediciones deben ser continuas a fin de contar con la mayor cantidad de datos posibles, que permitan manejar escenarios futuros del comportamiento hidráulico de los cauces. Existe una estrecha relación entre gastos y cargas de nutrientes que viajan con los flujos, así por ejemplo los gastos picos coinciden mas a menudo con altas cargas de nutrientes, las que difícilmente se pueden detectar utilizando mediciones intermitentes. Cuando no es posible conocer u obtener mediciones de gastos, se puede elaborar un modelo lluviaescurrimiento o calcular los gastos mediante extrapolaciones de patrones de descarga conocidos de los principales tributarios.

La ecuación del balance hídrico completo, para un sistema se puede escribir como:

$$Q + R - O - E - Infiltración = \frac{\Delta V}{\Delta t}$$
(2.1)

Donde :

0

: Carga hidrológica total de los tributarios durante el periodo Δt .

- R : Lluvia total directa caída en el sistema durante el mismo periodo.
- O : Perdida a través de los desagües propios del sistema durante Δt .
- E : Evaporación desde la superfície del sistema durante Δt .
- $\frac{\Delta V}{\Delta t}$: Cambio de volumen del sistema.

Con las precauciones del caso, Q, R, O y $\frac{\Delta V}{\Delta t}$ pueden estimarse razonablemente bien. La evaporación es mas difícil de medir, pero puede ser estimada a partir de los otros términos. La evaporación adquiere relevancia en climas áridos y semi áridos, mientras que en regiones templadas E y R son a menudo de magnitud comparable.

La variabilidad de (R-E) y de $\frac{\Delta V}{\Delta t}$ crea una serie de problemas para efectuar generalizaciones. No obstante, bajo condiciones de estado relativamente estable, pueden calcularse ciertos términos bastante útiles, aunque teóricos, tales como:

$$q = \frac{Q}{A}$$
$$T(w) = \frac{V}{Q}$$
$$(2.2)$$
$$r(w) = T(w)^{-1}$$

Donde:

q	: Carga hidráulica por unidad de área superficial, [(m³/s)/m²].
А	: Área superficial, [m²].
V	: Volumen, [m³].
T(w)	: Tiempo de llenado teórico del sistema, [s].
r(w)	: Velocidad de llenado promedio, [m/s].

Con los valores de la ecuación (2.2), podemos conocer las características generales del sistema, en función de su balance, considerando las limitaciones que imponen el clima y la morfología del sistema.

2.4.2 Balance de masas

El establecimiento del balance de cualquier sustancia independientemente de su origen físico, químico o biológico (fósforo, nitrógeno, turbiedad mineral, etc.) esta íntimamente relacionado al balance hídrico. Los solutos se miden normalmente como concentración (g/m³); sin embargo ciertas sustancias como el nitrógeno o el carbono pueden tener también una fase gaseosa, por lo que cada vía debe de ser determinada de una manera diferente.

El paso mas importante para representar el balance de una sustancia determinada, es estimar con precisión el gasto total aportado a un cuerpo de agua, en este caso es preferible una medida directa antes que una estimación indirecta, sí se emplean medidas indirectas, se debe procurar siempre analizar correctamente las variables empleadas para garantizar resultados satisfactorios.

La carga de cualquier sustancia que se encuentran en lagos o cauces, es función de las diversas fuentes localizadas en la cuenca y de sus características hidráulicas y geométricas. Básicamente las fuentes pueden clasificarse como puntuales o no puntuales (fuentes difusas o distribuidas). Si bien esta distinción es útil desde el punto de vista conceptual, operacionalmente pueden surgir ciertos problemas. La fuentes puntuales pueden ser directas, por ejemplo a través de cañerías o indirectas, es decir descargas aguas arriba a un tributario principal o lateral, esta ultima definición también suele aplicársele a las fuentes distribuidas.

Una vez que se dispone de la información básica, puede establecerse el balance de masa para todo el sistema y se escribe así:

$$L - D \pm \Delta S_t = (\pm)S + materia diluida$$
 (2.3)

Donde:

L : carga total.

D : Derrames.

 ΔS_t : Cambios en el sistema.

S : Sedimentación.

La diferencia esencial entre esta formulación y la ecuación del balance de masa hídrico (2.1), es que si el termino S es negativo, se estima las perdidas por sedimentación y si S es positivo se estima la carga interna, adicionalmente, existe materia dentro del sistema que se encuentra en estado diluido, un ejemplo pueden ser las sales. Las ecuaciones (2.1) y (2.3) no aplican a sustancias en fase gaseosa.

2.5 Ecuaciones básicas e instantáneas para el flujo incomprensible

2.5.1 Ecuación de la divergencia de la velocidad

La divergencia de la velocidad, se puede escribir como:

$$\frac{\partial U_j}{\partial x_j} = 0 \tag{2.4}$$

Este resultado implica que para el tipo de flujos que se estudian, la divergencia del campo de velocidad no contribuye de manera significativa en los diferentes mecanismos de las ecuaciones. El resultado dado por (2.4) permite simplificar la ecuación para el movimiento, como:

$$\frac{\partial U_{i}}{\partial t} + U_{j} \frac{\partial U_{i}}{\partial x_{j}} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_{i}} + g + v \frac{\partial^{2} U_{i}}{\partial x_{i}^{2}}$$
(2.5)

2.5.2 Ecuación para el transporte de sustancias

La ecuación que rige el transporte de sustancias se escribe como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U_i \frac{\partial C}{\partial x_j} = D_f \frac{\partial^2 C}{\partial x_j^2} \pm \Gamma_C \quad (2.6)$$

Donde, C es un escalar que representa a una sustancia cualquiera, D_f representa a un coeficiente de difusión y Γ_c son términos de creación destrucción.

2.6 Flujo turbulento

Las ecuaciones descritas anteriormente son aplicables a flujos con superficie libre, sin embargo estos no pueden resolverse numéricamente en forma directa ya que las variables que aparecen en ellas son cantidades instantáneas cuyas escalas de tiempo y espacio del movimiento son muy variadas; cualquier aproximación que se considere sobre estas variables involucra una complejidad numérica que rebasa las computadoras más potentes de hoy en día. Como ejemplo puede citarse las simulaciones directas que consumen una gran cantidad de memoria y tiempos excesivos de CPU, en computadoras CRAY, sólo para resolver casos simples o fenómenos locales, como son estelas producidas por un obstáculo, formación de vórtices, etc. (Lesieur, 1993). Se considera que se requieren por lo menos 10 puntos de malla para resolver adecuadamente un remolino turbulento, para un flujo típico, 10⁵ puntos pueden requerirse para resolver solo 1 cm³ del campo de flujo.

Como los efectos aleatorios de alta frecuencia están siempre presentes en la naturaleza, y nuestro análisis se realiza para un flujo turbulento (excepto posiblemente en condiciones muy estables), se contempla una descomposición

estadística de las variables, en analogía con el comportamiento espectral de ellas en el espacio y en el tiempo.

Así, cualquier variable física F(x,t) se descompone entonces en la suma de sus valores medios $\overline{F}(x,t)$ y un residuo f(x,t) llamado fluctuación turbulenta o variación de alta frecuencia, figura (2.5), tal que:

$$F = \overline{F} + f \tag{2.7}$$

donde \overline{F} es un valor promediado en el tiempo definido como:



Figura 2.4 Fluctuaciones de una cantidad turbulenta

El promedio de F se lleva a cabo en un intervalo de tiempo t₀ que es grande con respecto al tiempo de oscilación turbulenta, pero pequeño en relación con el tiempo de variación de las propiedades de flujo debido a otros factores no turbulentos. La predicción de flujos turbulentos se basa únicamente en promedios en el tiempo de propiedades turbulentas, desde que estas varían mucho más gradualmente en el espacio y no se requiere una malla demasiado fina para la solución numérica.

$$\overline{F} = \frac{1}{t_o} \int_{t}^{t+t_o} F \, dt \tag{2.8}$$

Con esta aproximación el sistema de ecuaciones descritas anteriormente, se transforma en un sistema de ecuaciones estadísticas sobre el cual, nuevas aproximaciones serán tomadas.

2.6.1 Teoremas de Reynolds

Los postulados introducidos por Reynolds en 1891, permiten obtener las ecuaciones estadísticas. Estos conceptos se aplican sobre las variables físicas:

1. Linearidad:

$$F + G = \overline{F} + \overline{G}$$

$$\overline{aF} = a\overline{F}$$

$$\overline{a} = a$$
(2.9)

donde F y G son funciones del espacio y del tiempo, a es una constante cualquiera y la tilde sobre las funciones (-) indica promedio.

2. Conmutatividad con las operaciones de derivación y de integración:

$$\frac{\overline{\partial F}}{\partial s} = \frac{\overline{\partial F}}{\partial s}$$

$$\overline{\int F ds} = \int \overline{F} ds$$
(2.10)

donde *s* representa indiferentemente x_j o *t*.

3. Invarianza:

$$\overline{\overline{F} \cdot G} = \overline{F} \cdot \overline{G} \tag{2.11}$$

el último axioma es esencial para desarrollar la teoría, implica en particular las siguientes propiedades importantes:

$$\overline{F} = F$$

$$\overline{f} = \overline{(F - F)} = 0$$

$$\overline{F \cdot \overline{G}} = F \cdot \overline{G}$$

$$\overline{\overline{F} \cdot g} = 0$$
(2.12)

donde f y g son las fluctuaciones turbulentas de las funciones F y G respectivamente.

Debe notarse que el promedio de un producto no lineal entre fluctuaciones turbulentas $(\overline{fg}, \overline{f^2})$ no necesariamente es cero.

Tomando las ecuaciones de Boussinesq y siguiendo la técnica utilizada por Reynolds (1894), se desarrollan las ecuaciones para las propiedades medias; para hacer esto, se expresan las variables físicas como la suma de un valor medio de la variable y una fluctuación instantánea sobre la media, de acuerdo a la ecuación (2.4), obteniéndose el siguiente esquema:

$$P = \overline{P} + p$$

$$U_{i} = \overline{U}_{i} + u_{i}$$

$$C_{\alpha} = \overline{C}_{\alpha} + c_{\alpha}$$

$$(2.13)$$

2.6.2 Ecuación de continuidad

Aplicando el esquema (2.13) en la ecuación de continuidad (2.4) se obtiene como resultado:

$$\frac{\partial (\overline{U}_j + u_j)}{\partial x_j} = 0$$

una vez que esta ecuación es promediada y se le aplican los axiomas de Reynolds se obtiene:

$$\frac{\partial U_j}{\partial x_i} = 0 \tag{2.14}$$

de donde se deduce que:

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0 \tag{2.15}$$

2.6.3 Ecuación para la velocidad

Aplicando la descomposición de Reynolds a la ecuación de momentum se tiene:

$$\frac{\partial (\overline{U}_{i} + u_{i})}{\partial t} + (\overline{U}_{j} + u_{j}) \frac{\partial (\overline{U}_{i} + u_{i})}{\partial x_{j}} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial (\overline{P} + p)}{\partial x_{i}} + g + v \frac{\partial^{2} (\overline{U}_{i} + u_{i})}{\partial x_{j}^{2}}$$
(2.16)

desarrollando la ecuación anterior se obtiene:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \overline{U}_{i}}{\partial t} + \frac{\partial u_{i}}{\partial t} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \overline{U}_{j} \frac{\partial \overline{U}_{i}}{\partial x_{j}} + \overline{U}_{j} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} + u_{j} \frac{\partial \overline{U}_{i}}{\partial x_{j}} + u_{j} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} \end{pmatrix} = - \frac{1}{\rho} \begin{pmatrix} \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_{i}} + \frac{\partial p}{\partial x_{i}} \end{pmatrix} + g + v \begin{pmatrix} \frac{\partial^{2} \overline{U}_{i}}{\partial x_{j}^{2}} + \frac{\partial^{2} u_{i}}{\partial x_{j}^{2}} \end{pmatrix}$$
(2.17)

A continuación se analizan cada uno de los términos considerando los axiomas de Reynolds:

término de razón cambio:

$$\overline{\left(\frac{\partial \overline{U}_{i}}{\partial t} + \frac{\partial u_{i}}{\partial t}\right)} = \left(\frac{\overline{\partial \overline{U}_{i}}}{\partial t} + \frac{\overline{\partial u_{i}}}{\partial t}\right) = \left(\frac{\partial \overline{U}_{i}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u}_{i}}{\partial t}\right) = \frac{\partial \overline{U}_{i}}{\partial t}$$
(2.18)

término de advección:

$$\overline{\left(\overline{U}_{j}\frac{\partial\overline{U}_{i}}{\partial_{x_{j}}}+\overline{U}_{j}\frac{\partial u_{i}}{\partial_{x_{j}}}+u_{j}\frac{\partial\overline{U}_{i}}{\partial_{x_{j}}}+u_{j}\frac{\partial u_{i}}{\partial_{x_{j}}}\right)} = \left(\overline{U}_{j}\frac{\partial\overline{U}_{i}}{\partial_{x_{j}}}+\overline{U}_{j}\frac{\partial u_{i}}{\partial_{x_{j}}}+u_{j}\frac{\partial\overline{U}_{i}}{\partial_{x_{j}}}+u_{j}\frac{\partial u_{i}}{\partial_{x_{j}}}\right)$$

$$= \left(\overline{U}_{j}\frac{\partial\overline{U}_{i}}{\partial_{x_{j}}}+\overline{U}_{j}\frac{\partial\overline{u}_{i}}{\partial_{x_{j}}}+u_{j}\frac{\partial\overline{U}_{i}}{\partial_{x_{j}}}+u_{j}\frac{\partial u_{i}}{\partial_{x_{j}}}\right)$$

$$= \left(\overline{U}_{j}\frac{\partial\overline{U}_{i}}{\partial_{x_{j}}}+u_{j}\frac{\partial\overline{U}_{i}}{\partial_{x_{j}}}\right)$$

$$= \left(\overline{U}_{j}\frac{\partial\overline{U}_{i}}{\partial_{x_{j}}}+u_{j}\frac{\partial\overline{U}_{i}}{\partial_{x_{j}}}\right)$$

$$(2.19)$$

término de presión:

$$\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} \right) = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} \right)$$
(2.20)

término de difusión viscosa:

$$\overline{\sqrt{\left(\frac{\partial^2 \overline{U}_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}\right)}} = \sqrt{\left(\frac{\overline{\partial^2 \overline{U}_i}}{\partial x_j^2} + \frac{\overline{\partial^2 u_i}}{\partial x_j^2}\right)} = \sqrt{\left(\frac{\partial^2 \overline{U}_i}{\partial x_j^2} + \frac{\partial^2 \overline{u}_i}{\partial x$$

sustituyendo estos desarrollos en la ecuación original se tiene:

$$\frac{\partial \overline{U}_{i}}{\partial t} + \left(\overline{U}_{j} \frac{\partial \overline{U}_{i}}{\partial x_{j}} + \overline{u_{j}} \frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}}\right) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_{i}} + g + \nu \frac{\partial^{2} \overline{U}_{i}}{\partial x_{j}^{2}}$$
(2.22)

Haciendo, $u_i = \varphi$, implica que:

$$\frac{\partial (u_{j}\phi)}{\partial x_{j}} = u_{j}\frac{\partial \phi}{\partial x_{j}} + \phi \frac{\partial u_{j}}{\partial x_{j}}$$

una vez que promediada y aplicando los teoremas de Reynolds, nos queda:

$$\frac{\partial \left(\overline{u_{j}\phi}\right)}{\partial x_{j}} = \overline{u_{j}\frac{\partial \phi}{\partial x_{j}}}$$
(2.23)

Donde $\overline{u_j \varphi}$ es cualquier fluctuación turbulenta. Esta última ecuación es utilizada en simplificaciones posteriores.

Reemplazando la ecuación (2.23) en la ecuación (2.22) se tiene:

$$\frac{\partial \overline{U}_{i}}{\partial t} + \overline{U}_{j} \frac{\partial \overline{U}_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial (\overline{u_{j}\phi})}{\partial x_{j}} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_{i}} + g + v \frac{\partial^{2} \overline{U}_{i}}{\partial x_{j}^{2}}$$
(2.24)

Esta es la ecuación utilizada para el movimiento medio de una fluido incomprensible, llamada también ecuación de Navier Stokes Reynolds. Se observa que a partir del término de advección se ha introducido un esfuerzo efectivo turbulento, llamado esfuerzo de Reynolds, el cual es de magnitud $\overline{u_j\phi}$. Cabe mencionar que es justamente la no linealidad del término advectivo una de las dificultades más importantes en la Mecánica de Fluidos, esto implica que las soluciones de las ecuaciones de Navier-Stokes generen desarrollos teóricos y numéricos complicados.

2.7 El Modelo κ-ε

De manera clásica las tensiones de Reynolds son esquematizadas por analogía a la expresión de esfuerzos moleculares en un flujo laminar (Boussinesq, 1877):

$$-\overline{u_{i}u_{j}} = v_{T} \left(\frac{\partial \overline{U}_{i}}{\partial x_{j}} - \frac{\partial \overline{U}_{j}}{\partial x_{i}} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \kappa$$
(2.25)

en la que v_T es el coeficiente de viscosidad turbulenta que, a diferencia de los modelos de orden cero, ya no es una constante, sino que evoluciona en el espacio y en el tiempo.

El modelo de dos ecuaciones κ - ε que se presenta surge de la base de representar la viscosidad turbulenta equivalente ν_T mediante la siguiente expresión:

$$\nu_{\tau} = C_{\mu} \frac{\kappa^2}{\varepsilon}$$
 (2.26)

donde se considera una ecuación de evolución de la energía cinética de la turbulencia (κ) y otra de su disipación (ϵ). El coeficiente $C\mu$ se determina experimentalmente a partir de la hipótesis de equilibrio (producción=disipación), o puede ser calculado a partir de relaciones empíricas destinadas a adaptar el valor de esta constante a cada problema en particular; para los flujos cortantes es común encontrar el valor C_{μ} =0.09, sin embargo el valor de este coeficiente no es universal (Rodi, W 1986).

2.7.1 Ecuación de la energía cinética de la turbulencia

A partir de la ecuación media de la velocidad puede llegar a obtenerse una ecuación exacta para los esfuerzos de Reynolds y a partir de esta puede llegar a obtenerse una expresión exacta de la ecuación de evolución de la energía cinética de la turbulencia $\kappa = \frac{1}{2}\overline{u_i u_i}$, (Ramírez, 2003) Un modelo considerado apropiado para esta ecuación es definido por:

$$\frac{\partial \kappa}{\partial t} + \overline{U}_{j} \frac{\partial \kappa}{\partial x_{j}} = P + G + \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{v_{r}}{\sigma_{\kappa}} \frac{\partial \kappa}{\partial x_{j}} \right)$$
(2.27)

donde los términos P y G se definen de la siguiente manera:

$$\mathbf{P} = \mathbf{v}_{\mathbf{r}} \left(\frac{\partial \overline{\mathbf{U}}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}} \frac{\partial \overline{\mathbf{U}}_{j}}{\partial \mathbf{x}_{i}} \right) \frac{\partial \overline{\mathbf{U}}_{i}}{\partial \mathbf{x}_{j}}$$
(2.28)

$$G = \beta g_{i} \frac{v_{\tau}}{\sigma_{\tau}} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_{i}}$$
(2.29)

y σ_T es una constante de modelación, conocida también como el número de Prandtl de la energía cinética. Por su parte ε , representa la disipación que es modelada conforme a la ecuación que se indica a continuación

2.7.2 Ecuación para la disipación de la energía cinética

La forma exacta de esta ecuación puede verse en Ramírez (2003); la ecuación modelada que complementa a la ecuación (2.27) es la siguiente:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + U_{j} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_{j}} = C_{\varepsilon_{1}} \frac{\varepsilon}{\kappa} \left(p + C_{\varepsilon_{3}} G \right) - C_{\varepsilon_{3}} \frac{\varepsilon^{2}}{\kappa} + \frac{\partial}{\partial x_{j}} \left(\frac{v_{\tau}}{\sigma_{\varepsilon}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_{j}} \right)$$
(2.30)

donde se introducen cuatro constantes de modelación, las cuales son determinadas experimentalmente y cuyos valores se presentan en la tabla 2.1. Las ecuaciones (2.27) y (2.30), conforman el modelo llamado estándar, introducido por Rodi en 1986.

2.7.3 Constantes del modelo κ-ε

Una recopilación de las constantes , sus autores y los flujos en donde son aplicables, es dada en la siguiente tabla.

