

LAD_3D: MODELO 3D DE SIMULACIÓN DE LA DISPERSIÓN EN CAMPO CERCANO Y LEJANO DE CONTAMINANTES EN AGUAS COSTERAS

ANDRÉS RODRIGUEZ*
MARC MESTRES**
AGUSTÍN SÁNCHEZ-ARCILLA**
y
FELIPE COLLADO**

* *Laboratorio de Hidráulica (FCEfyN), Universidad Nacional de Córdoba
Av. Vélez Sarfield 299, 5000 Córdoba, Argentina
E-mail: arodrig@com.uncor.edu*

** *Laboratorio de Ingeniería Marítima, Grupo CIIRC-LIM/UPC
(DEHMA, ETSECCPB), Universidad Politécnica de Cataluña
Gran Capitán s/n, Campus Norte, 08034 Barcelona, España
Tel.: + 34-93-401 6468, Fax: + 34-93-401 7357*

RESUMEN

Los modelos numéricos bidimensionales que resuelven la hidrodinámica y el transporte de contaminantes asociado han sido ampliamente utilizados en el *campo lejano*, pero pueden dar lugar a resultados poco realistas en el *campo cercano* o en situaciones en las cuales la hidrodinámica es esencialmente tridimensional. Este es el caso por ejemplo de las corrientes inducidas por viento cerca de la costa o inducidas por oleaje en la zona de rompientes. Con el objetivo de resolver la ecuación de convección-difusión en tres dimensiones y simular el transporte de contaminantes en flujos no uniformes y estratificados se ha desarrollado un modelo numérico basado en una formulación lagrangiana del problema tridimensional. El modelo es descrito en detalle y se aplica al caso del emisario submarino de Barcelona en el Mediterráneo español.

LAD_3D: A THREE-DIMENSIONAL MODEL FOR THE SIMULATION OF POLLUTANT DISPERSION IN THE NEAR AND FAR FIELD IN COASTAL WATERS

SUMMARY

Two-dimensional numerical models have been extensively used in the *far field* to solve hydrodynamics and the associated pollutant transport; however the results obtained from these models may not be valid when used in the *near field* or in areas where the hydrodynamics is mainly 3D, as in the case of wind-induced currents in the nearshore region, or wave-induced currents in the surf-zone. A 3D lagrangian numerical model has been developed to solve the three-dimensional convection-diffusion equation, and therefore to simulate pollutant transport in non-uniform and stratified hydrodynamic flows. In this paper the model is described in detail and it is applied to the real case of the Besòs sea outfall, near Barcelona city (Spanish Mediterranean coast).

Recibido: Julio 1996

INTRODUCCIÓN

La simulación de una descarga submarina debe tener en cuenta la existencia de dos zonas diferenciadas en las cuales la evolución del penacho resultante está gobernada por mecanismos físicos distintos. En la región de *campo cercano*, más próxima al emisario, el transporte está determinado por las características de la descarga, como la velocidad inicial y las diferencias de densidad, así como las características de los difusores. La segunda región, en la cual la dispersión es debida casi exclusivamente al campo hidrodinámico de velocidades y a la turbulencia ambiental, se denomina *campo lejano*.

En esta última zona, el transporte neto de una sustancia en la dirección de alguno de los ejes de coordenadas puede considerarse, en general, despreciable frente al existente en las otras dos. El problema se puede resolver entonces promediando la ecuación de transporte a lo largo de dicho eje; los modelos habitualmente usados (2DH) calculan el transporte promediado en la coordenada vertical.

En el *campo cercano*, por el contrario, este promediado no puede realizarse, puesto que el transporte resulta ser importante en las tres direcciones. La aplicación de modelos bidimensionales a esta región conduce a representaciones poco fiables del campo de concentraciones, haciéndose necesaria la utilización de modelos 3D. Cuando la hidrodinámica (principalmente el campo de corrientes y la turbulencia) varía en forma significativa en la coordenada vertical, como es el caso de la circulación inducida por viento, en general, o inducida por oleaje en la zona de rompientes, es importante utilizar modelos tridimensionales de dispersión incluso para el *campo lejano*.

En los últimos años se han desarrollado varios tipos de modelos computacionales para simular el transporte de sustancias, basados en distintas aproximaciones numéricas. Así, por ejemplo Allen¹ presenta un modelo lagrangiano bidimensional para la simulación del transporte en estuarios; Hunter² también emplea métodos de tipo *particle-tracking* en una formulación 2D. Spaulding y Pavish³ desarrollaron un tipo de modelo híbrido 3D, en el cual combinaban el tratamiento euleriano de la difusión con el tratamiento lagrangiano de la advección. Una formulación similar fue utilizada por O'Connor y Nicholson⁴ para simular el transporte de sedimentos en aguas costeras, resolviendo los procesos advectivos con un método de características, mientras que la difusión y la sedimentación fueron tratadas mediante diferencias finitas. También han sido utilizadas técnicas de elementos finitos, como es el caso de Hermosilla *et al.*⁵, mediante una aproximación cuasi-tridimensional (Q-3D), o Glekas⁶, en tres dimensiones.