$C_{\mu} = 0.09$	Recomendado por Chen y Rodi (1980) para diversos
$\sigma_{\kappa} = 1.0$	recomendado por Launder y Spalding (1972)
$\sigma_{\varepsilon} = 1.3$	recomendado por Launder y Spalding (1974)
$C_{\epsilon_1} = 1.44$	recomendado por Chen y Rodi (1980)
$C_{\epsilon_{2}} = 1.92$	recomendado por Shiestel (1982)
$C_{\varepsilon_3} = 0 - 0.2$	cuando G<0
$C_{\epsilon_{j}} = 1.0$	cuando G>0
$Pr_{\tau} = 0.5$	recomendado por Chen y Rodi (1980)

Tabla 2.3: Constantes del modelo κ-ε estándar

Capitulo 3 Mecánica del Transporte de las Partículas

3.1 Introducción

Este capitulo trata los aspectos que rigen el movimiento de las partículas, el movimiento se da mediante el empleo de una ecuación del tipo lagrangeano; los componentes de la ecuación de movimiento esta compuesta de dos partes, un advectivo dispersivo, ambos componente Y otro componentes son proporcionados por el modelo hidrodinámico QUETZAL/3D (Ramírez, 1993), este modelo fue desarrollado bajo un enfoque euleriano y adaptado a las condiciones de estudio que se tratan en este trabajo; el modelo QUETZAL/3D, es un modelo capaz de representar detalles de estructuras turbulentas, tales como los campos de viscosidad turbulenta y las correlaciones dobles, que son términos empleados para el movimiento de las partículas; los aspectos teóricos del modelo hidrodinámico fueron dados en el capitulo dos y en el anexo 1 se explica el funcionamiento del modelo.

El modelo numérico computacional desarrollado para el movimiento de las partículas, esta dado bajo un enfoque lagrangeano; las partículas son sembradas siguiendo una ley exponencial de concentraciones y el desarrollo del estudio se da sobre un dominio tridimensional. Para el movimiento de partículas se considera el peso especifico y la velocidad de caída de las mismas, el análisis toma especial interés de las partículas en suspensión. El movimiento de las partículas se mueven independientemente del fluido, esto nos lleva a establecer condiciones de fronteras diferentes; las partículas sólidas se mueven primero y luego se le verifica si están dentro del dominio, las fronteras de las partículas esta compuesta por: (a) frontera rígida lateral, (b) superficie libre y (c) fondo del canal. La frontera de fondo determina si la partícula es depositada o resuspendida, esto se hace verificando los esfuerzos cortantes actuantes y el esfuerzo cortante critico para el inicio del movimiento. Las fronteras para las paredes laterales y la superficie libre, se considera como un espejo, es decir si una partícula llega a la frontera, ésta rebota a la misma velocidad pero en dirección opuesta, despreciando cualquier tipo de perdida de energía.

El dominio de estudio corresponde a un estanque de 18 m de largo, 9.5 m de ancho y 1.88 m de alto y se estudian dos casos. El primer ensayo representa un ingreso frontal a un estanque, con un chorro en dirección del flujo principal, el ingreso frontal tiene una sección transversal de 2 m de ancho por 1 m de alto; la corriente que ingresa por el frente es unidireccional y considera los efectos de la capa limite provocados por las paredes y el fondo del canal emisor, la velocidad máxima que ingresa por el frente es de 1 m/s. El segundo ensayo, representa el ingreso de una descarga lateral hacia una corriente principal, como condición inicial en la corriente principal se coloca un perfil de flujo unidimensional en el sentido del eje principal de la corriente, considerando también su capa limite, la sección transversal de la corriente es de: 9.5 m de ancho por 1.88 m de alto; el ingreso lateral es perpendicular a la corriente principal, y en ella también se considera la capa limite que se genera por las paredes y el fondo del canal, la sección transversal de la descarga lateral es de 5 m de ancho por 1 m de alto, la velocidad máxima que produce el chorro en la descarga lateral es de 1 m/s.

modelo desarrollado, considera adicionalmente al modelo del El movimiento de partículas, un modulo que es capaz de transportar sustancias, tales como la DBO, el OD, los Norg y los Porg, este modulo ha sido desarrollado bajo un esquema euleriano lagrangeano, para ello se empleo la ecuación de transporte (2.6). Los sustancias arriba mencionadas son parámetros importantes de la calidad de las aguas, aunque en este trabajo no se precisa una aplicación practica, el modelo esta preparado para tal, la inconveniencia de su uso en este estudio, se da por que las sustancias como la DBO, el OD, los Norg y los Porg, reaccionan en grandes distancias, para distancias cortas como es el caso que se trata aquí, no presentan nada interesante, esto fue corroborado con la literatura, con el análisis de simulaciones de modelos de transporte de sustancias y con mediciones en campo; los criterios empleados para la elaboración del modelo se detallan en el anexo 3 y su aplicación quedará consolidada en trabajos futuros tal como se manifiesta en las perspectivas de este estudio.

3.2 Modelos de calidad del agua

3.2.1 Modelos eulerianos

Son modelos que hacen una aproximación matemática de las ecuaciones eulerianas. Estos modelos son muy empleados para la generación de campos hidrodinámicos de flujos a superficie libre así como para el pronostico meteorológico, de igual forma son utilizadas para la dispersión de contaminantes(conservación de la masa del contaminante).

En los modelos eurelianos la dispersión de los contaminantes se describe empleando las ecuaciones básicas de la hidrodinámica teniendo en cuenta:

- El balance del momentum
- El balance de calor
- El balance de humedad
- Las leyes de los gases
- Balance de masa del aire por debajo de la altura de mezcla
- El balance de los contaminantes estudiados

La ecuación de dispersión de contaminantes (2.6), se puede representar como una combinación de tres operadores matemáticos que son:

El operador dispersión	: ∇•K•∇C _J	
El operador advección	: U•∇C _J	(3.1)
El operador creación destrucción	: R _i (C)	

Estas tres funciones, representan procesos distintos y al combinarlas tienen formas muy diferentes, esto hace que la solución numérica más adecuada para la forma de una de las funciones no lo sea rigurosamente para las otras. Especialmente las ecuaciones cinéticas suelen ser altamente no lineales, y además las velocidades a especificar para cada especie pueden ordenes de magnitud, provocando diferenciarse en varias un comportamiento rígido del sistema de ecuaciones diferenciales resultante; este tipo de sistemas de ecuaciones rígidas ha sido resuelto numéricamente mediante métodos específicos (Hindmarsh, 1980). En particular, el operador de advección presenta dificultades de solución numérica, puesto que el transporte medio del contaminante está gobernado por campos de velocidades que generalmente no presentan gradientes continuos, tendiendo a introducir no linealidades e inestabilidades (numéricas).

La solución es comúnmente propuesta por un esquema en diferencias finitas, sobre una malla discreta que cubre todo el entorno de interés, se considera que las derivadas parciales de las funciones (aplicables en la ecuación de dispersión) se pueden aproximar a cocientes de diferencias; la ecuación del transporte de contaminantes (2.6), se puede escribir empleando un esquema en diferencias centradas y en forma explicita para el tiempo y la dirección x, de la forma:

$$\frac{t^{n+1} - t^{n}}{\Delta t} + U_{i,j,k}^{n} \left(\frac{C_{i,j,k}^{n} - C_{i-1,j,k}^{n}}{\Delta x_{i}} \right) = k_{i,j,k} \left(\frac{C_{i+1,j,k}^{n} - 2C_{i,j,k}^{n} + C_{i-1,j,k}^{n}}{(\Delta x_{i})^{2}} \right) + \Gamma c_{i,j,k}^{n}$$
(3.2)

siendo Δx_i la distancia entre dos puntos vecinos de la malla en la dirección del eje x, y los índices $_{i,j}$ y $_k$ se refieren al valor de la variable ($C_{i,j,k}$) en el punto de la malla en el que se desee calcular la derivada parcial.

No es del interés de este trabajo, mencionar aspectos concernientes a la aproximación, convergencia y estabilidad de los esquemas numéricos, con que se resuelven los términos de la ecuación (3.2), sin embargo los esquemas que se utilizan ya han sido probados satisfactoriamente por Herrera (1999) y Millán (2001). En la figura 3.1, se presenta el esquema general para las estructuras eulerianas, para partículas que se encuentran sobre un dominio tridimensional.



Figura 3.1: Esquema euleriano para el movimiento de partículas, sobre un dominio tridimensional.

3.2.2 Modelos Lagrangeanos

Sirven para representar modelos con descargas en forma de pulsos o segmentadas y emisiones puntuales o de partículas, es decir cuando se trata de emisiones instantáneas no continuas. En este trabajo se simula la dinámica del movimiento de partículas en suspensión, que se transportan sobre una corriente; estas partículas poseen las siguientes características:

- Volumen
- Peso específico
- Son indeformables
- Son elementos pasivos, no reaccionan químicamente, ni biológicamente entre ellas, ni con el medio fluido que las transporta.
- Choques inelásticos entre partículas.
- No adhesión de partículas

Los modelos de partículas sirven para conocer la cantidad de contaminantes que viajan suspendidos en un medio fluido, estos contaminantes son incapaces de moverse por si solos en una corriente natural, casi siempre y salvo muy pocas excepciones, viajan adheridas a las partículas, esto nos permite considerar que cada partícula contiene una cierta cantidad de contaminante. El numero de partículas en un volumen de control, seria la concentración de sólidos en suspensión, moviéndose junto con ellas, ya sea uno o mas tipos de contaminantes. Es importante considerar un número suficiente de partículas, para tener una representación estadística próxima a la realidad física de las corrientes naturales, teniendo en cuenta que un gran numero de partículas implica un mayor tiempo de cálculo del modelo.

Para el movimiento de las partículas que representen a un contaminante, esta promovida por el empleo de un componente advectivo y un componente dispersivo (turbulento), como se da en la ecuación (3.6); el componente dispersivo emplea un campo de viscosidad turbulenta afectado a la vez por una función aleatoria del tipo gaussiana. Esta representación numérica de la dispersión es muy natural, en el sentido de que trata de representar las fluctuaciones turbulentas como movimientos aleatorios de las partículas.

La distribución gaussiana permite una serie de simplificaciones matemáticas, que no podrían ser posibles si se emplearan otros tipos de distribuciones. La utilización de otras distribuciones mas complejas que la distribución gaussiana no garantiza una mejor aproximación, debido a que no existe una base teórica o empírica, para la selección a *priori* de la mejor función de distribución, por eso la utilización de la distribución gaussiana es mas conveniente. En la figura 3.2, se representa gráficamente la forma que poseen los sistemas lagrangeanos, para un dominio tridimensional.



Figura 3.2: Esquema Lagrangeano para el movimiento de partículas, sobre un dominio tridimensional.

3.3 Modelo Lagrangeano para el transporte de sólidos en suspensión 3.3.1 Introducción

Las partículas sólidas que se transportan en suspensión dentro de corrientes de cauces naturales, y en general en canales a flujo abierto, provienen del arrastre del fondo, aportaciones de las cuencas, vertedores urbanos-industriales, etc.

Los sedimentos en suspensión, son en términos de masa total, la mayor fuente de contaminación del agua, la turbidez que provocan en el agua no permite la vida de algunos organismos, alterando la biota acuática y quizás lo mas importante albergando microorganismos patógenos; los sedimentos que se acumulan en el fondo, agravan el problema del OD por sedimentación y forman depósitos de lodo que demandan mas OD. Otro problema de la sedimentación es el hecho que provoca la destrucción de los sustratos alimenticios y lugares de desove de los peces, rellenan lagos o pantanos y obstruyen canales, ríos y puertos.

Es importante definir que es el arrastre de fondo el que representa la mayor parte del arrastre sólido total, importante para considerar sedimentación; las partículas de limo y arcilla (dimensiones inferiores a 62 μ m) no son importante para los efectos de sedimentación, pero si para los procesos ecosistémicos que se forman de la interrelación entre ellas, debido a que las partículas pueden ser: nutrientes, alimentos de microorganismos o contaminantes, que afectan al ecosístema y al entorno natural. La mecánica del transporte de sedimentos es un fenómeno muy complejo, que involucra muchas variables relacionadas a las características físicas de las partículas y los fluidos. Para simplificar el mecanismo de transporte, se recurre a una serie de formulaciones del tipo estocástico determinístico provenientes de procesamiento de datos medidos, para esto se requiere conocer las propiedades más importantes de los sólidos y de los fluidos, desde un punto de vista dinámico (en el tiempo y en el espacio).

El objetivo de esta tesis es analizar el comportamiento de las partículas provenientes de las cargas de lavado de las cuencas y otras fuentes externas a las que se producen dentro de los cauces naturales y su interacción con una masa de agua con otras propiedades físicas diferentes. Los resultados obtenidos son de carácter cualitativo, lo que nos permitirá analizar los aspectos generales de la calidad del agua conociendo el movimiento de las partículas, esto por que rara vez nutrientes y contaminantes se mueven solas en un medio fluido, la mayoría de los nutrientes y contaminantes viajan adheridos a los sedimentos en suspensión.

3.3.2 Las Ecuaciones del Transporte Sólido

Las ecuaciones empleadas provienen de estudios empíricos de la rama de la hidráulica fluvial (estudio de los procesos de erosión sedimentación). Es importante mencionar que existen muchas metodologías para tratar el problema, cada metodología proviene de un estudio particular. En nuestro caso las ecuaciones del transporte fluvial, nos sirven para definir las condiciones iniciales del sembrado de partículas (perfil de concentraciones) y las condiciones de frontera (efecto de las paredes y la subcapa laminar).

3.3.3 Propiedades de los sedimentos

Los sedimentos encontrados en un cauce natural, pueden ser tan grandes como un boleo o tan pequeño que representen a un material coloidal del orden de micras, en cuanto a su forma pueden ser redondeados o angulares, por el material que las compone podemos tener las que provienen del cuarzo, caolinita, hilita, monmorilonita y clorita.

Una clasificación genética esta dada por:

- Sedimentos litogenos, que provienen de detritus de rocas existentes
- Sedimentos biogenéticos, que son resultantes de organismos principalmente carbonatados, pudiendo ser ópalos y fosfatos de calcio.
- Sedimentos hidrogenados.

Para conocer mejor las propiedades de los sedimentos que son de interés en este estudio, se describen a continuación a algunos de ellos.

Densidad

Asumiremos como base la densidad del cuarzo, por ser este el material más común encontrado en la naturaleza fluvial, que es de aproximadamente 2650 kg/m³; otros material comunes son compuestos carbonatados cuya densidad va de 2500 a 2650 kg/m³.

Forma

Difícilmente podremos encontrar en la naturaleza partículas sólidas de formas esféricas, aunque puedan tener bordes muy redondeados, la mayoría posee forma angular, producto del desgaste y la abrasión, por estar sometido a esfuerzos y colisiones en su transporte. La forma del grano se puede obtener de forma aproximada cuando castigamos al volumen de una partícula esférica por un coeficiente de forma, que siempre es menor a la unidad.

Dimensiones

En esta parte nos referimos al diámetro aproximado que poseen las partículas; en la práctica, los diámetros se obtienen por ensayos granulométricos cuando las partículas van de arenas a gravas o materiales de mayor diámetro como lo pueden ser los cantos rodados; cuando las partículas son muy finas, el diámetro se puede obtener mediante ensayos hidrométricos y otros como lo son los contadores Coulter y técnicas de difracción láser.

Los diámetros característicos, comúnmente empleados son:

Diámetro de cribado, que es el diámetro de la esfera de una partícula que atraviesa justo la longitud de un lado de un cuadrado de la criba.

Diámetro nominal, es el diámetro de una esfera que tiene el mismo volumen que la partícula.

Diámetro estándar de caída, es el diámetro de una esfera que tiene una gravedad específica de 2.65 y tiene la misma velocidad de caída que la partícula en equilibrio, en agua destilada a 24° C.

La frecuencia de distribución esta caracterizada por:

Diámetro mediano, representado por el d_{50} , que corresponde al diámetro de la partícula que pasa el 50% de la criba, de toda una muestra de granos.

Diámetro medio, denotada por la ecuación: $d_{m} = \sum (p_{i}d_{i})/100$ (3.3)

donde:

pi=porcentaje en peso de cada diámetro del grano de diámetro di.

En la tabla 3.1, se presenta la clasificación general de materiales granulares elaborada por la *American Geophysical Union*; la clasificación esta dada en función del diámetro del grano; esta clasificación es una referencia a tomar en cuenta ya que existen muchas otras clasificaciones, que no necesariamente este en función del diámetro. Para fines de este estudio se requiere que el material este clasificado de acuerdo a su diámetro, por ser el diámetro una propiedad física importante, que asociada a su peso especifico y a su velocidad de caída, nos dan una idea de cómo se comportan las partículas en suspensión dentro de un medio fluido.

Nombre clasificación	Diámetro en mm	Diámetro en µm
Canto rodado	> 256	
Guijarros	256 - 64	
Gravas	64 - 2	_
Arena muy gruesa	2.0 - 1.0	2000 - 1000
Arena gruesa	1.0 – 0.5	1000 – 500
Arena mediana	0.5 – 0.25	500 – 250
Arena fina	0.25 – 0.125	250 - 125
Arena muy fina	0.125 - 0.062	125 – 62
Limos gruesos	0.062 - 0.031	62 - 31
Limos medianos	0.031 - 0.016	31 – 16
Limos finos	0.016 - 0.008	16 – 8
Limos muy finos	0.008 - 0.004	8 - 4
Arcilla gruesa	0.004 - 0.002	4 - 2
Arcilla media	0.002 - 0.001	2 - 1
Arcilla fina	0.001 - 0.005	1 – 0.5
Arcilla muy fina	0.0005 - 0.00024	0.5 – 0.24
Coloide	< 0.00024	< 0.24

Tabla 3.1: Clasificación de granos, según la American Geophysical Union.

Velocidad de caída de la partícula

Los sedimentos naturales son partículas no esféricas. El efecto de las formas influyen bastante en partículas relativamente grandes (> 300 μ m), los experimentos muestran que existen diferencias del orden del 30% en la velocidad de caída, cuando se comparan las ecuaciones para cada diámetro,

que se dan en la ecuación 3.4. Las velocidades de caída pueden ser determinadas por las siguientes fórmulas, dadas por Van Rijn (1992).

$$w_{s} = \frac{(s-1)gd^{2}}{18v} \qquad 1 < d \le 100 \ \mu m$$

$$w_{s} = \frac{10v}{d} \left[\left(1 + 0.01 \frac{(s-1)gd^{3}}{v^{2}} \right)^{0.5} - 1 \right] \qquad 100 < d < 1000 \ \mu m \qquad (3.4)$$

$$w_{s} = 1.1[(s-1)gd]^{0.5} \qquad d \ge 1000 \ \mu m$$

Donde:

- d : Diámetro de la criba, [m].
- s : Gravedad específica, s=2.65
- v : Coeficiente de la viscosidad cinemática, $[s^2/m]$.
- g : aceleración de la gravedad, $[m/s^2]$.

Efecto de la concentración de los sedimentos

La velocidad de caída de una sola partícula es alterada por la presencia de otras partículas, el efecto de las otras partículas hace que la velocidad de caída sea mayor, en cuanto mayor sea la concentración. Para corregir ese efecto Richardson y Zaki (1954), propusieron la siguiente formulación:

$$\mathbf{w}_{s,m} = (1-c)^{\gamma} \mathbf{w}_{s} \tag{3.5}$$

Donde:

 $w_{s,m}$: Velocidad de caída de la partícula en una suspensión, [m/s].

w_s : Velocidad de caída de la partícula en un liquido limpio, [m/s].

c : Concentración volumétrica de sedimentos, [gr/m³].

γ : Coeficiente empírico adimensional (4 a 5, partículas con diámetros de 50 μm -500μm).

3.3.4 Modelo del movimiento de las partículas

Los mecanismos de dispersión y resuspensión tienen un carácter aleatorio, cuyo comportamiento puede ser representado por el empleo de modelos estocásticos. Los modelos estocásticos describen el movimiento de las partículas sólidas por medio de una función de probabilidad. El proceso físico corresponde al seguimiento de muchas partículas, empelando un campo hidrodinámico así como también un campo de viscosidades turbulentas que representarían la intensidad de la turbulencia sobre todo el dominio de la simulación, permitiéndonos así obtener la ubicación o existencia de una partícula en un cierto punto. Un modelo estocástico y discretizado en tres dimensiones para el movimiento de un sólido suspendido, esta dado por componentes de velocidades estocásticas y determinísticas. Para un único paso de tiempo Δt de *n* a *n*+1 esta dada por:

$$\begin{aligned} x_{i}^{n+1} &= x_{i}^{n} + U_{i,j,k} \times \Delta t \pm (2ran(iseed) - 0.5)\sqrt{2 \times v_{T(i,j,k)} \times \Delta t} \\ y_{j}^{n+1} &= y_{j}^{n} + V_{i,j,k} \times \Delta t \pm (2ran(iseed) - 0.5)\sqrt{2 \times v_{T(i,j,k)} \times \Delta t} \\ z_{k}^{n+1} &= z_{k}^{n} + W_{i,j,k} \times \Delta t \pm (2ran(iseed) - 0.5)\sqrt{2 \times v_{T(i,j,k)} \times \Delta t} - ws \end{aligned}$$
(3.6)

Donde:

x_i^n, y_j^n, z_k^n	:	Posición	de	una	partícula	sólida	en	las	coordenadas
	(x	;, <i>y,z</i>), para	el i	nstan	ite de tiem	ро п.			