En este artículo se presenta un modelo numérico 3D lagrangiano general para el transporte de sustancias contaminantes, pasivas o no, conservativas o no, en un flujo general espacialmente variable. El modelo de dispersión se alimenta inicialmente con los datos hidrodinámicos procedentes de un modelo Q-3D que considera la circulación inducida por oleaje en la zona cercana a la costa (Sánchez-Arcilla *et al.*^{7,8}) e incorpora los efectos tridimensionales del viento mediante una formulación semianalítica (Massel⁹).

FORMULACIÓN DEL MODELO

El modelo resuelve la ecuación tridimensional de convección-difusión que describe el transporte o dispersión de una o más sustancias en un fluido, promediada a la escala temporal de Reynolds

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + FD \quad (1)$$

donde C es la concentración de la sustancia considerada, u, v, w las componentes del campo de velocidad, K_x, K_y, K_z los coeficientes de difusión y FD el término fuente/inactivación.

En el primer miembro de la ecuación (1) se incluyen las variaciones en la concentración debidas al transporte advectivo por efecto tanto del campo de velocidades ambientales como de las diferencias de densidad entre el contaminante y el agua, mientras que en el segundo se representan los cambios en C debido a la difusión, principalmente turbulenta. El término fuente/decaimiento engloba diferentes factores que pueden afectar a la pérdida de masa, tales como sedimentación o inactivación microbiológica. La flotabilidad por efectos de gradientes espaciales de densidad es considerada a través de la velocidad vertical, la cual incluye también la velocidad de caída en el caso de sedimentos en suspensión.

Para simular los efectos mencionados en el punto anterior, el modelo se estructura en diversos módulos ejemplificados en el diagrama de flujo de la Figura 1 y descritos a continuación.

El método lagrangiano adoptado considera que la masa contaminante está subdividida en pequeñas partículas, denominadas elementos lagrangianos, cuyo movimiento en el cuerpo de agua es impulsado por los distintos mecanismos físicos implicados en el transporte; adicionalmente, estas partículas pueden desaparecer si existe decaimiento bacteriano o si son retenidas en los contornos (fondo o contornos secos).

Bajo esta suposición se considera que cada partícula se desplaza una distancia Δs durante un cierto intervalo Δt con una velocidad que es función de los diferentes agentes que intervienen en la dispersión. La contribución de cada uno a la velocidad total se determina de la forma indicada en los siguientes apartados.

Advección

Los modelos lagrangianos de partículas, como el presentado, son especialmente aptos para simular los efectos advectivos, ya que no introducen error numérico en sí mismos. La única fuente de error posible proviene de la propia simulación hidrodinámica (interpolada bilinealmente) y del paso temporal escogido (limitado, para no introducir un error mayor al de la interpolación bilineal).

La advección tridimensional se obtiene modelando perfiles verticales de corrientes inducidas por el oleaje, dentro de la zona de rompientes, y por el viento en la zona cercana a la costa. Este campo de velocidades se obtiene a partir de la resolución

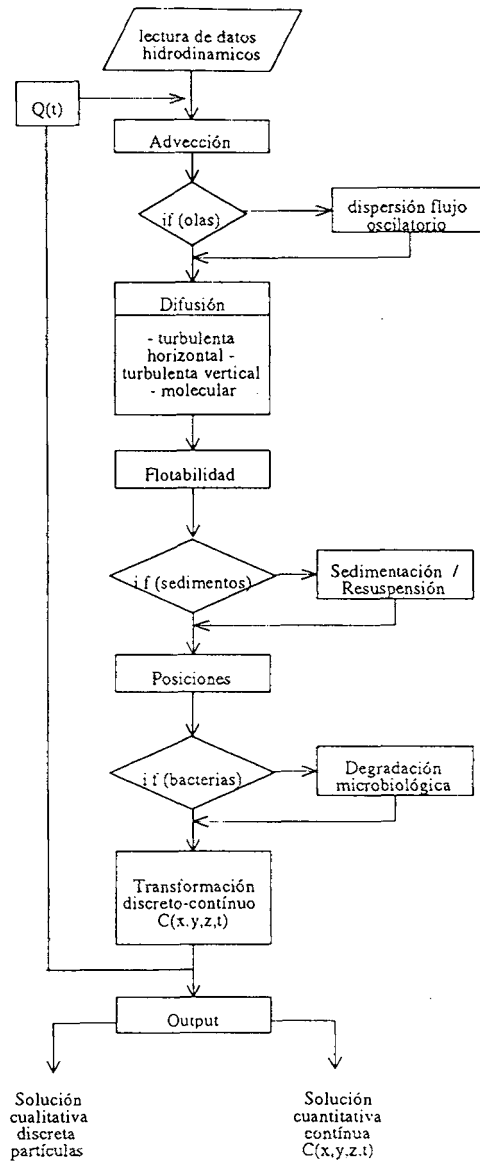


Figura 1. Diagrama de bloques del modelo de dispersión de contaminantes LAD_3D

numérica de las ecuaciones de conservación de masa y cantidad de movimiento mediante el modelo hidrodinámico Q-3D NEARCIR, cuyas ecuaciones no se presentan en este trabajo (ver detalles en Sánchez-Arcilla *et al.*^{7,8}). Al modelo hidrodinámico Q3D mencionado se acopla un módulo semianalítico de circulación por viento 1DV, similar al presentado por Massel⁹. Para el lector interesado en la descripción del modelado hidrodinámico se citan las referencias mencionadas y Collado *et al.*¹⁰.