- $x_i^{n+1}, y_j^{n+1}, z_k^{n+1}$: Posición de una partícula sólida en las coordenadas (x, y, z), para el instante de tiempo n+1.
- $U_{i,j,k}$, $V_{i,j,k}$, $W_{i,j,k}$: Velocidades medias en las direcciones x, y y z que actúan sobre una partícula fluida.
- v_{T(i,j,k)} : Coeficiente de viscosidad turbulenta que actúa sobre una partícula sólida en el tiempo n.
- Δt : Paso de tiempo lagrangeano.
- ws : Velocidad de caída de las partículas.

El seguimiento de las partículas es simulado empleando la ecuación lagrangeana (3.6), por lo tanto cada partícula esta sujeta a un desplazamiento espacial de magnitud $\pm (2ran(iseed) - 0.5) \sqrt{2 \times v_{T(i,i,k)} \times \Delta t}$, en cualquiera de las direcciones del dominio en estudio, el signo es positivo o negativo dependiendo del sentido que en esa ubicación y en ese instante presente el campo de velocidades que actúa sobre una partícula, para que de esta forma el movimiento tenga un sentido en función del movimiento principal, que esta dado por los campos de velocidades. El término $v_{T(i,i,k)}$ se encuentra sobre todo el dominio, representado por un campo de escalares positivos, que posee la información de las intensidades turbulentas. Lo anteriormente descrito permite que las partículas se muevan independientemente en cualquiera de las direcciones x, y ó z, simulando un movimiento provocado por los campos de velocidades y la dispersión turbulenta (movimiento Browniano de las partículas). La edad de cada partícula es igual al tiempo transcurrido desde que la partícula fue liberada

y es calculada junto con las coordenadas de la partícula al final de cada paso de tiempo lagrangeano Δt.

El movimiento de las partículas, que subsecuentemente están experimentando desplazamientos, se divide en una parte determinística (advectivo) y una parte estocástica (dispersivo o aleatorio). El modelo de transporte desarrollado en este trabajo incluye algunos subprocesos del movimiento, como son el inicio del movimiento (resuspensión) y la detención del movimiento (sedimentación).

La simulación se divide en dos partes: (a) solución de las ecuaciones hidrodinámicas para obtener los campos tridimensionales de velocidades y los parámetros turbulentos ($\kappa - \epsilon$, ν_T , \overline{uu} , \overline{vv} , \overline{ww} , \overline{uv} , \overline{uw} y \overline{vw}) y (b) simulación del transporte de las partículas para campos de flujos estacionarios (proporcionados por el modelo hidrodinámico), sobre pasos de tiempo lagrangeanos Δt .

De acuerdo al procedimiento de Reynolds, los esfuerzos cortantes en un flujo turbulento, a lo largo de su profundidad *z*, puede escribirse como:

$$\tau_{i} = \rho v \frac{dU}{dZ} - \rho \overline{u_{i} w}$$
(3.7)

Donde:

i = 1,2

 τ_i Esfuerzo cortante en el fondo, $\tau_1 = \tau_x \ y \ \tau_2 = \tau_y$, en la dirección x y y respectivamente.

P Densidad del fluido.

Coeficiente de viscosidad cinemática.

U Velocidad media del fluido en x, a la profundidad z.

 $\overline{u_j w}$ Correlaciones dobles en el fondo, $\overline{u_1 w} = \overline{u w} y \overline{u_2 w} = \overline{v w}$

En la ecuación (3.7), el termino $\rho v \frac{dU}{dz}$ es el esfuerzo cortante viscoso (τ_v) y $-\rho \overline{uw}$ es el esfuerzo cortante turbulento (τ_T), ambos producidos en el nivel z.



Figura 3.3: Esfuerzo cortante actuante sobre las partículas que se mueven en flujos a superficie libre.

Asumiendo que el esfuerzo cortante en el fondo, dado por la ecuación (3.7) es el mismo que actúa sobre las partículas, la condición de frontera sobre la subcapa laminar, se determina comparando el esfuerzo cortante actuante con el esfuerzo cortante critico para el movimiento de la partícula; en la ecuación (3.8) y (3.9) se presentan las ecuaciones de esfuerzos actuantes sobre las partículas que llegan a la frontera del fondo (subcapa laminar), para la dirección x y y respectivamente.

$$\tau_{x} = \rho v \frac{dU}{dZ} - \rho \overline{u w} \qquad (3.8)$$

$$\tau_{y} = \rho v \frac{dU}{dZ} - \rho \overline{v w} \qquad (3.9)$$

El esfuerzo cortante critico que actúa sobre las partículas, según Shields (1936), se escribe:

 $\tau_{\rm critico} = 0.03(\rho_{\rm S} - \rho)gd_{50}$ (3.10)

En la ecuación (3.10), ρ_s es la densidad del sólido, ρ es la densidad del agua, g es la aceleración de la gravedad y d₅₀ es el diámetro de la partícula para el cual pasa el 50% del material.

La función de probabilidad para la deposición de las partículas se puede escribir así:

$$\mathbf{p}_{dep} = \begin{cases} 0 \\ \left(1 - \frac{\tau_{x,y}}{\tau_{critico}}\right) \end{cases}, \quad \tau_{x,y} \ge \tau_{critico} \\ \tau_{x,y} < \tau_{critico} \end{cases}$$
(3.11)

Y la función de probabilidad para la resuspensión de las partículas se escribe:

$$p_{\text{resusp}} = \begin{cases} 0 \\ 1 - \frac{\tau_{\text{critico}}}{\tau_{x,y}} \end{cases}, \quad \tau_{x,y} \le \tau_{\text{critico}} \\ \tau_{x,y} > \tau_{\text{critico}} \end{cases}$$
(3.12)

El modelo de transporte elaborado en el presente estudio, es acoplado al modelo hidrodinámico QUETZAL/3D y también puede emplear campos hidrodinámicos obtenidos por cualquier otro modelo tridimensional.

3.3.5 El modelo del flujo y el uso del campo de velocidades

El campo tridimensional de velocidades medias (U, V, W) y los campos turbulentos (κ - ϵ , ν_T , \overline{uu} , \overline{vv} , \overline{ww} , \overline{uv} , \overline{uw} y \overline{vw}) del flujo a superficie libre, esta gobernado por la ecuación de las velocidades y de continuidad, que se describieron con detalle en el capitulo dos.

En el modelo lagrangeano para el transporte de sólidos en suspensión, el calculo de la hidrodinámica del flujo y el calculo del transporte no están integrados en un solo modelo, sino que se desarrolla por separado, esto por conveniencia computacional. El calculo hidrodinámico corresponde a un campo estable y convergido en el tiempo, lo que indica que los campos de velocidades y sus parámetros turbulentos, se pueden asumir como constantes, pero con una variación espacial importante, de este modo la simulación del transporte de partículas se realiza para tiempos mayores a los obtenidos en la simulación hidrodinámica. De la explicación anterior se entiende que para el transporte de las partículas se usa repetidamente un mismo campo hidrodinámico, para todos los intervalos de tiempo Δt , tantas veces se requiera, hasta completar el periodo de simulación. Las velocidades que mueven a las partículas, se obtienen de interpolar linealmente, las velocidades que se encuentran sobre una malla tridimensional alrededor de la partícula, tal como se ve en la figura 3.4.



Figura 3.4: Traslación de velocidades U, V y W, de una malla hidrodinámica, a la posición de la partícula, mediante interpolación lineal.

El hecho de separar la simulación hidrodinámica de la simulación del movimiento de partículas, nos permite desarrollar grandes números de simulaciones de transporte, de este modo podemos simular movimientos de partículas con: diferentes ubicaciones y tipos de fuentes, varias duraciones de simulación, distintos parámetros de transporte y distintas propiedades físicas de las partículas (peso especifico y diámetro), todo esto sobre la base de una simulación hidrodinámica del flujo.



Tabla 3.2: Parámetros a emplear en el modelo de transporte de partículas.

En la Tabla 3.2, se presentó el esquema que nos indica la forma de cómo se va a modelar el movimiento de las partículas; del lado izquierdo se encuentran los procesos naturales que se desean simular y del lado derecho los procesos computacionales en que se basa nuestro modelo, que seria la analogía de los procesos naturales.

3.3.6 Condiciones de Frontera

Las condiciones de frontera están dadas para las paredes del dominio en estudio, la superficie libre del agua y la subcapa laminar. Las condiciones de frontera están divididas en dos grupos, el primero corresponde a la parte hidrodinámica y la segunda al movimiento de las partículas.

a. Condición de frontera hidrodinámica

Las condiciones de frontera para las velocidades U, V y W, se encuentran sujetas a la ley logarítmica de las paredes. En el fondo se generó un mallado mas fino, para captar con mejor detalle los campos de velocidades medias y turbulentas en la zona de la subcapa laminar, esto nos sirve para definir la función de probabilidad para la resuspensión o sedimentación de las partículas.

La presencia de una superficie libre en flujo de canales abiertos se toma como si fuera una zona de flujo máximo, como se ve en la figura (3.5), esto provoca un abatimiento del movimiento vertical turbulento, debido a la tensión superficial y restricciones geométricas, reduciéndose así la intensidad de las fluctuaciones de velocidad turbulenta en la vertical y las escalas de longitud de las características turbulentas en la vecindad de la superficie. El abatimiento en la superficie de las fluctuaciones verticales y la reducción de las longitudes de escalas turbulentas, inhiben el transporte de cantidad de movimiento en la vertical, por el movimiento turbulento, así la viscosidad turbulenta se reduce cerca a la superficie libre.



Figura 3.5: Perfil de velocidades en el eje x, para flujo máximo.

En la figura (3.6), se explica la evolución del perfil de velocidades para un flujo turbulento; encima de la capa interna, el flujo es turbulento, y entre la subcapa laminar y la capa logarítmica turbulenta, existe una capa de transición; también en la figura (3.6) se puede apreciar el perfile de concentraciones de sedimentos en suspensión y el efecto de la velocidad, sobre la carga de transporte.



Figura 3.6: Estructuras laminar y turbulenta para un perfil de velocidades y su influencia sobre el transporte de sedimentos.

El perfil de velocidades y las estructuras turbulentas, influyen en el transporte de partículas en suspensión, existiendo una marcada relación entre la forma del perfil de velocidades y la forma del perfil de concentraciones, tal como se ve en la figura (3.6). En este trabajo se relaciona la evolución de los campos de velocidades y las concentraciones de partículas; las concentraciones están representadas por un cierto numero de partículas, que se van sembrando por pulsos, en el capitulo cuatro se detalla la forma del sembrado de las partículas y el comportamiento de sus movimiento.

b. Condición de frontera para el movimiento de partículas

Los efectos de la frontera en el fondo del canal, implican que la concentración debe de incrementarse por que las partículas tienden a afirmarse en el fondo. Los vórtices turbulentos provocan que los sedimentos sean resuspendidos desde la capa de altas concentraciones hasta una capa de menor concentración, al que también contribuye nuestro campo de velocidades en la vertical.

La frontera para la sedimentación se ubica sobre la subcapa laminar, en esta zona se decide probabilísticamente, cuales son las partículas que se resuspenden y cuales son las que se sedimentan; la función de probabilidad hace que el 90% de las partículas que llegan a la subcapa laminar se resuspendan, esto se cumple por igual para las partículas que estén en un rango de sedimentos en suspensión y para las partículas que tienen características de sedimentables; la explicación detallada del fenómeno de sedimentación resuspensión se da en el capitulo cuatro.



Figura 3.7: Condición de frontera para el movimiento de las partículas, δ es el espesor de la subcapa laminar.



Figura 3.8: Ubicación de una partícula sobre el espesor de la subcapa laminar, vista tridimensional y malla de discretización.

Capitulo 4 Aplicación al movimiento de partículas

4.1 Introducción

En este capitulo, se describe la aplicación del modelo desarrollado en el presente estudio, tratándose por separado al modelo hidrodinámico y al modelo de movimiento de partículas. Para la simulación hidrodinámica se empleo el modelo QUETZAL/3D, que proporciona campos de velocidades medias y campos turbulentos, en particular el campo v_T (viscosidad cinemática turbulenta) y las correlaciones dobles $u_i u_i$, que sirve para determinar las condiciones de frontera sobre la subcapa laminar; el campo de velocidades es el que proporciona la mayor intensidad de movimiento, en cualquiera de los sentidos espaciales, y el campo v_T es la que permite determinar el movimiento por dispersión turbulenta; los términos de las cantidades turbulentas uw y vw, sirven para obtener los esfuerzos cortantes actuantes sobre las partículas que llegan a la frontera de la subcapa laminar, con ello se puede, mediante una función de probabilidad, asumir que la partícula se resuspende o que la partícula quede sobre la subcapa laminar, esto se repite sucesivamente, hasta que la partícula salga del dominio en estudio o hasta que se termine el tiempo de simulación total. También se contempla en este trabajo una segunda forma de generar la dispersión turbulenta, mediante el empleo de un termino difusivo constante, afectado por una función aleatoria, que seria la que determine la intensidad de la turbulencia

de forma análoga en que se comportaría si se tuviera un campo v_T . Los efectos y comportamientos, empleando un campo v_T y un coeficiente de difusión constante, se discuten con detalle conforme se van realizando las simulaciones.

El movimiento de las partículas esta dado por un enfoque totalmente lagrangeano, al que le corresponde una parte advectiva y su parte difusiva, los aspectos en que se sustenta este movimiento ya han sido tratados en el capitulo dos y tres, allí se describen las propiedades físicas de las partículas y sus condiciones iniciales y de frontera.

Los casos estudiados son dos, con esto es posible representar el ingreso de una corriente a un estanque y el ingreso de una corriente lateral a otra de mayor dimensión, para los dos casos se emplearon geometrías regulares.

4.2 Descarga frontal a un estanque.

Esta representada por un canal que ingresa a un estanque, por su parte frontal; las dimensiones del estanque son: 18 m de largo, 9.5 m de ancho y 1.88 m de alto; las dimensiones del canal emisor son: 2 m de ancho y 1 m de alto, ver figura 4.1. Por el canal emisor se siembran partículas, bajo la forma de un perfil de concentraciones, tal como se ve en la figura 4.28, los diámetros de las partículas simuladas, así como otras de sus características se detallan en las figuras que van de la 4.35 a la 4.40 y de la 4.42 a la 4.50; así mismo en el análisis hidrodinámico se detallan las variables turbulentas κ y ϵ . La velocidad máxima del flujo que ingresa al canal es de 1 m/s, y al inicio el agua del estanque se considera sin movimiento.



Figura 4.1: Vista tridimensional del dominio en estudio, para el ingreso frontal de un canal hacia un estanque.

4.2.1 Análisis Hidrodinámico.

A continuación se presenta, el caso de la evolución del campo hidrodinámico, de una corriente con perfil de velocidades que ingresa a un estanque, el canal de ingreso tiene una sección transversal de 2 m por 1 m.

El problema esta definido, por sus condiciones iniciales y de frontera; por condiciones iniciales se tiene el ingreso de un perfil de velocidades, que muestra la evolución de la capa limite por el efecto de sus paredes, del mismo modo como condición inicial se le coloca un perfil de campos turbulentos, propios a la evolución de la capa limite generada por el perfil de velocidades en el ingreso, como se puede ver en la figura 4.2.

La solución numérica del campo hidrodinámico y sus parámetros turbulentos, esta sustentada en el capitulo dos, la malla empleada para la solución numérica es del tipo *Staggered Cell*, como se ve en la figura A1.1 del anexo 1. En la figura 4.3, se tiene la malla tridimensional para el dominio en estudio, la figura 4.4 presenta las mallas en los tres planos coordenados *xy*, *xz* y *yz*, del dominio en estudio.



Figura 4.2: Condiciones iniciales para la emisión frontal, (a) perfil de velocidades medias y (b) campo turbulento, condiciones de κ y ϵ .



Figura 4.3: Malla numérica, para el dominio tridimensional.



Figura 4.4: Vistas bidimensionales de la malla numérica, (a) plano xz, (b) plano xy y (c) plano yz.

La convergencia de la simulación numérica se dio para un tiempo de simulación de 40 s, y un paso de tiempo euleriano de $\Delta t=0.001$ s, realizando un total de 40,000 iteraciones; en la figura 4.5 se presenta la convergencia estacionaria del campo tridimensional de velocidades medias *versus* el numero de iteraciones; en la figura 4.6, se tiene la curva de convergencia en escala logarítmica, en esta curva se observa con mayor detalle la forma de cómo se produce la convergencia para el tiempo total de simulación.



Figura 4.5: Convergencia del campo tridimensional de velocidades medias encontradas en el dominio de estudio, en plano semi logarítmico.



Figura 4.6: Convergencia estacionaria para el campo de velocidades medio, encontrada en el dominio de estudio, en plano log-log.

Un criterio importante para analizar la convergencia, es el que toma en cuenta la evolución de la misma al centro de la pluma, para un análisis en el que se considera la evolución de la velocidad, como el desarrollado por Sini *et.al* (1986). En la figura 4.7 se presenta el desarrollo de la convergencia, para la relación de velocidades $\frac{U_i}{U_0}$ en el eje central y a lo largo de la superficie libre, comparada con la distancia sobre el eje x, para diferentes tiempos de simulación, en este caso para: 1, 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35 y 40 s. Nótese que para el tiempo de 40 s, la línea de convergencia se presenta mas estable.



Figura 4.7: Convergencia de la velocidad superficial en el centro del dominio (sobre el plano *xy*) y a lo largo del dominio (sobre el plano *yz*).

En las figuras 4.8 y 4.9, se aprecia la evolución del campo hidrodinámico para un tiempo de simulación de 40 s, para un flujo convergido, los campos de velocidades se presentan en forma de vectores; como veremos mas adelante, estos campos sirven para mover a las partículas que se encuentran sobre el mismo dominio en el que se desarrolló el análisis de partículas, por lo que la estructura que poseen deben de ser muy parecidas, esto se constata cuando vemos la vista en planta de la simulación total de movimiento de partículas para diámetros de 62 y 100 μ m, que se presentan en las figuras 4.35, 4.37, 4.38 y 4.40.



Figura 4.8: Campos vectoriales de velocidad, (a) dominio tridimensional, y (b) vista tridimensional sobre planos *yz*.



Figura 4.9: Campo vectorial de velocidades (a) plano *xy* y (b) plano central *xz*.

Para reforzar las ideas de los campos de velocidades expresadas en vectores, presentamos grafica de líneas de corriente, en donde pueden apreciarse los vortices que se forman y el sentido principal del flujo, en el dominio tridimensional (figuras 4.10 y 4.11).



Figura 4.10: Líneas de corriente en el dominio de estudio.


Figura 4.11: Líneas de corriente, (a) plano superficial xy y (b) plano central yz.

En los gráficos siguientes presentamos resultados mas detallados de las simulaciones hidrodinámicas, en gráficos tridimensionales y en gráficos bidimensionales.

4.2.1.1 Componente U de la velocidad

Es el campo de flujo principal, y el responsable de la mayor intensidad de los movimientos; este campo corresponde a un flujo convergido para un tiempo de simulación de 40 s, posee simetría en la formación de los vortices sobre todo el dominio, como se ve en las figuras 4.12 y 4.13; las intensidades de las velocidades, se pueden distinguir en la tabla adjunta al gráfico.



Figura 4.12: Campo tridimensional para la componente U de la velocidad.



Figura 4.13: Evolución de la componente U, sobre el plano superficial *xy*.

4.2.1.2 Componente V de la velocidad

Es un campo de flujo con líneas de corrientes secundarias, el segundo en intensidad después del campo de velocidades en U, y es el responsable de los movimientos en el sentido lateral del dominio; este campo de velocidades también corresponde a un campo convergido, desprendido de la misma simulación hecha para el campo U, para un tiempo de simulación de 40 s. El campo de velocidades obtenido, también es simétrico, como se puede ver en las figuras 4.14, 4.15 y 4.16; la magnitud de las velocidades, se puede distinguir viendo la tabla de intensidad de colores.



Figura 4.14: Campo tridimensional para la componente V de la velocidad.



Figura 4.15: Campo de la componente V de la velocidad, sobre el plano superficial *xy*.



Figura 4.16: Campo de la componente V de la velocidad, vista en planos *yz*.

4.2.1.3 Componente W de la Velocidad

Es un campo de flujo con líneas de corrientes secundarias, el tercero en intensidad en función del campo de velocidades en U, este campo es el responsable de los movimientos en el sentido vertical del dominio; para el movimiento de las partículas, su intensidad se vera afectada por la velocidad de caída de las partículas, haciendo que la magnitud del desplazamiento se vea incrementado o disminuido, según el sentido positivo o negativo del campo W. En las figuras 4.17 y 4.18, se observa la magnitud de las velocidades, cuyos niveles pueden verse en la tabla adjunta, según la intensidad de colores.