Las componentes de la velocidad del fluido en la posición exacta de cada partícula se calculan a partir del campo de corrientes 3D por interpolación bilineal en el plano horizontal entre los cuatro nodos computacionales más cercanos, como se muestra en

la Figura 2, agregándose a continuación el perfil vertical de velocidades inducidas por viento para obtener la velocidad hidrodinámica total.

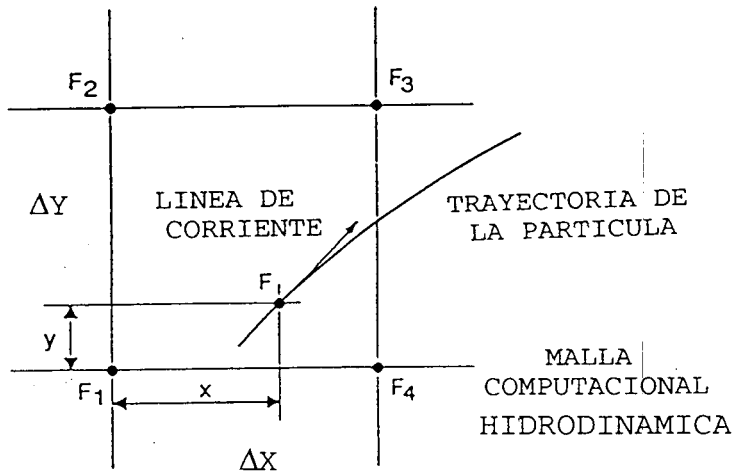


Figura 2. Esquema de interpolación bilineal usado para la estimación de los valores de las variables hidrodinámicas

La estructura vertical del campo de corrientes debida al viento se calcula mediante

$$\begin{cases} u_{cv} = u' \sin \theta + v' \cos \theta \\ v_{cv} = -u' \cos \theta + v' \sin \theta \\ w_{cv} = -z i_{\beta} \left[\frac{1}{4} \frac{\tau_{x'}^s}{A_z} \left(1 - \frac{z^2}{h^2} \right) - u'_b \frac{z^2}{h^3} \right] \end{cases} \quad (2)$$

$$u' = \frac{\tau_{x'}^s}{4A_z} \left(h + 4z + \frac{3z^2}{h} \right) - \frac{1}{2} u'_b \left(1 - \frac{3z^2}{h^2} \right)$$

$$v' = \frac{\tau_{y'}^s}{A_z} (h + z) + v'_b$$

donde i_{β} es la pendiente del fondo en la dirección de la línea de corriente horizontal $\tau_{x'}^s, \tau_{y'}^s$ las componentes de la tensión de viento en la superficie, en un sistema de ejes auxiliar con x' perpendicular a las líneas de corriente horizontales, u'_b, v'_b las componentes de la velocidad en el fondo, en el sistema x', y' ; θ el ángulo entre la línea de corriente horizontal y el eje x , $A_z = \tau_{y'}^s h / 2v_H$ (por integración de la ecuación de v' , con v_H la componente en la dirección y de la velocidad 2DH) y h el calado.

Flujo oscilatorio

La influencia del oleaje en el transporte de contaminantes puede ser resumida en dos efectos: por una parte, hay transporte neto "advectivo", y por otra, las olas aumentan el nivel de turbulencia ambiental, estimulando el proceso de mezcla turbulenta vertical. El transporte por flujo oscilatorio está incluido en el modelo, diferenciando el dominio fuera y dentro de la zona de rompientes ZR .

Fuera de la ZR su efecto se modela mediante la formulación propuesta por Davydov¹¹, en la que se supone teoría lineal para el flujo oscilatorio producido por el oleaje. La contribución de las olas al flujo de contaminantes en las tres direcciones espaciales es entonces

$$\begin{aligned} q_j &= \delta_j \frac{\partial C}{\partial z} \\ q_z &= -\delta_j \frac{\partial C}{\partial x_j} \quad j = 1, 2 \end{aligned} \quad (3)$$

con

$$\delta_j = \frac{H^2 \pi \sinh(2kz) k_j}{8T \sinh(kh) |\mathbf{k}|} \quad (4)$$

donde \mathbf{k} es el vector número de onda (de componentes k_j y módulo $2\pi/L$), T el período característico del oleaje, H la altura de ola y L la longitud de onda.

Si se asume que q_i ($i = 1, 2, 3$) representa el flujo de contaminante por unidad de área y tiempo en la dirección del eje x_i , entonces

$$q_i(l, m, n) = u_{w_i}(l, m, n) C(l, m, n) \quad (5)$$

de donde puede deducirse una "pseudovelocidad" debida al flujo oscilatorio para cada partícula contenida en una cierta celda (l, m, n) de dimensiones Δx , Δy , Δz , con concentración $C(l, m, n)$ o número de partículas $N(l, m, n)$

$$\begin{aligned} u_w(l, m, n) &= \frac{\delta_1}{\Delta z} \frac{N(l, m, n+1) - N(l, m, n-1)}{N(l, m, n)} \\ v_w(l, m, n) &= \frac{\delta_2}{\Delta z} \frac{N(l, m, n+1) - N(l, m, n-1)}{N(l, m, n)} \\ w_w(l, m, n) &= -\frac{\delta_1}{2\Delta x} \frac{N(l+1, m, n) - N(l-1, m, n)}{N(l, m, n)} - \\ &\quad - \frac{\delta_2}{2\Delta y} \frac{N(l, m+1, n) - N(l, m-1, n)}{N(l, m, n)} \end{aligned} \quad (6)$$

El caso de la dispersión dentro de la zona de rompientes incluyendo el efecto de la rotura del oleaje se describe en el punto siguiente.

Difusión

El modelado de los procesos difusivos en las tres direcciones se consigue mediante un algoritmo tipo Monte Carlo o de "caminante aleatorio" (Csanady¹² o Ahlstrom¹³). En esta aproximación la distancia cuadrática media recorrida por una partícula en un cierto intervalo de tiempo Δt es

$$d_{rms} = \sqrt{2D\Delta t} \quad (7)$$

donde D es un coeficiente de difusión, de donde se define una velocidad difusiva característica

$$u_D = (2R_{01} - 1) \sqrt{\frac{6D}{\Delta t}} \quad (8)$$

siendo R_{01} un número aleatorio comprendido entre 0 y 1, dado por un generador gaussiano de números aleatorios. La calidad de la "aleatoriedad" de este generador es clave para la correcta representación de los términos difusivos, por lo cual el generador utilizado debe cumplir ciertas condiciones (Vattulainen y Ala-Nissila¹⁴).

La dispersión fuera de la zona de rompientes se divide en una dispersión horizontal y otra vertical. La primera se descompone a su vez en una componente paralela a las líneas de corriente y en una perpendicular a dichas líneas. Siguiendo a Holly¹⁵, las respectivas difusividades son

$$\begin{aligned} K_L &= c_L u_* h \\ K_T &= c_T u_* h \end{aligned} \quad (9)$$

siendo u_* la velocidad de cizalla ($\tau = \rho u_*^2$, τ es la tensión de cizalla en el fondo) y c_L, c_T los coeficientes empíricos en la dirección paralela y perpendicular al flujo medio horizontal.

Los coeficientes c_L y c_T se parametrizan habitualmente como propiedades del flujo medio; sus valores comúnmente utilizados son $c_L = 5,93$ y $c_T = 0,21$, si el campo de velocidades está promediado verticalmente (2DH), y varían entre 0,07-0,23, si se trata de un flujo cortante tridimensional (Holly¹⁵).

Por otra parte, el coeficiente de difusión turbulenta vertical (fuera de la zona de rompientes) suele ser estimado como

$$K_V = c_V u_* h \quad (10)$$

donde c_V varía entre 0,16 y 0,23.

Dentro de la zona de rompientes se considera la mezcla adicional por la rotura del oleaje. La difusión horizontal total se supone isotrópica en este caso y puede estimarse mediante diversos modelos, como los propuestos por Battjes¹⁶ o Thornton¹⁷, por

$$K_H(x) = \frac{H^2}{8\pi^2} \frac{gT}{h} \cos^2 \alpha \quad (11)$$

donde g es la aceleración de la gravedad y α el ángulo medio de incidencia del oleaje.

El componente de difusión vertical por rotura del oleaje se calcula aquí siguiendo a Nadaoka e Hirose¹⁸

$$K_V(\mathbf{x}) = 0,18 \left(\frac{H}{h} \right)^{7/3} L^{1/3} h^{2/3} (gh)^{1/2} i^{1/3} \quad (12)$$

donde i es la pendiente del fondo.

En ambos casos tanto fuera como dentro de la ZR , los parámetros del oleaje (dirección de propagación, altura y período) son suministrados por el modelo hidrodinámico NEARCIR e interpolados bilinealmente para la posición de cada partícula del mismo modo que las variables hidrodinámicas (velocidades, calados, etc.).

Debe destacarse, sin embargo, que para obtener una simulación más realista de la difusión deben considerarse modelos de turbulencia de mayor orden o “refinados” (Falconer¹⁹).

Pese a que sus efectos son muy pequeños respecto a los de la difusión turbulenta, el modelo incluye también, por generalidad, el cálculo de la difusión molecular. En este caso, el coeficiente de difusión depende del constituyente o sustancia (soluto) que se trate, siendo un valor típico $K_0 \simeq 10^{-9}$ m²/s, supuesto constante e isótropo.

Sedimentación

Este módulo se activa para el caso de sedimentos en suspensión. La velocidad de caída w_s^0 se obtiene de Gibbs *et al.*²⁰ mediante una relación experimental deducida para partículas esféricas de densidad ρ en un medio de densidad ρ_0

$$w_s^0 = \frac{-3\nu + \sqrt{9\nu^2 + g\phi^2(s-1)(0,003869 + 0,0298\phi)}}{(0,011607 + 0,0744\phi)} \quad (13)$$

con ν como viscosidad del agua (función de la temperatura), ϕ = diámetro de las partículas y s diferencia relativa de densidades $(\rho_0 - \rho)/\rho_0$.