Figura 4.17: Campo tridimensional para la componente W de la velocidades.



Figura 4.18: Campo de la componente W de la Velocidad, vista en planos *yz*.

4.2.1.4 Viscosidad turbulenta v_T

El campo de viscosidades turbulentas ν_{T} , proporciona información referente a la intensidad de la turbulencia. Este campo se emplea para calcular el movimiento dispersivo producido por los efectos turbulentos, sobre todo el dominio espacial. La forma de su estructura es simétrica, como se puede ver en las figuras 4.19, 4.20 y 4.21. La magnitud de la viscosidad turbulenta, se pueden conocer observando la tabla de intensidad de colores adjunta al grafico.



Figura 4.19: Vista 3D del campo de la viscosidad turbulenta v_{T} .



Figura 4.20: Campo de la viscosidad turbulenta v_T , planos xy.



Figura 4.21: Campo de la viscosidad turbulenta v_T , planos yz.

4.2.1.5 Correlaciones dobles \overline{uw} y \overline{vw} en el fondo del canal

Los campos de correlaciones dobles \overline{uw} y \overline{vw} , sirven para obtener los esfuerzos cortantes que se producen sobre las partículas localizadas al nivel de la altura de la subcapa laminar. La forma de sus estructuras son simétricas, como se pueden ver en las figuras 4.22 y 4.23. La magnitud de las correlaciones dobles, se pueden obtener observando la tabla de intensidad de colores adjunta al grafico.



Figura 4.22: Campo de las correlaciones dobles \overline{uw} , sobre el fondo del canal, vista en planta sobre el plano *xy*.



Figura 4.23: Campo de las correlaciones dobles \overline{vw} , sobre el fondo del canal, vista en planta sobre el plano *xy*.



Figura 4.24: Campo tridimensional de las correlaciones dobles \overline{uw} .



Figura 4.25: Campo tridimensional de las correlaciones dobles vw.



Figura 4.26: Campo tridimensional de las correlaciones dobles uv.

4.2.2 Movimiento de las partículas

4.2.2.1 Perfiles de concentración y sembrado de partículas

El perfil de concentraciones en una corriente natural o artificial, se rige por el tipo del régimen del fluido, y por la magnitud de las concentraciones; cuando la concentración es baja (c<10 kg/m³) y el régimen que domina el movimiento es inferior, la ecuación para la concentración, adaptada de la ecuación de Rouse, se escribe:

$$\frac{c}{c_{a}} = \left(\frac{h-z}{z}\frac{a}{h-a}\right)^{\frac{w_{s}}{(\beta\kappa u_{*})}} \qquad \text{para} \quad \frac{z}{h} < 0.5$$

$$\frac{c}{c_{a}} = \left(\frac{a}{h-a}\right)^{\frac{w_{s}}{(\beta\kappa u_{*})}} e^{-4\left(\frac{w_{s}}{\beta\kappa u_{*}}\right)\left(\frac{z}{h}-0.5\right)} \qquad \text{para} \quad \frac{z}{h} \ge 0.5$$
(4.1)

Donde:

c : Concentración en la profundidad z, medido desde la superficie libre del agua, [gr/m³].

ca : Concentración de referencia, a la profundidad z=h-a, [gr/m³].
 h : Profundidad del agua, [m].

 w_s : Velocidad de caída de las partículas, [m/s].

U* : Velocidad cortante en el fondo, [m/s].

La expresión para la velocidad cortante critica en el fondo U*, puede ser derivada de los esfuerzos cortantes en el fondo, empleando la ecuación de Chézy. Asumiendo un flujo hidráulicamente rugoso, y siendo el fondo plano, la ecuación para la velocidad cortante critica en el fondo, según Van Rijn se escribe:

$$U_* = 5.75 [(s-1)gd_{50}]^{0.5} \theta_{cr}^{0.5} \log\left(\frac{4h}{d_{90}}\right)$$
(4.2)

Donde:

- s : Densidad relativa.
- g : Aceleración de la gravedad.
- d₅₀ : Diámetro de la partícula que pasa el 50% de la criba, de toda una muestra de granos.
- θ_{cr} : Parámetro critico de Shield.
- h : Profundidad del agua.
- d₉₀ : Diámetro de la partícula que pasa el 90% de la criba, de toda una muestra de granos.

El valor de θ_{cr} , depende de las condiciones hidráulicas cerca al fondo, y se obtiene de la ecuación (4.3); D* representa a un parámetro de la partícula y se evalúa según la ecuación (4.4).

$\theta_{\rm cr} = 0.24 \mathrm{D}_*^{-1}$	Para	$1 < D_* \le 4$	
$\theta_{\rm cr} = 0.14 {\rm D}_{*}^{-0.64}$	Para	$4 < D_* \le 10$	
$\theta_{cr} = 0.04 D_*^{-0.1}$	Para	$10 < D_* \le 20$	(4.3)
$\theta_{cr} = 0.013 D_*^{0.29}$	Para	$20 < D_* \le 150$	
$\theta_{\rm cr} = 0.055$	Para	D* >150	

$$D_* = \left(\frac{(s-1)g}{v^2}\right)^{\frac{1}{3}} d_{50}$$
(4.4)

En la figura 4.27, se presenta un perfil de concentraciones típico y en la figura 4.28 se muestra la forma del sembrado de partículas para el ingreso frontal a una corriente. En nuestro estudio simulamos el movimiento de partículas obtenidas de un perfil de concentraciones, transformando el valor de concentraciones a números de partículas en función del diámetro y del valor de la concentración, con la característica de que las partículas poseen un único diámetro. El ingreso frontal se simula con diámetros de 62, 100, 200, 300 y 500 µm, el fin es determinar, cuales son las partículas que están siempre en suspensión y cuales tienden a sedimentarse. El ingreso lateral se simula con partículas de 62 y 500 µm de diámetro, aquí el inicio de la sedimentación se da con diámetros de 62 µm, la forma de sedimentación es igual que para las partículas de 500 µm. Las partículas sembradas, se afectan por su densidad ($\rho_s=2650 \text{ kg/m}^3$) y por su velocidad de caída, tal como se explicó en el capitulo tres.



Figura 4.27: Perfil de concentraciones para sólidos en suspensión.



Figura 4.28: Perfil de concentraciones, sembradas desde el canal emisor.

Para calcular el perfil de concentraciones después de la simulación del movimiento de partículas, se recurre al empleo de cajas computacionales, es decir se crean cajas o volúmenes de control, donde se cuentan el numero de partículas que quedan en el mismo, con esto se puede calcular de manera adimencionalizada el valor de la concentración; estas cajas son obtenidas de dividir el dominio en estudio, en tres franjas sobre el eje y, con esto se obtiene una de las dimensiones de la caja computacional, las otras dos dimensiones se obtienen de: en el eje x se cuentan dos incrementos espaciales Δx y sobre la vertical se cuenta un incremento espacial Δz , ténganse en cuenta que en la vertical las magnitudes de los incrementos son variados y van de 2.3 a 10 cm, el esquema para el conteo de partículas empleando cajas computacionales se ve en la figura 4.29.



Figura 4.29: Cajas computacionales para el cálculo de las concentraciones.

4.2.2.2 Pruebas de ajuste.

Las pruebas de ajuste y calibración consiste en determinar cuales son los criterios mas adecuados para el movimiento de las partículas, para ello se ensayaron cuatro tipo de ecuaciones, que se escriben:

$$x_i^{n+1} = x_i^n \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \frac{dh}{100}$$
 (4.5)

$$x_i^{n+1} = x_i^n \pm \operatorname{ran}(\operatorname{iseed}) \times \frac{\mathrm{dh}}{100}$$
(4.6)

$$x_{i}^{n+1} = x_{i}^{n} \pm \sqrt{2 \times v_{T(i,j,k)} \times \Delta t}$$

$$(4.7)$$

$$\mathbf{x}_{i}^{n+1} = \mathbf{x}_{i}^{n} \pm (2 \times \operatorname{ran}(\operatorname{iseed}) - 0.5) \times \sqrt{2 \times \mathbf{v}_{T(i,j,k)} \times \Delta t}$$
(4.8)

$$\mathbf{x}_{i}^{n+1} = \mathbf{x}_{i}^{n} + \mathbf{u}_{i} \times \Delta t \tag{4.9}$$

$$x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \frac{dh}{100}$$
 (4.10)

$$\mathbf{x}_{i}^{n+1} = \mathbf{x}_{i}^{n} + \mathbf{u}_{i} \times \Delta t \pm (2 \times \operatorname{ran}(\operatorname{iseed}) - 0.5) \times \sqrt{2 \times \mathbf{v}_{T(i,j,k)} \times \Delta t}$$
(4.11)

Las ecuaciones (4.5) y (4.6), corresponde al primer grupo de ecuaciones, que emplea un coeficiente de difusión constante (dh); las ecuaciones (4.7) y (4.8) forman parte del segundo grupo de ecuaciones y emplean un campo de dispersión turbulento ν_{T} ; finalmente las ecuaciones 4.9, 4.10 y 4.11, son las ecuaciones que se emplean para el movimiento de las partículas.

Las ecuaciones de movimiento (4.9), (4.10) y (4.11), están bajo un enfoque lagrangeano, que en su forma general considera una parte advectiva y una parte difusiva, lo referente al funcionamiento conceptual del sistema, ya se explicó en el capitulo dos y tres de este trabajo.

El movimiento dispersivo producido por efectos turbulentos fue probado empleando las ecuaciones: (4.5), (4.6), (4.7) y (4.8). Las ecuaciones (4.5) y (4.6), mueven a las partículas empleando un termino difusivo constante, afectado al mismo tiempo por un coeficiente de aleatoriedad para involucrar el efecto turbulento; el coeficiente aleatorio es analizado de dos formas diferentes, con el fin de encontrar un comportamiento adecuado. Las ecuaciones (4.7) y (4.8), mueven a las partículas empleando un campo $\nu_{\rm T}$ (viscosidad cinemática turbulenta), proporcionado por el modelo QUETZAL/3D, este movimiento también es afectado por un coeficiente aleatorio; el campo $\nu_{\rm T}$, proporciona con mucha aproximación las intensidades turbulentas dentro del dominio, esto permite que las partículas se muevan a diferentes escalas de magnitud, según la intensidad turbulenta en el lugar donde se encuentren. Finalmente el componente que genera la dispersión turbulenta en las ecuaciones (4.9), (4.10) y (4.11), son afectadas por el signo positivo o negativo, de la velocidad que mueve a la partícula, esto hace que la dispersión tenga el sentido del movimiento principal.

Las simulaciones, fueron realizadas para intervalos de tiempo lagrangeano $\Delta t=1$ s y para una simulación total de 1 hora. Se presentan vistas de los planos *xy*, *xz* y *yz*, que incluyen a todas las partículas que después de la simulación quedan en el dominio. En la figura 4.30, se presenta un grafico, que representa la simulación del movimiento de partículas a escala real.



Figura 4.30: Simulación del movimiento, para el ajuste del modelo de partículas, gráficos a escala sin distorsionar.

En lo que sigue de este acápite, se desarrollan simulaciones para el ajuste del movimiento dispersivo, empleando las ecuaciones (4.5), (4.6), (4.7) y (4.8). Las simulaciones se presentan en las figuras 4.31, 4.32, 4.33 y 4.34, en cada figura se tiene la descripción que caracteriza a la simulación, así como la ecuación que se emplea para mover a las partículas. El movimiento, producido por los términos de dispersión turbulenta, nos muestra que los desplazamientos generados por las ecuaciones (4.5), (4.6), (4.7) y (4.8), poseen formas diferentes unas de otras.

La simulación del movimiento de partículas según las ecuaciones (4.5) y (4.6), presentan estructuras muy parecidas; la función de probabilidad $(2 \times ran(iseed) - 0.5)$ tiende a dispersar mas a las partículas, mientras que la ecuación que está afectada por la función de probabilidad ran(iseed) hace que se produzca una dispersión mas controlada, tal como se ve en las figuras 4.31 y 4.32. Las ecuaciones (4.7) y (4.8), a diferencia del comportamiento producido por las ecuaciones (4.5) y (4.6), imprimen un movimiento a las partículas, mucho mas limitadas que en el caso anterior, donde la máxima distancia alcanzada no sobrepasa los 2.5 m, como se ve en las figuras 4.33 y 4.34. El comportamiento simétrico del movimiento de las partículas, se debe a los sentidos del desplazamiento de los campos de velocidades, que en este caso de estudio son simétricos, es decir el sentido positivo o negativo de las velocidades en la región de estudio, es el mismo que se emplea para el movimiento de dispersión turbulenta.

La diferencia encontrada en el movimiento que genera el primer grupo de ecuaciones (4.5 y 4.6), con las del segundo grupo de ecuaciones (4.7 y 4.8), se debe a que el coeficiente de difusión empleado para las ecuaciones (4.5 y 4.6) son constantes, generando una misma magnitud de desplazamiento en todo el dominio, esto provoca que las partículas salgan mas rápido del dominio o se peguen a sus fronteras (paredes o fondo del estanque); por el contrario, el movimiento producido por las ecuaciones (4.7 y 4.8), que emplea campos $\nu\tau$, desplaza a las partículas en función de la intensidad turbulenta que existe en el dominio, siendo así un movimiento complementario al generado por los campos de velocidades, que por lógica es el que predomina en el movimiento de las partículas; claro esta que este comentario se refiere al ensayo computacional de nuestro estudio.





Figura 4.31: Diámetro de la partícula 62 µm, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 136 020, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento de las partículas: $x_i^{n+1} = x_i^n \pm ran(iseed) \times \frac{dh}{100}$.





Figura 4.32: Diámetro de la partícula 62 μ m, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 309 581, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento

de las partículas: $x_i^{n+1} = x_i^n \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \frac{dh}{100}$.





Figura 4.33: Diámetro de la partícula 62 µm, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 748 800, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento de las partículas: $x_i^{n+1} = x_i^n \pm \sqrt{2 \times v \tau_i \times \Delta t}$.





Figura 4.34: Diámetro de la partícula 62 μ m, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 748 800, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento de las partículas:

$$x_i^{n+1} = x_i^n \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \sqrt{2 \times v\tau_i \times \Delta t}$$

Los movimientos obtenidos por las diferentes modificaciones a la ecuación lagrangeana (ecuaciones 4.5, 4.6, 4.7 y 4.8), nos llevan a afirmar, que cuando se emplea un coeficiente de difusión constante, se genera un movimiento asociado a la dispersión capaz de sobrepasar hasta en varios ordenes de magnitud, al desplazamiento producido sólo por el campo hidrodinámico, además de que tienden a mover a las partículas hacia sus fronteras. Los efectos que generan altos órdenes de magnitud de desplazamiento así como el efecto de pegar a las partículas a las paredes y al fondo, no son deseados, por que contando con una muy buena aproximación hidrodinámica y turbulenta, no se puede mover a las partículas en función de un coeficiente de difusión constante, que no refleja la debida intensidad turbulenta en el dominio y que tampoco es la principal fuente de movimiento de las partículas. De otro modo un excesivo desplazamiento generado por el termino de dispersión turbulenta (cuando el coeficiente es constante), no se apega a la realidad; aun si existieran muchos vortices, las partículas quedarían atrapadas en ellas y no expulsadas del dominio, tampoco se aglomerarían sobre las paredes, como si fuese el efecto de una línea de corriente en un sentido preferencial, sin tampoco esperar que las partículas se han expulsadas rápidamente del dominio. Por lo anteriormente expuesto y tratando de que la dispersión turbulenta tenga una buena aproximación, hemos optado por emplear campos de viscosidad turbulenta, mas un efecto aleatorio producida por la función $(2 \times ran(iseed) - 0.5).$

4.2.2.3 Simulación del movimiento de las partículas.

La simulación para el movimiento de las partículas, se presentan en las figuras que van de la 4.35 a la 4.40 y de la 4.42 a la 4.50; los diámetros simulados son: 62,100, 200, 300 y 500 μ m. Para validar el modelo, se necesitaría comparar los perfiles de concentraciones de datos tomados en campo y compararlos con los perfiles de concentraciones obtenidas por nuestro modelo. La forma de obtener los perfiles de concentración se describió en el acápite 4.2.2.1. Los perfiles de concentración obtenidos por nuestro modelo se presentan adimencionalizados en función del máximo valor de la concentración encontrada en todo el dominio. En el sub capitulo 4.4, se analizan los resultados de los perfiles de concentración obtenidos por el modelo de transporte de partículas, y a la vez se comparan con perfiles de concentración obtenidos en el campo. Las ecuaciones que se emplean para mover a las partículas son la 4.9, 4.10 y la 4.11.





Figura 4.35: Diámetro de la partícula 62 µm, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 6 797, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento de las partículas: $x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t$.





Figura 4.36: Diámetro de la partícula 62 μ m, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 309 581, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento de las partículas:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \frac{dh}{100}.$$





Figura 4.37: Diámetro de la partícula 62 μ m, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 6 537, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento de las partículas:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \sqrt{2 \times v\tau_i} \times \Delta t .$$





Figura 4.38: Diámetro de la partícula 100 µm, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 6 797, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento de las partículas: $x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t$.





Figura 4.39: Diámetro de la partícula 100 μ m, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 43 284, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento de las partículas:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \frac{an}{100}$$





Figura 4.40: Diámetro de la partícula 100 μ m, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 6 797, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento de las partículas:

 $x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \sqrt{2 \times v\tau_i \times \Delta t} .$

Hasta ahora se ha simulado el movimiento de partículas de 62 y 100 µm de diámetro; El comportamiento del movimiento para ambos diámetros, es el mismo, como se ve en las figuras 4.35 a la 4.40; esto se justifica por el hecho de que ambos diámetros son muy parecidos y sus características tales como su peso y velocidad de caída, no influyen mucho en el movimiento, logrando que el comportamiento de ambas sean similares; pudiéramos encontrar detalles mas finos, si analizáramos las posiciones que toman cada partícula al milímetro, pero para este tipo de estudio no se requiere tanto rigor. Es mas importante discutir la forma del movimiento para los distintos tipos de ecuaciones empleadas; las ecuaciones 4.9 y 4.11, generan un movimiento muy parecido, siendo que en la ecuación 4.11 se le ha agregado el movimiento dispersivo turbulento empleando el campo de viscosidades turbulentas v_{T} , como ya se explico antes, el movimiento generado por los campos v_T , no son tan importantes en magnitud, cuando se compara con las escalas del desplazamiento provocado por los campos de velocidades, esto se ve al comparar las figuras 4.35 y 4.37, y en las figuras 4.38 y 4.40; por otro lado analizando el movimiento generado por la ecuación 4.10 y comparándola con los movimientos generados por las ecuaciones 4.9 y 4.11, vemos que existe una notaria diferencia; el movimiento generado por la ecuación 4.10, no se parece en nada a las formas del movimiento producidas por la ecuación 4.9 y 4.11, esto debido a que el coeficiente de difusión constante, mueve muy rápido a las partículas, sacándolas del dominio y pegándolas a sus fronteras, que en realidad no es la forma lógica de cómo se deberían mover las partículas; el empleo de la ecuación 4.10, pudiera dar mejores resultados, siempre y cuando se le coloquen condiciones de frontera mas elaborados, llevando a imaginar muchas factores relacionados al movimiento, que no es lo deseado cuando se cuentan con ecuaciones como las 4.9 y 4.10, donde el movimiento turbulento si puede ser controlado. En la figura 4.41, presentamos la estadística del numero de partículas que quedan en el dominio después de la simulación.

Partículas 62 ⊭m		Partículas 100 #m			
50000 45000 35000 25000 20000 15000 5000 5000	43284		50000 45000 35000 35000 25000 20000 15000 10000 5000	43284	79
0 Ec. (4.9)	Ec. (4.10)	Ec. (4.11)	0 - Ec. (4.9)	Ec. (4.10)	Ec. (4.11)

Figura 4.41: Número de partículas que quedan en el dominio después de la simulación del movimiento, ϕp =62 y 100 μ m, total de partículas liberadas 748 800.





Figura 4.42: Diámetro de la partícula 200 µm, número de partículas liberadas *604 800*, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación *6 714*, número de partículas liberadas por paso de tiempo 168, ecuación para el movimiento de las partículas: $x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t$.





Figura 4.43: Diámetro de la partícula 200 μ m, número de partículas liberadas *604 800*, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 47 339, número de partículas liberadas por paso de tiempo 168, ecuación para el movimiento de las partículas:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \frac{dn}{100}$$





Figura 4.44: Diámetro de la partícula 200 μ m, número de partículas liberadas 604 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 6 537, número de partículas liberadas por paso de tiempo 168, ecuación para el movimiento de las partículas:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \sqrt{2 \times v\tau_i} \times \Delta t .$$

Las figuras a, b y c, muestran el total de las partículas que se encuentran en el dominio.

79

ESTA TESIS NO SALL DE LA BIBLIOTECA





Figura 4.45: Diámetro de la partícula 300 µm, número de partículas liberadas 633 600, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 35 460, número de partículas liberadas por paso de tiempo 176, ecuación para el movimiento de las partículas: $x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t$.





Figura 4.46: Diámetro de la partícula 300 μ m, número de partículas liberadas 633 600, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 77 254, número de partículas liberadas por paso de tiempo 176, ecuación para el movimiento de las partículas:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \frac{dh}{100}$$





Figura 4.47: Diámetro de la partícula 300 μ m, número de partículas liberadas 633 600, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 34 171, número de partículas liberadas por paso de tiempo 176, ecuación para el movimiento de las partículas:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \sqrt{2 \times v\tau_i} \times \Delta t .$$





Figura 4.48: Diámetro de la partícula 500 µm, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 322 017, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento de las partículas: $x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t$.





Figura 4.49: Diámetro de la partícula 500 μ m, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 231 025, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento de las partículas:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \frac{dh}{100}.$$





Figura 4.50: Diámetro de la partícula 500 μ m, número de partículas liberadas 748 800, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 320 572, número de partículas liberadas por paso de tiempo 208, ecuación para el movimiento de las partículas:

 $x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \sqrt{2 \times v\tau_i \times \Delta t} .$

Las figuras a, b y c, muestran el total de las partículas que se encuentran en el dominio.

58

El movimiento de partículas para diámetros de 200, 300 y 500 µm, se caracteriza por que son partículas que ya empiezan a sedimentarse, esto debido al peso de ellas y a su velocidad de caída; claramente se puede observar que el inicio de la sedimentación se da para las partículas de 200 µm, como se ve en la figura 4.44, el asentamiento es mas notorio para las partículas de 300 y 500 µm, tal como podemos verlo en las figuras 4.47 y 4.50. Al igual que para el caso de las partículas de 62 y 100 µm, que fueron movidas empleando la ecuación 4.10, en este caso, se presenta el mismo problema, por lo que descartamos su empleo para mover partículas en este tipo de dominio, las razones de esto ya fueron explicadas al discutir el movimiento para partículas de 62 y 100 µm. El movimiento con partículas de 200 y 300 µm, poseen estructuras muy parecidas, pero la tendencia al asentamiento es mas pronunciada para las partículas de 300 µm, podemos decir que en nuestro caso de estudio, la sedimentación se inicia con partículas que tienen diámetros de 200 µm; el caso de partículas de 500 µm, presenta una tendencia generalizada al asentamiento, mucho mayor que para los casos discutidos anteriormente, esta tendencia se explica debido a que el diámetro de 500 µm, es un diámetro considerable y que la forma de sus perfiles de concentración, también difieren de los perfiles encontrados para partículas de menor diámetro, como se vera mas adelante. La forma de cómo se asientan las partículas en el fondo están asociadas a la las estructuras que se producen en el fondo, recordemos que estas estructuras están fuertemente ligadas a las condiciones de frontera para el movimiento; en la figura 4.51, se presenta, mediante un grafico de barras, el numero de partículas que quedaron en el dominio después de la simulación.







Figura 4.51: Número de partículas que quedan en el dominio después de la simulación del movimiento; el numero total de partículas liberada fue de 604800, para 200 μ m, 633600 para 300 μ m y 748800 para 500 μ m.

4.3 Descarga lateral a una corriente.

Esta dado por una descarga lateral que ingresa a una corriente; las dimensiones del estanque son: 18 m de largo, 9.5 m de ancho y 1.88 m de alto; las dimensiones de la sección de la descarga lateral es: 5 m de ancho y 1 m de alto, la figura 4.52 muestra el dominio de estudio para el caso que se comenta. Por la descarga lateral se siembra las partículas, bajo la forma de un perfil de concentraciones, tal como se ve en la figura 4.53; los diámetros de las partículas sembradas, así como otras características de este caso en estudio, se detallan en las figuras 4.71 a la figura 4.76, que son los resultados obtenidos de las simulaciones.



Figura 4.52: Vista tridimensional del dominio en estudio, para el ingreso de una descarga lateral a una corriente.



Figura 4.53: Perfil de concentraciones, sembradas en una descarga lateral que ingresa a una corriente.
4.3.1 Análisis Hidrodinámico.

Para este caso de estudio el análisis hidrodinámico es muy parecido al realizado para la descarga frontal; el perfil de velocidades que ingresa al dominio en estudio se da por la descarga lateral con una velocidad de 1 m/s y a lo largo de todo el ancho de la sección transversal de la corriente.

Las condiciones iniciales están dadas, por el ingreso de un perfil de velocidades, que considera la capa limite que se produce por efectos de las paredes; el perfil de velocidades se siembra tanto en el ingreso de la descarga lateral como en el ingreso por la sección transversal de la corriente; otra condición inicial esta dada por el perfil de campos turbulentos que se ubican en la misma zona donde se siembran los perfiles de velocidades, del mismo modo en que se procedió para el caso de la descarga frontal; las graficas de la emisión de la descarga lateral así como el perfil turbulento que se siembra sobre el mismo se puede ver en la figura 4.54.



Figura 4.54: Condiciones iniciales para la emisión lateral, (a) perfil de velocidades y (b) campo turbulento para la descarga lateral.

El análisis de la convergencia, se realizo de forma análoga que para la descarga frontal, para un tiempo de simulación de 40 s y para un paso de tiempo euleriano Δt =0.001 s. En la figura 4.55, se presenta la evolución del campo vectorial de velocidades.



Figura 4.55: Campos vectoriales de velocidad, para un dominio tridimensional.

Las líneas de corrientes obtenidas en la simulación hidrodinámica, permiten entender el sentido del movimiento del flujo, el cual debe ser contrastado con el movimiento de las partículas; como el campo de velocidades es el componente mas importante para el movimiento de partículas, este debe parecerse en forma al movimiento final de las partículas, por lo menos cuando las características de las partículas las permitan, lo anterior hace referencia a las partículas de 62 µm de diámetro, que puede hasta cierto punto servir como trazador del flujo.



Figura 4.56: Líneas de corriente y vectores de velocidad, sobre el plano superficial.

4.3.1.1 Componente U de la Velocidad

Para este caso de descarga lateral, las velocidades U, forman un campo de flujo secundario, como se puede ver no existe un patrón simétrico en el movimiento del flujo, esto es debido a la influencia del chorro que descarga por la sección transversal de la corriente; los vortices formados no son en magnitud, tan potentes como los producidos por el chorro lateral, donde la mayor intensidad de velocidades la tiene la componente V de la velocidad; en las figuras 4.57 y 4.58 se puede ver la evolución del campo hidrodinámico para la componente U de la velocidad.



Figura 4.57: Campo tridimensional de la componente U de la velocidad.



Figura 4.58: Campo de la componente U de la velocidad, sobre el plano superficial *xy*.

4.3.1.2 Componente V de la Velocidad

Representa, en este caso de descarga lateral, la mayor intensidad de velocidades, contribuyendo significativamente a la formación de las líneas de corrientes principales. El campo de velocidades obtenido no es simétrico, esto se debe a la influencia del chorro que ingresa por la sección de la corriente; la evolución del campo hidrodinámico se puede ver en las figuras 4.59 y 4.60.



Figura 4.59: Campo tridimensional de la componente V de la velocidad.



Figura 4.60: Campo de la componente V de la velocidad, sobre el plano superficial *xy*.

4.3.1.3 Componente W de la Velocidad

El componente de velocidad generado, corresponde a un flujo secundario, de menor intensidad que las obtenidas para los componentes U y V de la velocidad, el tercero en intensidad en función de la componente V de la velocidad; la importancia de este componente, se refleja en la simulación hecha para las partículas de $62 \mu m$ de diámetro, que a diferencia del ingreso frontal, donde nunca se produjo asentamiento, para este caso de ingreso de descarga lateral, se produce sedimentación; al igual que los casos anteriores, el componente W de velocidad, tampoco es simétrico, como se ve en las figuras 4.61 y 4.62.



Figura 4.61: Campo tridimensional de la componente W de la velocidad.



Figura 4.62: Componente W de velocidad, sobre planos yz.

4.3.1.4 Viscosidad turbulenta v_T

Este campo nos sirve para mover las partículas por efectos de la dispersión turbulenta, empleadas del mismo modo que para el ingreso frontal; en este caso de estudio se nota una ligera relevancia del movimiento producido por los términos de dispersión turbulenta asociada a los campos ν_T , que tiende a pegar a las partículas en la pared lateral, lo que no se notaria si se moviera a los sedimentos solo empleando el campo hidrodinámico. La forma de su estructura se puede ver en las figuras 4.63 y 4.64, que en términos prácticos reflejan la intensidad de la turbulencia para este caso de descarga lateral.



Figura 4.63: Vista tridimensional del campo de la viscosidad turbulenta v_{T} .



Figura 4.64: Campo de la viscosidad turbulenta v_T , plano *xy* del fondo.

4.3.1.5 Correlaciones dobles \overline{uw} y \overline{vw} en el fondo del canal

Los campos de correlaciones dobles \overline{uw} y \overline{vw} , son empleadas para las condiciones de frontera que permiten conocer si una partícula se resuspende o si se sedimenta, la forma de dicho análisis fue expuesto en el capitulo tres. La forma de sus estructuras se ven en las figuras 4.65, 4.66, 4.67, 4.68 y 4.69.



Figura 4.65: Campo de las correlaciones dobles \overline{uw} , sobre el fondo del canal, vista en planta sobre el plano *xy*.



Figura 4.66: Campo de las correlaciones dobles \overline{vw} , sobre el fondo del canal, vista en planta sobre el plano *xy*.



Figura 4.67: Campo tridimensional de las correlaciones dobles uw.



Figura 4.68: Campo tridimensional de las correlaciones dobles \overline{vw} .



Figura 4.69: Campo tridimensional de las correlaciones dobles uv.

4.3.2 Movimiento de las partículas

4.3.2.1 Simulación del movimiento de las partículas.

Se realizaron simulaciones, para partículas de 62 y 500 μ m de diámetro, asumida de la experiencia de haber simulado el caso de la descarga frontal. El intervalo de tiempo lagrangeano fue de $\Delta t = 1$ s y el tiempo de simulación total fue de 1 hora; los formatos gráficos para la presentación de los resultados es similar al empleado para la descarga frontal, presentando vistas de los planos *xy*, *xz* y *yz*, que a su vez incluyen a todas las partículas, que después de la simulación quedan en el dominio; en la figura 4.70 se presenta un grafico a escala real, para darnos una idea espacial, de cómo es el fenómeno del movimiento de partículas; las simulaciones del movimiento de partículas; las simulaciones del movimiento de partículas, se presentan en las figuras que van de la 4.71 a la 4.76.



Figura 4.70: Simulación del movimiento de partículas, gráficos a escala sin distorsionar.





Figura 4.71: Diámetro de la partícula 62 µm, número de partículas liberadas 756 000, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 132 964, número de partículas liberadas por paso de tiempo 210, ecuación para el movimiento de las partículas: $x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t$.

Las figuras a, b y c, muestran el total de las partículas que se encuentran en el dominio.

97





Figura 4.72: Diámetro de la partícula 62 μ m, número de partículas liberadas 756 000, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación *8 833*, número de partículas liberadas por paso de tiempo 210, ecuación para el movimiento de las partículas:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \frac{dn}{100}$$





Figura 4.73: Diámetro de la partícula 62 μ m, número de partículas liberadas 756 000, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 114 244, número de partículas liberadas por paso de tiempo 210, ecuación para el movimiento de las partículas:

 $x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \sqrt{2 \times v\tau_i \times \Delta t} .$

Las figuras a, b y c, muestran el total de las partículas que se encuentran en el dominio.

66





Figura 4.74: Diámetro de la partícula 500 µm, número de partículas liberadas 792 000, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 272 479, número de partículas liberadas por paso de tiempo 220, ecuación para el movimiento de las partículas: $x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t$.





Figura 4.75: Diámetro de la partícula 500 μ m, número de partículas liberadas 630 000, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 13 048, número de partículas liberadas por paso de tiempo 175, ecuación para el movimiento de las partículas:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \frac{dh}{100}$$





Figura 4.76: Diámetro de la partícula 500 μ m, número de partículas liberadas 792 000, número de partículas que quedan en el dominio después del tiempo de simulación 265 655, número de partículas liberadas por paso de tiempo 220, ecuación para el movimiento de las partículas:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + u_i \times \Delta t \pm (2 \times ran(iseed) - 0.5) \times \sqrt{2 \times v\tau_i} \times \Delta t .$$

El movimiento de partículas, para las descargas laterales, tienen un comportamiento muy peculiar, tal es el caso que la sedimentación se da hasta con partículas de 62 μ m, ver las figuras 4.71 y 4.73; la simulación presentada en la figura 4.72 (movidas por la ecuación 4.10), presenta el mismo problema que se dio para el ingreso frontal, el efecto de los componentes de velocidades, tienden a pegar a las partículas a sus fronteras, esto nos lleva a descartar el movimiento producido por la ecuación 4.10. Para el caso de las partículas de 500 µm de diámetro, se presenta un movimiento con una tendencia al asentamiento, esto debido a la influencia de la velocidad de caída de la partícula, la forma del asentamiento en el fondo es muy parecida a la forma de asentamiento para las partículas de 62 μm, la diferencia se da en el numero de partículas asentadas, para ello recurrimos a la tabla 4.1, que nos presenta el registro de las simulaciones para el caso de la descarga lateral. Para los dos diámetros simulados, podemos decir que las ecuaciones que mejor reflejan el movimiento son las ecuaciones 4.9 y 4.11, siendo la mas recomendada la ecuación 4.11, por que representa mejor el movimiento provocado por la dispersión turbulenta, la diferencia se hace mas perceptible para el caso de la descarga lateral, lo que no pudimos observar en el caso de la descarga frontal, en la figura 4.77 tenemos un diagrama de barras que nos muestra el número de partículas que quedan en el fondo después de la simulación.

rubiu mil negiono de no purdeuno bintundudo, pura er ingrebo metruit			oo meenn
Diámetro	Total partículas	Partículas	Partículas en
(µm)	sembradas	retenidas	las fronteras
62	756 000	114 244	107463
500	792 000	265 655	260 026

Tabla 4.1. Registro de las partículas simuladas, para el ingreso lateral



Figura 4.77: Numero de partículas que quedan en el dominio, después de la simulación del ingreso lateral, para partículas de 62 y 500 µm.

4.4 Análisis de los perfiles de concentración

El análisis de los perfiles de concentración permitirá validar de manera cualitativa, el modelo de movimiento de partículas; aunque las condiciones de estudio difieren en mucho de lo que pueda ocurrir en la realidad, los resultados expresados en forma cualitativa proveen suficiente información, para deducir el verdadero comportamiento del movimiento de partículas en flujos a superficie libre. Los resultados se analizan para los dos casos de estudios, que son el ingreso frontal y la descarga lateral.

4.2.3 Perfiles de concentración para la descarga frontal

La descarga frontal, produce efectos típicos en el perfil de velocidades, muy parecidos al flujo que se produce cuando una corriente ingresa a un embalse. Para nuestro análisis tomaremos los perfiles de concentraciones obtenidos para los diámetros de partículas de 62, 300 y 500 µm, donde se aprecia que la forma de sus perfiles son muy parecidas, aunque las magnitudes de sus concentraciones no lo son; en la figura 4.79 se tienen los gráficos de los perfiles de concentración, para los diámetros de 62, 300 y 500 μm; las partículas de 62 μm representan, en este caso, a los sedimentos en suspensión, y las partículas de 200, 300 y 500 µm representan a las partículas que tienden a sedimentarse. La ubicación de los perfiles de concentración se describe en la figura 4.78, allí mismo se presentan a las partículas que quedaron sedimentadas en el fondo; nótese con esto, la forma del asentamiento que toman las partículas mayores o iguales a 300 µm; el hecho de asentarse mas partículas, cuando el diámetro es mayor, influye en el perfil de concentraciones, aunque el perfil sigue manteniendo su misma forma; no es el interés de este trabajo profundizar en el análisis de las concentraciones para diferentes diámetros, pero sin nos interesa presentar los resultados de la evolución de los perfiles de concentración en todo el dominio de estudio. Para graficar los perfiles de concentración, se adimencionalizan las escalas de concentraciones y profundidad. Las concentraciones se adimencionalizan igualando a uno, al máximo valor de la concentración en el dominio; del mismo modo en la vertical, se toma igual a uno al máximo valor de la profundidad del canal.

Los resultados obtenidos por nuestro modelo, son comparados cualitativamente con mediciones hechas en campo; tal es el caso de la presa Sanmenxia en China y la presa Sautet en Francia; los perfiles de concentración medidos en campo, poseen formas muy similares a los perfiles obtenidos en nuestro modelo. En la figura 4.80 se presenta el grafico del perfil de concentraciones medio, obtenido por nuestro modelo y el perfil de concentraciones medidos en las presas Sanmenxia y Sautet.



Figura 4.78: Partículas sedimentadas en el fondo (descarga frontal); (i) diámetro de 62 μ m, (ii) diámetro de 300 μ m y (iii) diámetro de 500 μ m.



Figura 4.79: Perfiles de concentraciones para partículas de 62, 300 y 500 μ m, obtenidos al centro del plano *xy* y sobre el eje *x*, para el ingreso frontal.



Figura 4.80: Perfiles de concentración, (a) perfiles promedio en el centro del plano *xy* y sobre el eje *x*, para el caso de ingreso frontal, (b) perfiles de concentración de la presa Sanmenxia de China [Van Rijn] y (c) perfiles de concentración de la presa Sautet en Francia [Comité Español de Grandes Presas].

4.2.4 Perfiles de concentración para la descarga lateral

Para el caso de la descarga lateral, se calcularon perfiles de concentración, considerando diámetros de 62 y 500 μ m. A diferencia de la emisión frontal, en este caso las partículas de 62 μ m se asientan en el fondo, lo que no sucedió en el análisis para la descarga frontal; la disposición de los sedimentos en el fondo es muy parecida para los diámetros de 62 y 500 μ m como se puede ver en la figura 4.81, en esta misma figura, se marca con letras la ubicación de los perfiles de concentración. Los perfiles de concentración se presentan en las figuras 4.82 y 4.83, comparándolos se tiene que los perfiles para partículas de 500 μ m, tiene valores de concentración mas altos cerca al fondo que los perfiles de 62 μ m, auque en general sus formas son parecidas.



Figura 4.81: Partículas sedimentadas en el fondo (descarga lateral); (*i*) diámetro de 62 μ m, (*ii*) diámetro de 500 μ m.



Figura 4.82: Perfil de concentraciones para partículas de 62 μ m de diámetro, obtenidas para la descarga lateral.



Figura 4.83: Perfil de concentraciones para partículas de 500 μ m de diámetro, obtenidas para la descarga lateral.

Capitulo 5 Aplicación al crecimiento de microorganismos

5.1 Introducción

En este capitulo se describen dos modelos para el crecimiento de poblaciones; los modelos consideran la evolución del tamaño de una población, en función del tiempo y del nacimiento-mortandad de individuos. La clasificación de los microorganismos es variada y compleja, y para cada especie existen formas diferentes del crecimiento de poblaciones; en lo siguiente se hace referencia a comunidades de bacterias, que son de gran interés ambiental en lagos y ríos. Los modelos para el crecimiento de poblaciones, representan posibles aplicaciones de casos reales, en tanto se demarquen con cuidado sus condiciones iniciales y de frontera.

Los modelos a estudiar son: (a) el modelo de crecimiento ilimitado, sin limite de crecimiento en el tiempo y (b) el modelo de crecimiento logístico, con crecimiento limitado en el tiempo, debido a factores medioambientales; a diferencia de lo que se pueda encontrar en la literatura, a estos modelos se le agrega un efecto adicional, que es el movimiento producido por corrientes hidrodinámicas que actúa sobre las comunidades de bacterias. La muestra en estudio esta formada por todas las partículas que se sedimentaron en el fondo del canal después de una simulación numérica, tal como se trató en el capitulo cuatro.

5.2 Principales grupos de organismos

Los principales grupos de organismos que conforman los diversos ecosistemas naturales, tales como ríos y lagos, y también ecosistemas artificiales como son rellenos sanitarios y plantas de tratamiento de aguas residuales, con mayor interés ambiental son: los virus, las bacterias, las algas, los hongos, los protozoarios, los rotíferos, los micro crustáceos, las macrofitas, los macro invertebrados y los peces.