En el caso en que el sedimento forme una suspensión espesa y homogénea, se aplica una corrección que considera los efectos interpartícula (Richardson y Zaki²¹)

$$w_s = w_s^0(1 - C)^p \quad (14)$$

donde C es la concentración volumétrica de sedimentos y p es un parámetro que depende del número de Reynolds de partícula Re_g

$$Re_g = \frac{w_s^0 \phi}{\nu} \quad (15)$$

$$\begin{cases} p = 4,45 Re_g^{-0,03} & 0,2 < Re_g \leq 1 \\ p = 4,45 Re_g^{-0,10} & 1 < Re_g \leq 500 \\ p = 2,39 & 500 < Re_g \end{cases} \quad (16)$$

Flotabilidad

Para el tratamiento de vertidos con densidad distinta a la del cuerpo de agua receptor (sea por temperatura y/o por salinidad) deben considerarse los efectos de flotabilidad. Estos se modelan mediante una expresión que tiene en cuenta la velocidad adquirida por un elemento de fluido sometido a una determinada aceleración (gravedad efectiva), supuesta constante durante su recorrido vertical en un intervalo temporal Δt

$$w_B = \frac{\Delta\rho}{\rho} g \Delta t \quad (17)$$

Este efecto tiene gran importancia en el caso de emisarios submarinos, como se ilustra más adelante en el ejemplo de aplicación.

Inactivación microbiológica

En el caso de descargas urbanas directas o por emisarios debe incluirse el efecto de la inactivación bacteriana en la dispersión. Las variaciones de la concentración debidas a este efecto pueden expresarse como

$$\frac{dC}{dt} = -K_d C \quad (18)$$

donde K_d es un coeficiente de inactivación que depende de varios factores, como el tipo de organismo, la temperatura y salinidad del ambiente y la radiación solar. Una solución a esta ecuación es

$$C(t) = C(t_0) e^{-K_d(t-t_0)} \quad (19)$$

por lo que el número de partículas (o microorganismos) que pueden desaparecer en el modelo durante un intervalo de tiempo Δt vendrá dado por la forma discretizada de (19)

$$N_t - N_{t-1} = N_{t-1} (1 - e^{-K_d \Delta t}) \quad (20)$$

El coeficiente de inactivación K_d puede ser evaluado mediante expresiones con distinto grado de aproximación. En el caso más simple se considera constante durante el tiempo de simulación y puede ser introducido como parámetro inicial o bien calculado a partir de valores experimentales (Bravo²²), en función de la época del año y el tipo de microorganismo. En el caso más general, en que K_d varía tanto en el espacio como en el tiempo, puede calcularse para coliformes fecales a partir de diversas expresiones; se incluyen en el modelo la propuesta por Juanes de la Peña²³ y la de Thomman y Mueller²⁴ (basada en Mancini²⁵).

$$K_d = (0,8 + 0,006 \Lambda) 1,07^{(\Theta - 20)} + \frac{c_0 I_0(t)}{K_e h'} (1 - \exp(-K_e h')) + \frac{\Gamma_s}{h'} \quad (21)$$

donde Λ es el porcentaje de agua salada, Θ la temperatura del agua, K_e el coeficiente de extinción de la luz en el agua, I_0 la radiación solar en la superficie, h' la profundidad

de promediado, Γ_s la tasa de resuspensión y c_0 una constante de calibración de orden uno.

Un esquema de decaimiento microbiológico alternativo (de tipo hiperbólico) ha sido propuesto por Mujeriego²⁶ y se incorpora como opción para el caso de estreptococos fecales

$$\log C(t) = \frac{K'_d}{K'_d + t - t_0} \log C(t_0) \quad (22)$$

donde ahora K'_d puede obtenerse a partir de datos experimentales (Bravo²²).

Desplazamiento de las partículas

El desplazamiento en las tres direcciones espaciales de cada uno de los elementos lagrangianos (partículas) se resuelve suponiendo una advección debida a la existencia de un campo de "pseudovelocidades"

$$\begin{cases} x_{t+1} = x_t + (u_c + u_w + u_{D_L} \cos \theta - u_{D_T} \sin \theta + u_{D_M}) \Delta t = x_t + U \Delta t \\ y_{t+1} = y_t + (v_c + v_w + u_{D_L} \sin \theta + u_{D_T} \cos \theta + u_{D_M}) \Delta t = y_t + V \Delta t \\ z_{t+1} = z_t + (w_c + w_w + w_{D_V} + u_{D_M} + w_s + \frac{1}{2}w_B) \Delta t = z_t + W \Delta t \end{cases} \quad (23)$$

con u_c , v_c , w_c componentes de la corriente del modelo hidrodinámico y U , V , W componentes de la "pseudovelocidad".

Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno consideradas en el modelo son las siguientes:

1. En contornos abiertos, es decir, contornos permeables (no sólidos) impuestos por el tamaño del dominio computacional, las partículas son eliminadas y la masa correspondiente no se tiene en cuenta al pasar de la distribución discreta de partículas a la distribución continua de concentraciones (ver punto siguiente).
2. La superficie libre del cuerpo de agua se considera impermeable no reflejante. Cuando una partícula cruza esta superficie, se le asigna la coordenada vertical $z = 0$.
3. En contornos sólidos, p.e., el fondo o zonas secas, se define un coeficiente de reflectividad $a(i, j)$. Este coeficiente puede ser distinto para cada celda computacional y es una medida del comportamiento de las partículas al tocar el contorno. Su valor está comprendido entre 0 (contorno completamente absorbente) y 1 (contorno completamente reflectante) y depende del tipo de contaminante y de contorno (por ejemplo para hidrocarburos y playas de arena este coeficiente suele tomar el valor 0,6). Todos los elementos lagrangianos que llegan a un contorno sólido en la celda (i, j) quedan marcados con un "índice de contorno", siendo el valor correspondiente de $a(i, j)$ el que determina si la partícula será desplazada o no en el siguiente paso de tiempo.

TRANSFORMACIÓN DISCRETO-CONTINUO

Una vez que se ha logrado una distribución discreta de partículas, se requiere una transformación para obtener un campo continuo de concentraciones. El modelo presentado incorpora la posibilidad de realizar la transformación mediante tres métodos distintos: el clásico algoritmo de "partículas en cajas" (PIC), el método SPH ("smoothed-particle hydrodynamics", mediante una función de tipo *kernel* - Lorimer²⁷) y un método híbrido (kPIC) en el cual la masa de cada partícula situada en un celda (i, j) de la malla de concentración se reparte, quedando un N_1 % de masa en (i, j) y subdividiendo el resto ($100 - N_1$ %) entre las 26 celdas circundantes.

Los tres métodos han sido utilizados para calcular la distribución de concentración resultante de un proceso de difusión pura y los resultados obtenidos han sido comparados con la solución analítica correspondiente

$$C(x, y, z, t) = \frac{C_0}{(4\pi K_x K_y K_z t)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{4K_x t} - \frac{(y - y_0)^2}{4K_y t} - \frac{(z - z_0)^2}{4K_z t} \right] \quad (24)$$

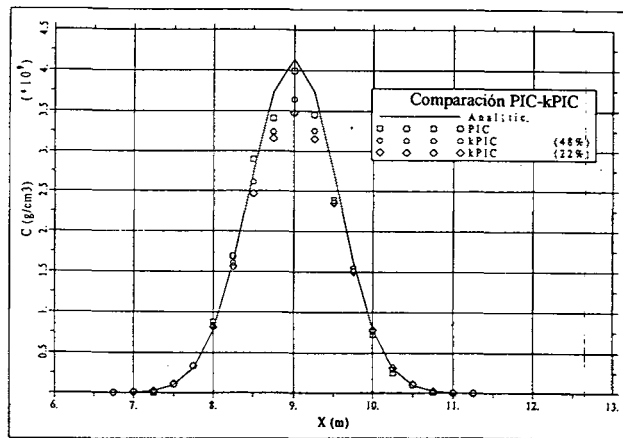


Figura 3a). Concentraciones obtenidas a partir de 100.000 partículas con los métodos PIC e híbrido (kPIC)

En la Figura 3a se muestra la distribución obtenida a partir de un conjunto de 100.000 partículas mediante los métodos PIC y kPIC con un volumen cúbico de integración con arista igual a 0,2 m. La concentración calculada reproduce satisfactoriamente la solución analítica con errores relativos cercanos o inferiores al 2%. La aparente pérdida de masa que se manifiesta al usar kPIC se debe a su distribución fuera de los ejes por efectos de un N_2 no nulo. La Figura 3b representa el resultado de aplicar el método SPH sobre un grupo de 35.000 partículas. En este caso el ajuste es ligeramente mejor que en el caso anterior con un error relativo (calculado a partir de la distribución según los tres ejes coordenados) del 1,5 % frente al 2,1 % dado por

PIC. Pese a que este método es mucho más costoso en tiempo de CPU que los métodos (k)PIC, se pueden obtener resultados comparables a los de éstos mediante SPH con un número de partículas hasta diez veces inferior.

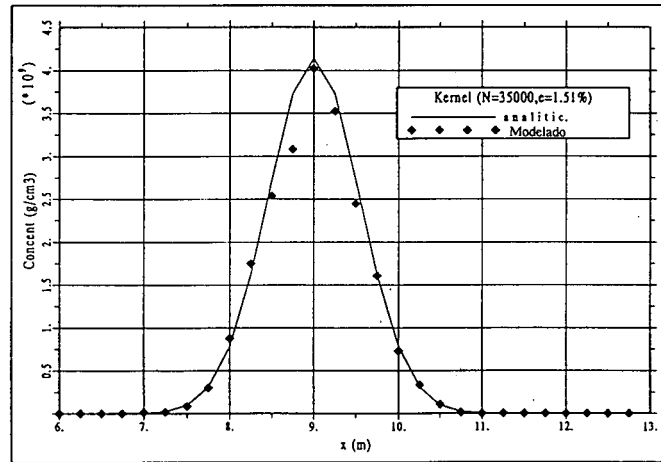


Figura 3b). Concentraciones obtenidas con el método SPH sobre un grupo de 35.000 partículas

PROPIEDADES DEL MODELO

La utilización de un esquema lagrangiano en la simulación del transporte garantiza la estabilidad del modelo, puesto que no existen condiciones numéricas restrictivas que haya que satisfacer. De cualquier modo, es recomendable introducir una cierta limitación a los valores del paso de tiempo Δt tanto por razonamientos computacionales como físicos. Esta limitación es necesaria cuando el modelo simula situaciones en las cuales la dirección del campo de velocidad cambia rápidamente (como por ejemplo cerca de contornos irregulares) o en cuerpos de agua estratificados, donde es importante evitar (o reducir al mínimo) los saltos de las partículas en la pycnoclina para reproducir de forma fiable los efectos de la flotabilidad.

El modelo LAD_3D calcula e impone un límite superior al intervalo de tiempo Δt . Este límite garantiza que las partículas siguen trayectorias advectivas que reproducen las líneas de corriente en el flujo, y viene dado por

$$\Delta t \leq \min(\Delta t_{aH}, \Delta t_{aV}, \Delta t_{dH}, \Delta t_{dm})$$

$$\Delta t_{aH} = \frac{\min(\Delta X, \Delta Y)}{\max(u_{\text{Max}}, v_{\text{Max}})} \quad \Delta t_{dH} = \frac{4[\min(\Delta X, \Delta Y)]^2}{6 \max(K_L, K_T)}$$

$$\Delta t_{aV} = \frac{\Delta Z}{w_{\text{Max}}} \quad \Delta t_{dV} = \frac{4\Delta Z^2}{6 \max(K_V)}$$
(25)

donde ΔX y ΔY es el tamaño de las celdas computacionales hidrodinámicas, ΔZ es una fracción del calado mínimo en el dominio y u_{Max} , v_{Max} , w_{Max} son los valores absolutos de las máximas componentes del campo de velocidad en el dominio de interés.

Por otra parte, la conservación de masa es una propiedad natural de la metodología lagrangiana y se cumple exactamente tanto en la distribución discreta de elementos como en los tres métodos de transformación discreto-continuo utilizados.

Asimismo, la inclusión de los efectos de flotabilidad y sedimentación, así como la tridimensionalidad de la formulación escogida, permite que el presente modelo pueda evaluar en forma general la dispersión tanto en *campo cercano* (plumas) como *lejano*. El tratamiento de los efectos tridimensionales del flujo oscilatorio permite la utilización del modelo tanto dentro como fuera de la zona de rompientes.

El modelo ha sido validado con numerosos casos analíticos simplificados, previamente a su aplicación al caso real de la dispersión de aguas residuales procedentes del emisario submarino del Besòs, al norte de Barcelona, resumido a continuación.

CASO DE ESTUDIO: SIMULACIÓN DEL CAMPO DE CONCENTRACIONES GENERADO POR EL EMISARIO DE BARCELONA

La planta depuradora del Besòs tiene capacidad para tratar 464.640 m³/día de aguas residuales procedentes del área metropolitana de Barcelona, de las cuales el 60 % son de origen urbano y el resto de origen industrial. Realiza un tratamiento de tipo físico-químico de las aguas antes de verterlas, mediante un emisario de 2.900 m de longitud a unos 50 m de profundidad (Figura 4). En los últimos 800 metros existen 15 difusores verticales de cuatro bocas horizontales cada uno. El caudal medio vertido es de aproximadamente 9,2 m³/s.

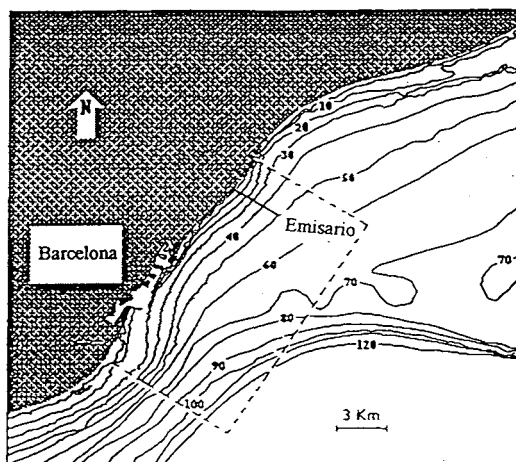


Figura 4a). Localización del emisario submarino del Besòs, frente a las costas de Barcelona; las líneas discontinuas marcan el dominio computacional.