Virus: Son partículas submicroscopicas, cuyo tamaño va de $0.02 \ \mu m a 0.3 \ \mu m$, no son organismos celulares, poseen un único núcleo ácido que puede ser un ADN o un ARN, mas una cubierta de proteína. La principal característica de esta forma de vida, es que no se sostienen por si solas, son organismos parásitos, requieren siempre de un hospedante, del que obtienen proteínas y energía para vivir. Todos las clases de virus son patógenos y causan enfermedades, comúnmente en el agua se encuentra a la hepatitis, polio y gastroenteritis.

Bacterias: son microorganismos con estructuras celulares primitivas, su tamaño va de 0.1 μ m a 10 μ m, se reproducen por fisión (división), su metabolismo es el mas variado de todos los reinos animales, ellos pueden ser aeróbicos, anaeróbicos, fotosintéticos, quimo sintéticos y algunos otros son heterótrofos; muchas de las bacterias son patógenas y causan diversas enfermedades, en el agua la mas común es el cólera y la tifoidea.

Algas: son organismos unicelulares o multicelulares, los primeros van de 1 a 100 μ m de tamaño y por su estructura celular (unicelulares) pertenecen al reino protista, mientras que los multicelulares pueden alcanzar hasta varios metros de altura y pertenecen al reino de las plantas. Son fotosintéticos y contienen clorofila, su reproducción es asexual (división simple sin intercambio de material genético). Las algas llevan acabo una importante función en los ciclos de la materia y la energía dentro de los ecosistemas, ellas juntas a alas macrofitas son las principales generadoras de materia orgánica en lagos y estanques.

Hongos: Son organismos heterotróficos con paredes celulares rígidas; algunos son unicelulares, como las levaduras y otras multicelulares como los mohos; su tamaño va de unas pocas μ m a varios cm; carecen de clorofila y se alimentan por absorción a través de su pared celular y su membrana celular, casi todos los hongos son aeróbicos, y son reconocidos por su gran capacidad para descomponer la materia, a su ves son causantes de muchas enfermedades.

Protozoarios: Son organismos unicelulares que van de 10 a 300 μ m, son heterótrofos y se les conoce por ser predadores activos, que flotando o nadando sobre el agua devoran a bacterias, pequeñas algas y otros protozoarios, en

algunos casos se considera a los protozoarios como limitantes del crecimiento de algas, por ser depredadores de estas, y se les emplea en el tratamiento de lodos y otros medios contaminados en el ambiente. Su forma de reproducción es asexual o sexual.

Rotíferos: Son animales microscópicos cuyo tamaño va de 100 a 1000 μ m, su peculiar forma, compuesta por cilios o anillos, le permiten facilitar su movimiento, como también atrapar a su alimento; su forma de alimentarse consiste en la ingestión de partículas vivas y muertas, luego las excretan en forma de materia orgánica soluble útil para alimentar a los hongos y bacterias, por esto se emplea a los rotíferos para reciclar energía y material en las plantas de tratamiento de aguas residuales y en los sistemas naturales.

Micro crustáceos: son de tamaño microscópicos, sus dimensiones va de 1 a 10 mm, son parientes de los cangrejos, langostas y camarones, se alimentan de bacterias, algas y otras partículas en los lagos. Los micro crustáceos constituyen un elemento importante dentro de la cadena trófica de los sistemas naturales y junto a los protozoarios y rotíferos forman lo que se llaman el zooplancton, que por si solos no son capaces de desplazarse y mas bien requieren de una corriente o un remolino para transportarse.

Macrofitas: Son aquellas plantas basculares grandes, que pueden crecer sumergidas, flotando o emergiendo dentro del ambiente de lagos o ríos. Las macrofitas al igual que otros organismos constituyen parte de un ecosistema, ellos son capaces de proporcionar hábitat importantes; su presencia en abundancia constituye un problema en lagos y ríos ricos en nutrientes, lo que crea un problema en el uso recreativo y afectan negativamente, disminuyendo el oxigeno disuelto presente.

Macro invertebrados: Se les conoce así a los animales que carecen de espina dorsal, entre ellos tenemos a los gusanos, almejas, caracoles y las primeras etapas de los insectos, es común encontrarlos en el lodo de los fondos de los lagos y ríos. Son importantes en el tratamiento de materia orgánica muerta en los ecosistemas acuáticos y son una fuente importante de alimento para peces. Su poca movilidad les hace muy sensibles a las perturbaciones del medio ambiente, siendo ellos uno de los primeros organismos en desaparecer, por lo que se les puede tomar como indicadores de la calidad de vida en el medio ambiente.



Figura 5.1: Principales grupos de organismos: (a) vírus, (b) bacterias, (c) hongos, (d) algas, (e) macrofitas, (f) protozoarios, (g) rotíferos, (h) microcrustaceos, (i) macroinvertebrados y (j) peces.

Peces: La variedad de peces es mucha, y su influencia en el ambiente es también notoria; los peces tienen la capacidad de bioconcentrar compuestos químicos hidrófobos y mercurio en sus tejidos, que son componentes tóxicos para los seres humanos y otros animales que se alimentan de ellos. Es muy común asociar la calidad de las aguas en función a la presencia de peces, pero como se explico en el capitulo dos, los peces solo son un elemento del ecosistema, como cualquier otro, que cumple con una función especifica, en realidad la desaparición de peces es por así decirlo, el ultimo elemento o uno de los últimos elementos del ecosistema vivo.

5.3 Las partículas depositadas en el fondo

Las partículas que quedaron depositadas en el fondo del estanque, tanto en el caso de la descarga frontal como para el caso de la descarga lateral, representan a sedimentos que pueden estar compuestos por diversos elementos, algunos pueden ser nutrientes otros pueden ser materia inerte y también podrían tratarse de organismos vivos.

Para desarrollar el modelo de crecimiento de microorganismos, asumiremos que las partículas depositadas en el fondo representan a una comunidad de bacterias, que habitan sobre un dominio finito. La forma de la disposición de las partículas es función directa de las corrientes hidrodinámicas que actúan sobre ellas y para explicar estas formas de fondo, observemos las figuras 5.2 y 5.3, allí se presentan la disposición de las partículas en el fondo y las líneas de corriente también sobre el fondo; comparando los figuras 5.2a y 5.2b, notamos que para una descarga frontal, las partículas tienden a acumularse en el sentido de las corrientes, lo mismo ocurre para la descarga frontal, al comparar las figuras 5.3a y 5.3b, se aprecia la gran influencia de las corrientes hidrodinámicas sobre la disposición de las partículas en el fondo, tendiendo a acumularlas o a moverlas hasta sacarlas fuera del dominio; este efecto de acumulación y movimiento continuo, es un factor muy importante en el crecimiento de microorganismos; como ya veremos mas adelante, existen características ambientales que pueden afectar al tamaño de las poblaciones, entre ellas la densidad.

Las partículas depositadas en el fondo y que representan a las poblaciones de bacterias, que serán sometidas a la aplicación de los modelos de crecimiento de microorganismos, son analizados considerando los mismos casos realizados para el movimiento de partículas (ver capitulo cuatro) y son: (a) el crecimiento de microorganismos para corrientes hidrodinámicas producidas por una descarga frontal, con diámetro de partícula igual a 500 μ m, y (b) el crecimiento de microorganismos para corrientes hidrodinámicas producidas por una descarga lateral, con partículas de 62 μ m de diámetro.



Figura 5.2: Influencia de las corrientes en la disposición de las partículas sobre el fondo [ingreso frontal], (a) componente U de la velocidad, (b) líneas de corriente y (c) partículas sedimentadas en el fondo, $\phi p=500 \mu m$.



Figura 5.3: Influencia de las corrientes en la disposición de las partículas sobre el fondo, (a) campo v_T en el fondo, (b) líneas de corrientes y (c) partículas sedimentadas en el fondo, ϕp =500 μ m.

5.4 Características de las poblaciones

Las características que definen a una población esta dada por su tamaño, densidad, dispersión y estructura de su edad. La capacidad de sobrevivir de una población se vera afectada por su tamaño, como ejemplo en el caso de mamíferos se puede citar al lince o chita, que genéticamente están condenadas a desaparecer, debido a la pequeña cantidad de individuos que existen en su especie, los apareamientos entre linces parientes, tienden a acumular genes defectuosos y son cada vez mas propensos a enfermedades y malformaciones; por otro lado las especies con pequeñas poblaciones pueden desaparecer súbitamente por el efecto de catástrofes como inundaciones y cambio del clima; el efecto contrario a las poblaciones pequeñas, es que cuando las poblaciones son muy grandes, se enfrentan a problemas de suficiencia alimenticia y espacio. La densidad de la poblaciones es función del espacio y del tiempo, así como del comportamiento de los individuos que la conforman; la densidad también afecta a la capacidad de sobre vivencia, tal es el caso que cuando las densidades son altas existen mayor propensión a las enfermedades. La dispersión de la población es la forma de cómo los individuos se encuentran dispuestas en su hábitat; un patrón de dispersión muy común es el agrupamiento, y es menos frecuente encontrar individuos dispersos al azar; la dispersión en términos prácticos es una respuesta a los cambios estaciónales y condiciones del hábitat. La estructura de la edad es importante por que nos sirve para clasificar a los individuos, en edades pre reproductivas, reproductivas y pos reproductivas, una comunidad con un alto índice de individuos en la edad pre reproductiva y reproductiva posee un gran potencial de crecimiento. Es de notar que las poblaciones están sujetas a los cambios ambientales, que pueden ser capaces de afectar a las características arriba descritas, los efectos de estos cambios ambientales sobre las características de las poblaciones son a lo que llamamos dinámica poblacional.

5.5 Modelos de crecimiento poblacional

Los modelos de crecimiento poblacional, se sustentan en la ecuación de balance de materia sobre la biomasa, tal como se explico en el capitulo dos, en el sub capitulo de balance de masa, ahora la podemos expresar como:

$$V\frac{dB}{dt} = QB_{i} - QB_{s} \pm \Gamma_{C}$$
 (5.1)

Donde:

|--|

- V : Volumen de control.
- Q : Gasto o caudal sobre el sistema.
- Γ_{C} : Termino de creación destrucción.

La reacción describe los procesos de creación destrucción que ocurren sobre el sistema en estudio, en este caso se trata de muerte y nacimientos, para nuestros fines podemos despreciar el gasto, con esto simplificamos el modelo, sin afectar nuestras condiciones de estudio ya que solo analizaremos las partículas que quedaron depositadas en el fondo del estanque o canal, sin volverlo a alimentar de partículas hasta que ocurra otro intervalo de tiempo, el efecto del gasto se vera representado por el movimiento del fondo, bajo los efectos de las corrientes que allí se encuentren así como los efectos de los esfuerzos cortantes sobre el fondo, que definen el movimiento, como se explico en el capitulo cuatro; después de la simplificación del gasto igualado a cero, nuestra ecuación se puede escribir:

$$V\frac{dB}{dt} = VkB \qquad (5.2)$$

En la ecuación (5.2), k es un coeficiente de velocidad, que representa la frecuencia de la creación destrucción en nuestro modelo, si queremos representar el crecimiento de una población, el termino VkB debe de ser positivo, deberá de ser negativo cuando la población tienda a la extinción, para simplificar mas la ecuación (5.2), podemos prescindir del termino V teniendo como resultado la ecuación:

$$\frac{\mathrm{dB}}{\mathrm{dt}} = \mathrm{kB} \tag{5.3}$$

La ecuación (5.3) es útil para simular modelo simples, tales como el modelo de crecimiento ilimitado y el modelo de crecimiento limitado, que a continuación se describen.

5.5.1 Crecimiento exponencial o ilimitado

El crecimiento poblacional de muchos organismos, que van desde microorganismos a los seres humanos, se describe mediante una expresión simple denominada modelo del crecimiento exponencial, que se puede escribir de la misma forma que la ecuación (5.3), donde k representa la tasa especifica de crecimiento (t-1), que de ahora en adelante la denotaremos como μ_k , integrando a la ecuación (5.3) obtenemos :

$$B_{t} = B_{0} e^{(\mu_{k} t)}$$
(5.4)

Que seria la ecuación que representa al crecimiento exponencial, donde B_t es la biomasa en un tiempo dado t, y B_0 es la biomasa inicial.

Para condiciones en que el crecimiento es la única variable, planteamos a continuación el modelo del crecimiento, para las partículas que quedaron atrapadas en el fondo del estanque, para cuando el ingreso es frontal.

El problema esta definido por las partículas depositadas en el fondo del estanque, que este caso serian bacterias; el diámetro de las partículas es de 300 µm, y el numero de ellas al inicio de la simulación es de 26 182 (B_0), asumiendo una tasa de crecimiento μ_k = 2.08, determinaremos la cantidad total de bacterias (partículas) para un tiempo total de 1 hora. Reemplazando en la ecuación (5.4), obtenemos la expresión matemática para la evolución del crecimiento, que se puede escribir como:

$$B_{t} = 26182e^{(2.08t)}$$
 (5.5)

El valor de μ_k =2.08, corresponde a una tasa de crecimiento que nos permite duplicar el tamaño de una población, este valor es característica para cada tipo de especie, pudiendo ser muy diferente al valor asumido, según sea el comportamiento de la población; por ejemplo una población en el que sus individuos se reproduzcan mas rápidamente de lo que mueren, el valor de μ_k , tiende a ser mayor a uno y conforme se va acercando a uno, la población tiende a tener un crecimiento muy lento; cuando el valor de μ_k , es negativo, indica que la población tiende a disminuir. El resultado de la evolución en el tiempo, para el crecimiento de microorganismos se presentan en las figuras 5.4 y 5.5.



Figura 5.4: Crecimiento de poblaciones para un grupo de microorganismos, que quedaron depositados en el fondo de un estanque, para una tasa de crecimiento $\mu_k=2.08$.



Figura 5.5: Crecimiento de poblaciones para un grupo de microorganismos, que quedaron depositados en el fondo de un estanque; para diferentes tasas de crecimiento μ_k .

El mismo problema anterior se simula, para el caso en que existen corrientes en el fondo, que contribuyan al movimiento de las partículas, tal como seria el caso de un sistema dinámico; los resultados se presentan en la figura 5.6.



Figura 5.6: Crecimiento de poblaciones para un grupo de microorganismos, que quedaron depositados en el fondo de un estanque y están sometidas al movimiento con una tasa de crecimiento $\mu_k=2.08$.



Figura 5.7: Disposición espacial de una comunidad de microorganismos [ingreso frontal], (a) para un tiempo inicial t=0, (b) sistema estático y (c) sistema dinámico.

La diferencia entre un sistema estático y uno dinámico, como los que se presentan en las figuras 5.4 y 5.6, no esta en el tamaño de sus poblaciones, sino en su disposición espacial; aunque ambos sistemas poseen la misma ecuación para el crecimiento, el hecho de existir un movimiento continuo produce una nueva disposición espacial de las comunidades; el sistema dinámico presenta 5 zonas de agrupamiento, ver figura 5.7 (c) y el sistema estático mantiene siempre su misma disposición espacial, ver figura 5.7 (b); conocer la disposición espacial es importante, cuando la característica de densidad de población, es un limitante para el crecimiento (capacidad de carga). Por ahora este trabajo no profundiza en el análisis de los limitantes al crecimiento, sino mas bien trata de acoplar el sentido que tiene la hidrodinámica en el crecimiento de las poblaciones.

5.5.2 Crecimiento logístico: el efecto de la capacidad de carga

No siempre es útil el empleo de los modelos de crecimiento ilimitado, debido a que al cabo de un tiempo prolongado, el número de individuos llega a ser muy alto, esto por el crecimiento de tipo exponencial, el crecimiento es ilimitado por que no existen limites sobre la biomasa. El modelo de crecimiento logístico, proporciona una idea mas clara de cómo puede comportarse un determinado sistema, ya que en la naturaleza existen límites para el crecimiento, a esto se le puede llamar la capacidad de carga o de soporte del ambiente. El sentido de la capacidad de carga estará restringido al máximo numero de individuos o al máximo valor de la biomasa que pueda existir bajo el efecto de una resistencia en el ambiente, ver la figura 5.8.



Figura 5.8: Curva de crecimiento de una población, influenciada por su capacidad de carga, (a) modelo de crecimiento limitado y (b) modelo de crecimiento limitado natural.

La resistencia en la naturaleza esta asociada a los recursos renovables (alimentos) y recursos no renovables (espacio), en la figura 5.8b se tiene una forma de crecimiento natural afectada por un limite de carga, el exceso y la mortandad ocurren cuando una población que crece rápidamente, sobrepasa temporalmente a la capacidad de sostenimiento de su ambiente, o cuando un cambio en las condiciones ambientales disminuye esa capacidad de sostenimiento, esto genera una caída brusca del crecimiento, provocando también daños a la capacidad de sostenimiento de una área.

La aplicación del modelo se desarrollara sobre la limitación de un recurso no renovable, con efectos sobre el crecimiento de las poblaciones, para esto tenemos que modificar la tasa máxima de crecimiento μ_{kmax} , de este modo involucraremos el efectos de la capacidad de carga, donde la tasa de crecimiento se puede escribir como:

$$\mu_{k} = \mu_{kmax} \left(1 - \frac{B}{K} \right) \tag{5.6}$$

Donde:

 μ_{kmax} : Tasa máxima de crecimiento específico (t⁻¹)

B : Biomasa

K : Capacidad de carga (Máxima biomasa sostenible de la población)

Reemplazando μ_k de la ecuación (5.6) en lugar de k, en la ecuación (5.3), obtenemos el modelo exponencial de crecimiento logístico, que se escribir:

$$\frac{dB}{dt} = \mu_{kmax} \left(1 - \frac{B}{K} \right) B \qquad (5.7)$$

Integrando la ecuación (5.7), se obtiene la expresión para el modelo de crecimiento logístico, que se escribe:

$$B_{t} = \frac{K}{1 + \left[\left(\frac{K - B_{0}}{B_{0}}\right)\right]} e^{\left(-\mu_{kmax}t\right)}$$
(5.8)

Incluyendo un limite al crecimiento por efectos de capacidad de carga del ambiente, nos proponemos a modelar el problema anterior, para aquellas partículas que quedaron atrapadas en el fondo del estanque.
El numero de bacterias a simular es 26 182 (B₀), asumiendo una tasa de crecimiento μ_k = 2.08, con capacidad de carga K=150 000, determinaremos la cantidad total de bacterias (partículas) para un tiempo total de 1 hora. Reemplazando la ecuación (5.8) nos queda:

$$B_{t} = \frac{150000}{1 + 4.729e^{(-2.08t)}}$$
(5.9)

La evolución en el tiempo del crecimiento de poblaciones, empleando un modelo de crecimiento logístico se da en la figura 5.9 y su comparación con un modelo de crecimiento ilimitado se da en la figura 5.10.



Figura 5.9: Crecimiento de poblaciones (modelo logístico), para una comunidad de microorganismos depositados en el fondo de un canal.



Figura 5.10: Comparación del crecimiento de poblaciones, empleando modelos de crecimiento limitado y modelo de crecimiento logístico.

Nótese que los modelos de crecimiento logístico no sobrepasan su capacidad de carga, esto se debe a que la tasa especifica de crecimiento μ_k , va cambiando en el tiempo, tal como se desprende de la ecuación (5.6), con esto se logra limitar el crecimiento; la tasa de crecimiento usada en el modelo descrito, es un expresión sencilla, pudiendo ser mas compleja si se incluyeran en ella parámetros mas elaborados relacionadas a las características de los ecosistemas.

La dinámica del movimiento descrita en el capitulo cuatro, nos hace comprender el sentido de la capacidad de carga para cuando un ecosistema se encuentra influenciado por corrientes, como es el caso de las partículas que quedan depositadas en el fondo, para comparar la diferencia emplearemos un modelo de crecimiento ilimitado estático, es decir la comunidad permanece creciendo sobre su mismo espacio y otro modelo también de crecimiento ilimitado pero la comunidad de bacterias se ve influenciada por las corrientes de fondo del estanque donde se encuentran, como se ve en la figura 5.11, aunque ambas curvas tengan un crecimiento exponencial, nótese que el crecimiento de poblaciones es diferente.

En la figura 5.11a, se presenta el estado inicial para la modelación del crecimiento de microorganismos, allí se tienen a todas las bacterias que se encuentran en el fondo en la figura 5.11b se presenta la simulación de las bacterias que quedan en el fondo, en esta simulación solo interviene la tasa de crecimiento, por lo que la llamaremos estática y finalmente en la figura 5.11c, se presenta la simulación del crecimiento de poblaciones haciendo intervenir el movimiento por efecto de las corrientes en el fondo, a este sistema le llamaremos dinámico, nótese que después de la simulación, la disposición de las bacterias es diferente a cuando el estado es estático; comparando los dos sistemas, apreciamos que sobre el sistema dinámico existe una mayor concentración de bacterias en una región de 5 puntos, esto provoca un aumento de la densidad de las poblaciones; otro efecto producido por el movimiento en el sistema dinámico, es que muchas bacterias han salido de nuestro dominio, disminuyendo el tamaño de la población casi a la mitad del tamaño de la población para un sistema estático; aunque los dos sistemas han empleado la misma tasa de crecimiento μ_{k} , el tamaño de la población es muy diferente, la comparación se puede ver en la figura 5.12.



Figura 5.11: Disposición espacial de una comunidad de microorganismos [descarga lateral] (a) para un tiempo inicial t=0, (b) sistema estático y (c) sistema dinámico.



Figura 5.12: Comparación del modelo de crecimiento ilimitado, (a) sistema estático y (b) sistema dinámico.

5.6 Sembrado en la malla de fondo

En lo que sigue de este sub capitulo analizaremos el comportamiento de las bacterias (partículas), que previamente han sido sembradas en el fondo y que han sido distribuidas en una malla homogénea, como se ve en la figura 5.13; las partículas sembradas son afectadas por las corrientes producidas por una descarga frontal y por una descarga lateral, tal como fue el desarrollo para el sembrado de partículas; nos interesa determinar las tendencias del movimiento en el fondo y la influencia que puedan tener en el crecimiento de poblaciones.



Figura 5.13: Condición inicial del sembrado de partículas en el fondo.

5.6.1 Descarga frontal

Para el caso del ingreso frontal, la malla de partículas sembradas en el fondo corresponden a partículas de 62 μ m de diámetro, después de una simulación de una hora y con un paso de tiempo de 0.001 s, vemos que todas las partículas fueron movidas, como se ve en la figura 5.14.



Figura 5.14: Movimiento de partículas sembradas en el fondo, afectadas por las corrientes del ingreso frontal, (a) tridimensional, (b) plano xy, (c) plano xz y (d) plano yz.

La disposición final de las partículas que se presentan en la figura 5.14, se explican por que el diámetro empleado para la simulación es muy pequeño, donde la influencia de su velocidad de caída es casi nula, funcionando como una trazador del flujo; los campos de velocidades y turbulentos actuantes en el fondo se ven en la figura 5.15.



(a)

(b)



(c)

(d)



Figura 5.15: Componentes de las velocidades y campos turbulentos sobre el fondo, (a) campo v_T , (b) correlación doble \overline{uw} , (c) correlación doble \overline{vw} , (d) componente U, (e) componente V y (f) componente W.

5.6.2 Descarga lateral

El diámetro de la partículas sembrada en el fondo es de 62 μ m, y después de una simulación de una hora, las partículas quedan dispuestas de la forma en que se presenta en la figura 5.16; el comportamiento para este tipo de descarga es muy diferente que para el caso de la descarga frontal; en el caso de descarga lateral, se tienen mas partículas retenidas sobre las paredes y también se nota resuspensión, por la poca influencia de la velocidad de caída de las partículas.



Figura 5.16: Movimiento de partículas sembradas en el fondo, afectadas por las corrientes del ingreso lateral, (a) tridimensional, (b) plano *xy*, (c) plano *xz* y (d) plano *yz*.

La disposición final de las partículas que se presentan en la figura 5.4, concuerdan con las estructuras de los campos de velocidades y turbulentos que se producen en el fondo, tal como se vio en el capitulo cuatro.

Capitulo 6 Conclusiones y Perspectivas

5.1 Conclusiones

El empleo del modelo hidrodinámico, proporciono componentes de viscosidad turbulenta y correlaciones dobles, esos componentes fueron empleados para el movimiento de las partículas.

La simulación del movimiento de partículas para el ingreso frontal, fue realizada con partículas de 62, 100, 200, 300 y 500 μ m, de las cuales, sólo las partículas de 62 y 100 μ m, permanecieron siempre en suspensión sin depositarse en el fondo.

El ingreso lateral se simulo con partículas de 62 y 500 μ m, para ambos diámetros se presenta asentamientos en el fondo del canal.

La forma de los asentamientos en el fondo, para el ingreso frontal y lateral, esta fuertemente influenciada por las corrientes dinámicas que se producen en el fondo, así como de su condición de frontera que posee una función de probabilidad para la resuspensión.

El efecto del movimiento producido por la dispersión turbulenta, están representados adecuadamente por el empleo de campos de viscosidad turbulenta, dichos campos permiten que el movimiento sea en función de la intensidad turbulenta y que las magnitudes del desplazamiento de partículas, estén acorde con los mecanismos de movimiento en flujos a superficie libre.

Los modelos para el movimiento de partículas, que consideran dispersión (turbulenta), mediante el uso de coeficientes constantes, presentan limitantes en el control del movimiento, debido a que un coeficiente constante genera una misma intensidad de movimiento en todo el dominio de estudio, llegando en algunos casos a superar la magnitud del desplazamiento principal (movimiento advectivo).

La simulación para el crecimiento de microorganismos, que toma en cuenta la influencia de las corrientes hidrodinámicas en el fondo, provoca cambios importantes en la disposición espacial de los microorganismos, debido a que las corrientes hidrodinámicas los mueven y los acumulan en determinadas zonas del dominio, esto influye directamente en la densidad de las poblaciones e indirectamente representan un limitante ambiental.

El crecimiento de las poblaciones, influenciada por corrientes hidrodinámicas en el fondo, producidas por una descarga frontal, poseen una mayor densidad poblacional, debido a que los individuos no son expulsados del dominio sino mas bien concentrados en determinadas zonas; para el caso de la descarga lateral, las corrientes hidrodinámicas en el fondo, expulsan muchos individuos del dominio, y aunque también se aprecia un aumento en la densidad poblacional, esta se da en menor grado que en el caso de la descarga frontal.

Las simulaciones realizadas, considerando un sembrado continuo y homogéneo en el fondo del canal, y para partículas de 62 µm de diámetro, muestran una intensa actividad de las corrientes en el fondo.

5.2 Perspectivas

La integración de modelos euleriano-lagrangeanos esta siendo utilizada hoy en día para estudiar diversos problemas de interés técnico y científico, tales como la dispersión de contaminantes en la atmósfera, descargas atmosféricas accidentales (Ávila, 1997), en problemas de socavación para la formación de estructuras de fondo en canales y el mar. Así mismo son utilizadas con ventajas en problemas relacionados con liberación de contaminantes en un sistema dinámico, como en el caso de derrames de petróleo, en donde a través de la aplicación de estos modelos se han logrado reproducir las trayectorias de tales derrames.

Se pueden simular el movimiento de partículas en suspensión, en sistemas fluviales, lacustres y mares, teniendo en cuenta que cada sistema debe de contar con un campo hidrodinámico, condiciones de fronteras adecuadas al problema que se desea estudiar y características especificas de las partículas que se desean transportar.

Se deben de realizar estudios mas detallados de la relación que existe entre los parámetros turbulentos en el fondo (correlaciones dobles $\overline{u_i w}$)y los mecanismos de resuspensión sedimentación.

El modelo puede servir para aplicaciones bioquímicas y biofísicas, para simular efectos producidos por la interrelación entre las partículas, tales como choques elásticos o inelásticos de partículas, reacciones químicas con la sustancias que la transportan, tiempo de vida de los organismos que viajan adheridas a las partículas y algunos efectos físicos como la influencia de la capa limite, repulsión magnética, movimiento browniano, perdidas de energía interna, y muchos otros; el análisis se puede realizar para las partículas que van en suspensión, para las partículas que quedan atrapadas en el fondo y de ser el caso para las partículas que se encuentran moviéndose sobre el fondo.

Para el modelo de ecosistemas simples, se puede hacer influir muchas más variables de las que consideramos en este trabajo; esas variables pueden ser la temperatura, la reacción de sustancias como el OD, la DBO, los N_{org} y algunas otras variables que estén ligadas a algún proceso o función del ecosistema que se pretende simular; aunque modelar un ecosistemas es complejo, se pueden realizar aplicaciones para ecosistemas simples, que incluso pueden ser artificial, donde podamos conocer y controlar muchas de sus variables, un ejemplo de ello puede son las lagunas de tratamiento de aguas servidas.

El modelo desarrollado en este trabajo puede ser adaptado para representar mecanismos de erosión, sedimentación y transporte de fondo, el que puede inclusive simular diferentes diámetros de partículas. Existen muchas formulaciones para condiciones de frontera, que representan a la erosión o a la sedimentación, por eso es importante definir para cada caso específico, condiciones adecuadas de frontera. Como se explicó en el capitulo tres, la función de probabilidad para la resuspensión se obtiene de la comparación entre los esfuerzos cortantes actuantes y los esfuerzos cortantes críticos para el inicio del movimiento de partículas (ec. 3.12), adicionalmente al valor encontrado para la probabilidad de resuspensión, se asume con criterio empírico que dicha probabilidad debe de ser mayor o igual al 90%, con esto se logra mover a las partículas casi siempre; así mismo se consideró que si la partícula no era resuspendida, esta seguía moviéndose sobre la frontera de la subcapa laminar. Los resultados de la simulación del movimiento de partículas se muestran en el capitulo cuatro, allí se notan las formas que presentan las partículas al asentarse en el fondo, siendo que la forma del asentamiento depende del diámetro de la

partícula. Con la sugerencia del profesor Maza, jurado de este trabajo de tesis, se opto por probar una condición de frontera en el fondo, diferente al empleado en este trabajo; la nueva condición de frontera, considera que la resuspensión esta directamente asociada a su función de probabilidad, si la probabilidad de resuspensión es nula, la partícula no se mueve en ningún sentido, ni mucho menos se resuspende. Los resultados de la condición de frontera empleadas en este trabajo (tipo I) son comprados con los resultados obtenidos por el empleo de la nueva condición de frontera (tipo II) y se ven en la figura 6.1 y 6.2, aunque la disposición espacial parece ser semejante, la diferencia esta en el número de partículas que quedan sedimentadas, siendo del orden del 7% mayor a favor de la condición de frontera tipo II, esto se debe a que los esfuerzos cortantes actuantes sobre la frontera de la subcapa laminar, no son mayores a los esfuerzos cortantes críticos para el inicio del movimiento, siendo siempre la probabilidad de resuspensión igual a cero.



Figura 6.1: Simulación numérica para el ingreso frontal, diámetro de la partícula 500 μ m, (a) vista tridimensional, (b) plano *xy*, (c) plano *xz* y (d) plano *yz*. de la Condición de frontera tipo I.



Figura 6.2: Simulación numérica para el ingreso frontal, diámetro de la partícula 500 μ m, (a) vista tridimensional, (b) plano *xy*, (c) plano *xz* y (d) plano *yz*. Condición de frontera tipo II.

Bibliografía

- Aldama, A. (2001). Apuntes de clase, materia Mecánica de Fluidos. División de estudios de postgrado de la facultad de ingeniería de la UNAM. Cuernavaca México.
- Ames, W. (1992). Numerical Methods for Partial Differential Equations. Ed. Academic Press. San Diego USA.
- Ávila, R. (1997). Simulación numérica de la dispersión de una nube de partículas sólidas liberada a la atmósfera. Tesis doctoral, División de Estudios de Postgrado de la Facultad de Ingeniería, UNAM. DF, México.
- Baquero, R. And Tellería J. (2001). Species richness, rarity and endemicity of European mammals: a biogeographical approach. Kluwer Academic Publishers, Netherlands.
- Casulli, V. and Cheng R. (1992). Semi-Implicit Finite Difference Methods for Three-Dimensional Shallow Water Flow. International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 15, 629-648. EEUU-Italy.
- Chow, V., (1995). Hidráulica de Canales Abiertos. Ed. Mc Graw-Hill. Bogotá, Colombia.
- Christon J. Hurst (1999). Modeling the Environmental Fate of Microorganisms. Ed. American Society for Microbiology. Washington DC, USA.
- Comité Español de Grandes Presas (1989). Control de Sedimentación de los Embalses. Ed. CIGB ICOLD CNE. Madrid, España.
- Costanza, R., Arge R., Groost, R. and Farber S. (1997). The value of the world's ecosystem services and natural capital. Nature, Vol 387, USA.
- Daly, B. and Harlow J. (1981). Dinámica de los fluidos con aplicaciones en la ingeniería. Ed. Trillas, primera reimpresión México.
- De Miguel, J. y Valladares, M. (1994). Diversidad Biológica, propuestas del WWF España (ADENA) para el diseño de una estrategia de conservación de biodiversidad. WWW España, Consejo Asesor del Medio Ambiente.

Díaz, F. (2000). Ecosistemas y biodiversidad. Espasa Calpe. Madrid, España.

- González, M. y García, D. (1998). Restauración de Ríos y Riberas. Ediciones Mundi-Prensa, Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Montes. Madrid España.
- Huston, M. (1979). A General Hipótesis of Species Diversity. Division of Biological Sciences, University of Michigan. The American Naturalist, vol 113, Nº 1.
- Johnson, K., Vogt K., Clark H., Schmitz, O. and Vogt, D. (1996). Biodiversity and productivity and stability of ecosystems. Elsevier Science Ltd. TREE vol 11. N°9
- Jorgensen, S. and Vollenweider, R. (1988). Principios Generales sobre Gestión de Lagos, Comité Internacional de Ambientes Lacustres, Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente.
- Kaftori, D. (1993). Structures in the Turbulent Boundary Layer and their Interaction with Particles. Tesis de doctorado de la Universidad de California, Santa Barbara EEUU.
- Launder, B. E. and Spalding, D. B. (1972). Lectures in mathematical models of turbulence. Academic Press. London and New York.
- Launder, B. E. and Spalding, D. B. (1974). The numerical computations of turbulent flows. Comp. Meth. In Appl. Mech. And Eng., 3:269-289.
- Margalef, R. (1990). La diversidad biológica y su evolución. Universidad de Barcelona.
- Margalef, R. (1991). Reflexiones sobre la diversidad y significado de su expresión cuantitativa. Universidad de Barcelona España.
- Matheja, A. (2000). Sediment Transport Using the Random Walk Method on Top of CORBA. Franzius-Institute for Hydraulic, Waterways and Coastal Engineering. University of Hannover, Germany.
- Mayo, W. and Cwiakala, M. (1995). Theory and Problems of Programing whith Fortran 90. Ed. Mc Graw-Hill. New York, USA.
- Mihelcic, J. (2001). Fundamentos de la Ingeniería Ambiental. Ed. LIMUSA WILEY. Toronto, Canadá.
- Maza, J. y García M. (1984). Hidrodinámica bases para la hidráulica fluvial. Series del Instituto de Ingeniería Nº D-20. México, México.

- Millán, C. (1999). Estudio de los Efectos turbulentos en el Fondo de un Canal, mediante un Modelo Numérico de Turbulencia κ-ε, en tres dimensiones. Tesis de Maestría, Facultad de Ingeniería UNAM, México.
- Mutlusumer, B. and Muller, A. (1983). Mechanics of Sediments Transport. Ed. A.A. Balkema. Rotterdam, Netherlands.
- Okubo, A. (1980). Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models. Ed. Springer-Verlag. Berlin Heidelberg, Germany.
- Ramírez, H. (2001). Apuntes de clase, materia Hidráulica Computacional. División de estudios de postgrado de la facultad de ingeniería de la UNAM. Cuernavaca México.
- Ramírez, H. (2003). Física y modelación de la turbulencia. A editarse
- Reid, W. (1998). Biodiversity hotspots. Elsevier Science Ltd. TREE vol 13 Nº 7.
- Rodi, W. (1980). Turbulence models for environmental problems. In Prediction Methods for Turbulence Flows, pages 259-349. ed. W. Kollmann, Hemisphere Publ. Co.
- Secretaria de Agricultura y recurso Hidráulicos (1977). Metodología para determinar las constantes de desoxigenación, remoción de DBO y reoxigenación en una corriente. Subsecretaria de Planeación dirección general de protección y ordenación ecológica. México DF.
- Sharif, A. (2000). Sediment Dynamics Involving Bed Sediments in Open Channel Flows, Factors Affecting Transport of Sorbed Contaminants: Erosion Rate and Particle Residence Time. *Internet*.
- Simberloff, D. (1998). Flagships, umbrellas, and keystones: in single-species management passé in the landscape era?. Department of biological science, Florida State University. Biological Conservation vol 83 N° 3.
- Tyler Miller, G. (1994). Ecología y Medio Ambiente. Grupo Editorial Iberoamerica, México DF.
- Van Rijn, L. (1993). Principles of Sediments Transport in River, Estuaries and Coastal Seas. Ed. Aqua Publications. Netherlands.
- White, F. M. (1991). Viscous Fluid Flow. McGraw-Hill, Inc.

Anexo 1 El modelo QUETZAL/3D

A1.1 Introducción

El sistema de ecuaciones diferenciales (capitulo dos), que representan a la hidrodinámica de un fluido es resuelto en este trabajo utilizando el programa QUETZAL/3D, el cual utiliza un esquema de diferencias finitas y un modelo de turbulencia de tipo κ - ϵ . Para esto, debe elegirse un método de discretización del modelo físico-matemático, el cual involucra la discretización espacial y la discretización temporal.

A1.2 Discretización de las ecuaciones

El proceso de discretización de ecuaciones consiste en pasar de una función continua a una función discreta que resulta en intervalos finitos de tiempo y espacio que permite la transformación de las ecuaciones diferenciales a operaciones algebraicas que involucran los valores de las variables en los puntos de la malla.

A1.2.1 Discretización espacial

La discretización espacial consiste en construir una malla por medio de la cual, el dominio físico continuo sea reemplazado por un numero finito de puntos, donde los valores numéricos de las variables serán determinados. La exactitud de la aproximación numérica depende también del tamaño de la malla, ya que el error de la simulación numérica tiende a disminuirse cuando el tamaño de la malla se reduce, y la rapidez de esta variación esta caracterizada por el *orden* de la discretización numérica de las ecuaciones. La solución numérica depende también del tipo y forma de la malla. El programa QUETZAL/3D, considera una malla de discretización espacial staggered cell (figura A1.1)

Considerando que los dominios de interés en estudios de los flujos a superficie libre son variables, y dependen de lo que se desea analizar, es posible utilizar una malla que crezca conforme se aleja del fondo, esto para obtener mayor detalle los campos de velocidades y las estructuras turbulentas que se forman cerca de la subcapa laminar; su geometría dependerá del caso de estudio, pudiéndose imponer una malla con diferentes zonas, en donde en cada zona la malla tenga diferentes incrementos o que crezca uniformemente.

La figura A1.1 esquematiza la malla staggered cell para un dominio bidimensional en el plano x-z; los escalares son evaluados en el centro de las mallas y las cantidades vectoriales en las caras correspondientes. La malla que se presenta es irregular, es decir, el tamaño de cada celda de la malla puede ser diferente. Para obtener los valores numéricos en todos los puntos de la malla es necesario considerar una doble malla en un dominio de estudio; es decir, una malla de cálculo y una de interpolación. En la malla de cálculo es en donde se resuelven las ecuaciones discretizadas de la variable de interés, y en la malla de interpolación se calculan dichas variables por medio de una interpolación lineal.



Figura A1.1: Malla de discretización staggered cell de la variable ϕ , en el plano *x*-*z*.

A1.2.1 Discretización temporal

Un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE) dependiente del tiempo, como es el caso, requiere de un esquema de integración en el tiempo. Así, la derivada temporal se discretiza como:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\varphi^{n+1} - \varphi^n}{\Delta t}$$
(A1.1)

donde ϕ representa cualquier variable dependiente del tiempo.

El esquema general de la solución de las ecuaciones que se tiene, se escribe de la siguiente forma:

$$\left[\varphi_{i,j,k}\right]^{n+1} = \left[\varphi_{i,j,k}\right]^n + \Delta t \left[\text{Convección} + \text{Difusión} + \dots\right]^n \quad (A1.2)$$

en la que (i, j, k) representan los índices en el espacio y (n) el índice temporal; así, las ecuaciones son resueltas de acuerdo a las condiciones establecidas en una etapa de tiempo anterior, relacionándose en un proceso de cálculo por el incremento de tiempo dado por Δt . La estructura dada por la ecuación (A1.2) es la misma que se considera dentro del programa de cómputo y tiene la ventaja de conocer la evolución, en el espacio y en el tiempo, de los diversos mecanismos que intervienen en las ecuaciones.

A1.3 Ecuación media de la velocidad horizontal

La discretización de la ecuación de velocidad media, ec. (III.b), en su componente horizontal, de acuerdo al esquema de la figura A1.1, es:

$$\overline{U}_{i,j,k}^{n+1} = \overline{U}_{i,j,k}^{n} + \Delta t \left[\text{CONVECU}_{i,j,k} - \frac{1}{\rho_{i,j,k}} \left(\frac{\partial P}{\partial x} \right|_{i,j,k} - \text{DIFFU1}_{i,j,k} \right) - \text{DIFFU2}_{i,j,k} \right]^{n} (A1.3)$$

los macrotérminos se definen como:

Advección:

$$\text{CONVECU}_{i,j,k} = -\overline{U}\frac{\partial\overline{U}}{\partial x} - \overline{V}\frac{\partial\overline{U}}{\partial x} - \overline{W}\frac{\partial\overline{U}}{\partial z} \quad (A1.4)$$

Gradiente de presión:

$$\frac{\partial P}{\partial x}\Big|_{i,j,k}^{n} = \frac{P_{i+1,j,k}^{n} - P_{i-1,j,k}^{n}}{\Delta x_{i}} \quad (A1.5)$$

Dífusión molecular:

DIFFU1_{*l,j,k*} =
$$\mu \left(2 \frac{\partial^2 \overline{U}}{\partial x \partial x} + \frac{\partial^2 \overline{U}}{\partial z \partial z} + \frac{\partial^2 \overline{W}}{\partial x \partial z} \right)$$
 (A1.6)

Difusión turbulenta:

La difusión turbulenta se evalúa de forma diferente, según el modelo de turbulencia utilizado, para el κ - ϵ , se escribe:

DIFFU2_{*i*,*j*,*k*} =
$$\frac{\partial \overline{uu}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{uv}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{uw}}{\partial z}$$
 (A1.7)

A1.4 Ecuación de la energía cinética de la turbulencia

La ecuación de la energía cinética de la turbulencia, es discretizada de acuerdo al esquema de la figura A1.1:

$$\kappa_{i,j,k}^{n+1} = \kappa_{i,j,k}^{n} + \Delta t \left[\text{CONVEC} \kappa_{i,j,k} + P_{i,j,k}^{n} + B_{i,j,k}^{n} + \text{DISS} \kappa_{i,j,k} + \text{DIFF} \kappa_{i,j,k} \right]^{n} \quad (A1.8)$$

donde los macro términos se definen en forma análoga, como se definieron en la ecuación para la velocidad U.

A1.5 Ecuación de la disipación de la energía cinética de la turbulencia

La ecuación de la disipación de la energía cinética de la turbulencia, es discretizada de acuerdo al esquema de la figura A1.1:

$$\varepsilon_{i,j,k}^{n+1} = \varepsilon_{i,j,k}^{n} + \Delta t \left[\text{CONVEC}_{i,j,k} + \text{PROD}_{i,j,k} + \text{DISS}_{i,j,k} + \text{DIFF}_{i,j,k} \right]^{n} (A1.9)$$

donde los macrotérminos se definen en forma análoga, como se definieron en la ecuación para la velocidad U.

A1.6 Los algoritmos del programa QUETZAL/3D

Las ecuaciones y los modelos de turbulencia descritas en las secciones anteriores son resueltos por el programa QUETZAL/3D, conforme a los algoritmos que se presentan en las figuras A1.2, A1.3, A1.4 y A1.5. Aplicaciones recientes del programa pueden verse en Millán (1999) y Herrera (1999).





POST-PROCESADOR





Figura A1.3: Diagrama de flujo general del programa QUETZAL/3D

En la figura A1.3, se indica el algoritmo de compresibilidad artificial para la solución de la ecuación de continuidad, que debe de verificarse a cada paso de tiempo.

ALGORITMO DEL QUETZAL/3D



Figura A1.4: Algoritmo del método de compresibilidad artificial

La figura A1.4, muestra el algoritmo de solución de los modelos de turbulencia.



Figura A1.5: Esquema de solución de los modelos de turbulencia.

Anexo 2. Modelo para el transporte de: DBO, OD, N_{org} y P_{org}

A2.1 Introducción

La presencia de sustancias tales como la DBO, OD, N_{org} y P_{org}, dentro de masas de agua o corrientes naturales, son indicadores de la calidad del agua. A pesar de que existen muchos otros contaminantes que se encuentran en cuerpos de agua, las sustancías mencionadas anteriormente, constituyen elementos fáciles de medir y su presencia nos puede indicar con relativa sencillez las funciones y procesos de los ecosistemas donde se les halla; claro esta que estos procesos y funciones están relacionados a la física (movimiento) y al criptosistema (explicado en el capitulo dos) que juntos constituyen el ecosistema (también explicado en el capitulo dos).

Los nutrientes vegetales e inorgánicos tales como los nitratos y los fosfatos, son sustancias solubles en agua y a la vez vitales para el desarrollo de las plantas, pero si se encuentran en cantidades excesivas, inducen al crecimiento desmesurado de algas y otros organismos provocando la eutrofización de las aguas; cuando estas algas y otros vegetales mueren, son descompuestos por los microorganismos, se agota el oxígeno y se hace imposible la vida de otros seres vivos, siendo el resultado un agua maloliente e inutilizable. Los contaminantes convencionales mas conocidos son: la demanda bioquímica del oxigeno *DBO*, Nitrógeno N_{org} , Fósforo P_{org}, total de sólidos suspendidos (*TTS*) y los totales de las bacterias coliformes fecales. La DBO, es un contaminante importante, por que el es una medida de la biodegradación orgánica en el agua y del oxigeno que requiere para consumir en el proceso de degradación microbial.

El Oxigeno disuelto OD es un parámetro químico importante, es requerido para garantizar la salud ecológica de un cuerpo receptor de agua. La muerte de peces, gases tóxicos y poca diversidad biológica son a menudo indicadores de un bajo nivel de OD en el cuerpo receptor de agua.

El Fósforo es un nutriente limitante, se le llama así, por que limita el crecimiento de algas. Un simple balance de masas en un lago, puede ser desarrollado empleando al fósforo como limitante de los nutrientes.

Los sólidos suspendidos llevan consigo residuos de sustancias tales como los N_{org} y los P_{org}; estas sustancias forman parte de ciclos importantes dentro de los sistemas, aunque el modelo de transporte de partículas puede ser adaptado para representar el transporte de sustancias, se creyó conveniente considerar un modulo empelando la ecuación de transporte de sustancias; el modelo de transporte de sustancias, se sustenta en un enfoque euleriano lagrangeano, en el que se consideran términos de creación destrucción de cada una de las sustancias; el campo hidrodinámico que mueve a las sustancias, es el mismo que se empleo para mover a las partículas.

A2.2 Transporte de la DBO y el OD.

Las aguas superficiales limpias suelen estar saturadas de oxígeno, lo que es fundamental para la vida. Si el nivel de oxígeno disuelto es bajo indica contaminación con materia orgánica (septicización), mala calidad del agua e incapacidad para mantener determinadas formas de vida. La DBO₅ es la cantidad de oxígeno disuelto requerido por los microorganismos para la oxidación aerobia de la materia orgánica biodegradable presente en el agua, se mide a los cinco días. Su valor da idea de la calidad del agua desde el punto de vista de la materia orgánica presente y permite prever cuanto oxígeno será necesario para la depuración de esas aguas.

El oxígeno es una sustancia necesaria para la vida de los organismos acuáticos (peces, plantas y otros); la presencia del oxígeno hace posible los procesos metabólicos. La mayoría de los animales y las plantas utilizan el oxígeno en combinación con otras sustancias para formar su armazón orgánica. Los peces como todos los animales heterótrofos, utilizan el oxígeno y lo transportan merced a la respiración y a la circulación de la sangre, hasta el seno mismo de las células que lo emplean como oxidante para suministrar energía. La temperatura juega un rol importante en la reaeración cinética del OD, la solubilidad del OD y la desoxigenación (degradación microbial del DBO), los efectos son:

- 1. La taza de reaeración constante del OD, se incrementa con el aumento de la temperatura.
- 2. La solubilidad del OD, disminuye con el incremento de la temperatura.
- 3. La relación constante de desoxigenación, se incrementa con el aumento de la temperatura.

La ecuación simplificada de Arrenius para la determinación de las constantes de desoxigenación k_d y reaeración k_a son:

$$k_{d} = k_{d,20} \theta^{(\tau-20)}$$

$$k_{a} = k_{d,20} \theta^{(\tau-20)}$$
(A2.1)

Donde:

- $K_{d,20}$: Relación constante de desoxigenación, para temperatura referencial de 20 °C/día.
- $K_{a,20}$: Relación constante de reaeración, para temperatura referencial de 20 °C/día.
- K_d : Relación constante de desoxigenación, T/día.
- Ka : Relación constante de reaereación, T/día.
- T : Temperatura comúnmente en un rango de 0 ~ 30 ° C.
- θ : Para la desoxigenación es normal tomar $\theta = 1.048$ y para la reaeración se toma $\theta=1.024$ (Snoor, 1996).

Cuando se incrementa la temperatura, decrece la concentración de oxigeno disuelto saturado.

Para el calculo del coeficiente de reaeración k_a existen las siguientes formulas (Snoor,1996):

O' Connor-Dobbins

$$k_a = \frac{12.9u^{0.5}}{H^{1.5}} \qquad (A2.2)$$

Owens-Edwards-Gibbs

$$k_a = \frac{23u^{0.73}}{H^{1.75}}$$
(A2.3)

Donde:

H = 1 - 2.5u = 0.0 - 0.5 Q = 4 - 36

Churchill-Elmore-Buckingham

$$k_a = \frac{11u}{H^{1.67}}$$
 (A2.4)

Donde: H = 2 - 11 u = 2 - 5 Q = 1000 - 17000

USGS

$$k_a = \frac{7.6u}{H^{1.33}}$$
(A2.5)

Tsivoglou

$$k_a = \frac{0.048\Delta S}{t} \tag{A2.6}$$

Donde

- ka : Relación constante de reaeración (base e), 1/día.
- u : Velocidad media de la corriente, ft/s.
- H : Profundidad media de la corriente, ft.
- ΔS : Cambio de la elevación de la superficie del agua, ft.
- Q : Gasto liquido, ft^3/s (5 3000)
- t : Tiempo del trayecto, días.

Las ecuación de transporte para la DBO y el OD se presentan juntas, y se escribe como:

$$\frac{\partial L}{\partial t} + U_j \frac{\partial L}{\partial x_j} = D_L \frac{\partial^2 L}{\partial x_j} - (K_1 + K_3)L + L_a$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U_j \frac{\partial C}{\partial x_j} = D_C \frac{\partial^2 C}{\partial x_j} - K_1 L + K_2 (C_s - C) - B$$
(A2.7)

Donde:

- L : Demanda Bioquímica del Oxígeno (DBO).
- C : Oxígeno Disuelto (OD).
- U_j : velocidad en la dirección j, para j = 1, 2 6 3; $u_1=u$, $u_2=v$ y $u_3=w$.
- x_j : eje coordenado en la dirección j, para j = 1, 2 ó 3; $x_1=x$, $x_2=y$ y $x_3=z$.

- K₁ : Coeficiente de reacción de la DBO.
- K₂ : Coeficiente de reaereación.
- K₃ : Coeficiente de remoción de la DBO, por sedimentación y absorción.
- D_L : Coeficiente de dispersión longitudinal de la DBO.
- Dc : Coeficiente de dispersión longitudinal del OD.
- Cs : Concentración del oxígeno disuelto saturado.
- La : Relación de adición de la DBO, a lo largo de toda la corriente.
- B : Remoción neta del OD por todos los procesos (oxidación bioquímica). $B = B_1 + R - F$
- B1 : Demanda del oxígeno en el fondo por los Bentos.
- R : Respiración de las plantas.
- F : Fotosíntesis.

A2.3 Transporte del Norg.

El nitrógeno se puede encontrar formando varias combinaciones químicas, además de como constituyente de moléculas orgánicas. Las que aquí nos interesan son: el amoniaco (NH₃), el amonio (NH₄, forma iónica de carácter básico), el nitrito(NO₂) y el nitrato(NO₃, forma iónica de carácter ácido).

Estas combinaciones se encuentran disueltas en el agua de los acuarios; pueden ser empleadas por las plantas, a excepción del nitrito, para la síntesis de sus proteínas.

Todas estas formas se pueden ínter convertir, el amonio y el amoniaco lo pueden hacer espontáneamente; en los restantes casos se requiere la acción de organismos. Todos estos compuestos son tóxicos. Los máximos niveles admisibles en un acuario dependen del tipo de peces pero, en general, son:

- Amoniaco (NH₃) : 0.1 mg/litro
- Amonio (NH₄) : 50 mg/litro
- Nitritos (NH₂) : 0.25 mg/litro
- Nitratos (NH₃) : 100 mg/litro

El amonio tiene una baja toxicidad, semejante a la del nitrato. El amoniaco produce lesiones en las branquias y el intestino, causando hemorragias y atacando al sistema nervioso. El nitrito se une a los pigmentos respiratorios: el pez muere por asfixia. Unos niveles de nitrito inferiores a los que causan la muerte inmediata producen la muerte al cabo de unos días pero con unos síntomas confusos y difíciles de interpretar.

El pH influye de una manera importante en la proporción relativa de amoniaco / amonio que pueda existir en un sistema acuático. Con un pH ácido o neutro no hay prácticamente amoniaco, con pH básicos o alcalinos todo el amonio se transforma espontáneamente en amoniaco. Al ser este 500 veces mas tóxico todos los peces empiezan a boquear inmediatamente. Los cambios de pH son fácilmente provocados por el cambio de agua.

La mineralización es la transformación de la materia orgánica (proteína, azúcares, etc.) en compuestos sencillos como el amoniaco, anhídrido carbónico, fosfato, etc. Este proceso es realizado por las bacterias mineralizantes. Estas bacterias son capaces de degradar la materia orgánica en un medio oxigenado. Como desechos producen principalmente CO_2 y el nitrógeno en forma de amoniaco o amonio.

Existen dos géneros de bacterias nitrificantes: nitrosomas y los nitrobacter. Las bacterias nitrosoma transforman el amoniaco / amonio en nitritos. Para su desarrollo esta bacteria necesita CO₂, Oxigeno, amoniaco y elementos de traza (sales minerales). La materia orgánica es toxica para los nitrosomas.

Los nitritos son transformados en nitratos mediante la acción de las bacterias nitrobacter. Estas bacterias También necesitan CO₂, oxígeno, nitritos y elementos traza (sales minerales). El amoniaco bloquea su metabolismo.

Finalmente el nitrato es consumido por las plantas y transformado en compuestos orgánicos (los tejidos de las plantas). Las bacterias denitrificantes, que viven en ausencia de oxígeno, son capaces de transformar el nitrato en nitrógeno, el cual se marcha a la atmósfera.

Es importante señalar que las bacterias que degradan los restos orgánicos y las que llevan a cabo la nitrificación son completamente distintas y las desnitrificantes tienen necesidades diferentes; para las primeras es fundamental la materia orgánica y para las segundas ésta constituye un veneno; las dos primeras requieren oxígeno pero las primeras son mucho más capaces de absorberlo que las nitrificantes, por lo que si la concentración de oxígeno es baja, los nitrosomonas y sobretodo las nitrobacter no podrán sobrevivir. En cambio las desnitrificantes mueren rápidamente en presencia de oxígeno.

El nitrógeno es uno de los componentes más importantes de la materia orgánica y principalmente forma parte en la elaboración de las proteínas celulares. En el agua lo podemos encontrar formando algunos compuestos muy importantes de su equilibrio bioquímico. Estos compuestos son los nitratos que son indispensables para el desarrollo de los organismos con clorofila. Por ejemplo, influyen directamente en el crecimiento de las plantas. Los nitritos, productos inestables de los desechos orgánicos que se suelen transformar en nitratos, debido a la actividad bacteriana. O más raramente, producir amoniaco (muy nocivo para los pobladores de un sistema). El exceso de nitrógeno disuelto en el agua, puede tras haber penetrado en la sangre de los peces, formar burbujas en los vasos sanguíneos y provocar embolias mortales.

El fitoplancton toma al N y al P en una relación másica promedio de aproximadamente 7.2:1. Si las cantidades disponibles difieren mucho con respecto a esta relación, ocurre una limitación de producción. La relación crítica N:P es de alrededor de 10:1. A partir de un estudio comparativo de las relaciones N:P en células de algas de cultivo y de aguas lacustre, Forsberg *et al* (1978) determinaron el rol de estos elementos como nutrientes limitantes del crecimiento. En la Tabla A2.1 se presenta la relación de los N_{totales} con los P_{totales}.

Tabla A2.1: Relaciones N_{total}:P_{total} y el rol de estos elementos como nutrientes limitantes del crecimiento en aguas residuales que afectan a los lagos con respecto a los niveles de clorofila A.

Ntotal/Ptotal	Nutriente limitante del crecimiento	Nivel de Clorofila A
		mg/m ³
> 12	P	< 20
7 – 12	N y/o P	20 – 70
< 7	N	> 70

La relación N:P en los desagües municipales es 3:1, mientras que en las fuentes no puntuales presentan relaciones muchos mas altas. Puede ser entonces que el N sea a menudo el nutriente limitante en lagos que reciben aguas residuales domesticas, esto no implica que se pueda controlar mejor la eutroficación mediante la remoción del N. Esta puede ser mejor controlada habitualmente a través de la remoción del P, por que este es mas fácil de eliminar de los efluentes domésticos, por precipitación química, ya que los efluentes originan cantidades mas significativas de P que de N.

La ecuación para el transporte del nitrógeno, en notación indicial se puede escribir como:

$$\frac{\partial N_4}{\partial t} + U_j \frac{\partial N_4}{\partial x_j} = D_N \frac{\partial^2 N_4}{\partial x_j} + \alpha_1 \rho A - \beta_3 N_4 - \sigma_4 N_4$$
(A2.8)

Donde:

N₄ : Nitrógeno orgánico.

U_j : velocidad en la dirección j, para j = 1, 2 6 3; $u_1 = u$, $u_2 = v$ y $u_3 = w$.

- x_j : eje coordenado en la dirección j, para j = 1, 2 6 3; $x_1 = x$, $x_2 = y$ y $x_3 = z$.
- D_N : Coeficiente de dispersión longitudinal del N.
- α_1 : Fracción de biomasa de algas.
- ρ : Taza de respiración de algas.
- A : Concentración de biomasa de algas.
- β_3 : Taza constante para la hidrólisis del nitrógeno orgánico hacia el nitrógeno amoniacal.
- σ_4 : Taza del coeficiente de sedimentación del nitrógeno orgánico.

A2.4 Transporte del Porg.

El fósforo es un componente esencial de los organismos. Forma parte de los ácidos nucleicos (ADN y ARN), del ATP y de las otras moléculas que tienen PO_4^3 y que almacenan la energía química, de los fosfolipidos que forman las membranas celulares, y de los huesos y dientes de los animales. Esta en pequeñas cantidades en las plantas, en proporciones de un 0.2%, aproximadamente; en los animales el fósforo puede constituir hasta el 1% de su masa.

La reserva fundamental del P en la naturaleza es la corteza terrestre. Proviene de la meteorización de las rocas, también se presenta en forma de ceniza producto de las expulsiones volcánicas; de cualquiera de las formas, queda disponible para que lo puedan aprovechar las plantas. Se arrastra con facilidad por las aguas y llega al mar, parte del P arrastrado sedimenta al fondo del mar y forma rocas que tardarán millones de años en volver a emerger y liberar de nuevo las sales de fósforo. Otra parte es absorbido por el plancton que, a su vez sirve de alimento a los organismos filtradores de plancton, como algunas especies de peces; estos peces son alimentos de algunas aves, que tienen sus nidos en tierra, y ellas devuelven parte del fósforo en forma de heces (guano) a la tierra.

El P es el principal factor limitante en los ecosistemas acuáticos y en los lugares en los que las corrientes marinas suben del fondo, resuspendiendo al fósforo que estaba sedimentando, eso hace que el plancton prolifere en la superficie. Al haber tanto alimento (plancton) se multiplican los bancos de peces, formándose las grandes pesquerías en las costas occidentales del África, América del Sur y otras.

Con los compuestos de fósforo, que se recogen directamente de los grandes depósitos acumulados en algunos lugares de la tierra, se abonan los terrenos de cultivo, a veces en cantidades desmesuradas, originándose problemas de eutrofización; del mismo modo en el agua, el exceso del P provoca eutrofización. El fósforo total incluye distintos compuestos, como diversos ortofosfatos, polifosfatos y fósforo orgánico. La determinación se hace convirtiendo a todos ellos en ortofosfatos, que son los que se determinan por análisis químico.

La ecuación para el transporte del fósforo, en notación indicial se escribe como:

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} + U_j \frac{\partial P_1}{\partial x_j} = D_P \frac{\partial^2 P_1}{\partial x_j} + \alpha_2 \rho A - \beta_4 P_1 - \sigma_5 P_1 \qquad (A2.9)$$

Donde:

- P1 : Fósforo orgánico.
- U_j : velocidad en la dirección j, para j = 1, 2 ó 3; u₁=u, u₂=v y u₃=w.
- x_j : eje coordenado en la dirección j, para j = 1, 2 ó 3; $x_1=x$, $x_2=y$ y $x_3=z$.
- D_P : Coeficiente de dispersión longitudinal del Porg.
- α_2 : Fracción de biomasa de algas.
- ρ : Taza de respiración de algas.
- A : Concentración de biomasa de algas.
- β₄ : Taza de decaimiento del fósforo orgánico.
- $\sigma_5\;$: Taza de sedimentación del fósforo orgánico.