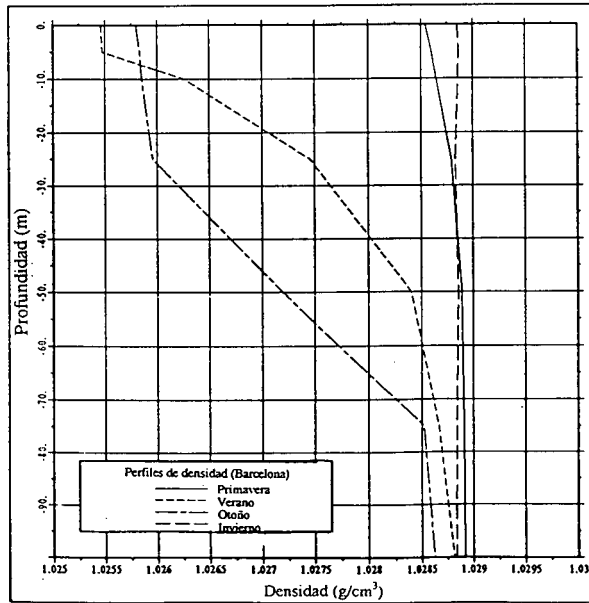


Figura 4b). Perfiles típicos de densidad del agua en la costa frente a Barcelona para las distintas estaciones del año (Salat *et al.* 27)

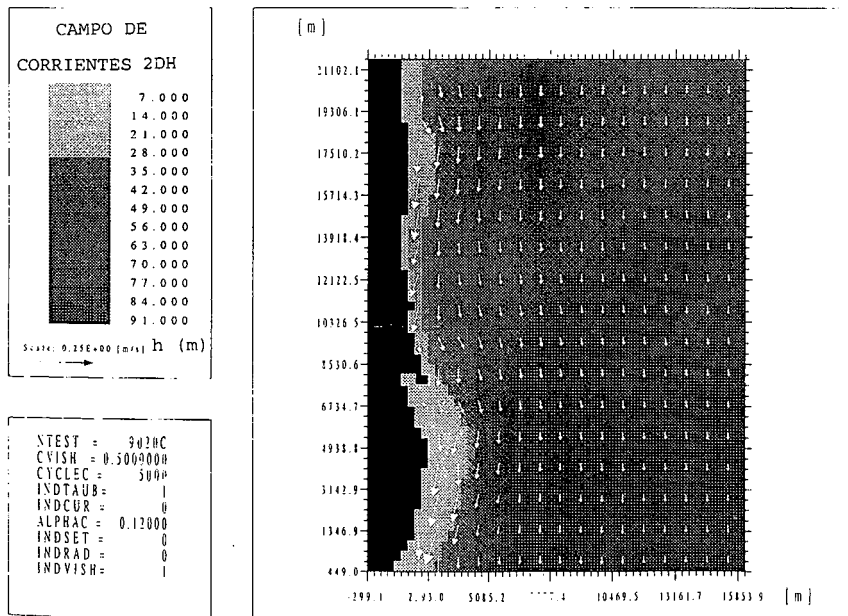


Figura 5a). Campo de velocidades 2DH inducido por viento

Se ha utilizado el modelo hidrodinámico NEARCIR para simular la circulación inducida por vientos del NE de 5-10 m/s, cuyo componente 2DH se muestra en la Figura 5a. Se ha definido una malla regular ($\Delta X = 300$ m, $\Delta Y = 450$ m) en un dominio

de dimensiones 16,5 y 22 km perpendicular y paralelo a la costa, respectivamente. Los valores de la velocidad por viento han sido calculados mediante el módulo analítico en la posición de cada partícula (Figura 5b). Se han considerado diversos casos de condiciones ambientales: el primero supone una estratificación típica de verano con densidades cerca de los difusores de $1,028 \text{ g/cm}^3$, el segundo representa una distribución de densidad uniforme, característica de invierno, ilustrados en la Figura 4b. En ambos casos la densidad del vertido ha sido de $1,027 \text{ g/cm}^3$ con un caudal medio de $9,1 \text{ m}^3/\text{s}$ y una concentración inicial $C_0 = 10^6 \text{ bact}/100 \text{ cm}^3$, con un valor del tiempo de decaimiento microbiológico $T_{90} = 2,3/K_d = 24 \text{ horas}$. En la Figura 6 se muestra la sensibilidad de la simulación a la flotabilidad del efluente para distintas densidades y en un ambiente típico de verano.

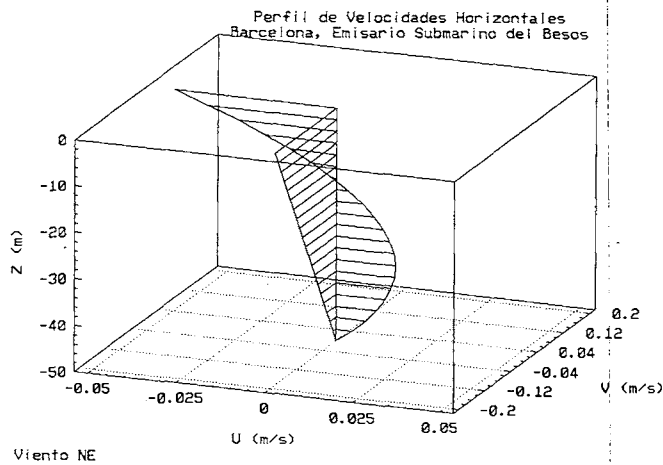


Figura 5b). b) Perfiles verticales de velocidad horizontal inducida por viento cerca del último difusor del emisario a partir de las ecuaciones (2) y el campo 2DH

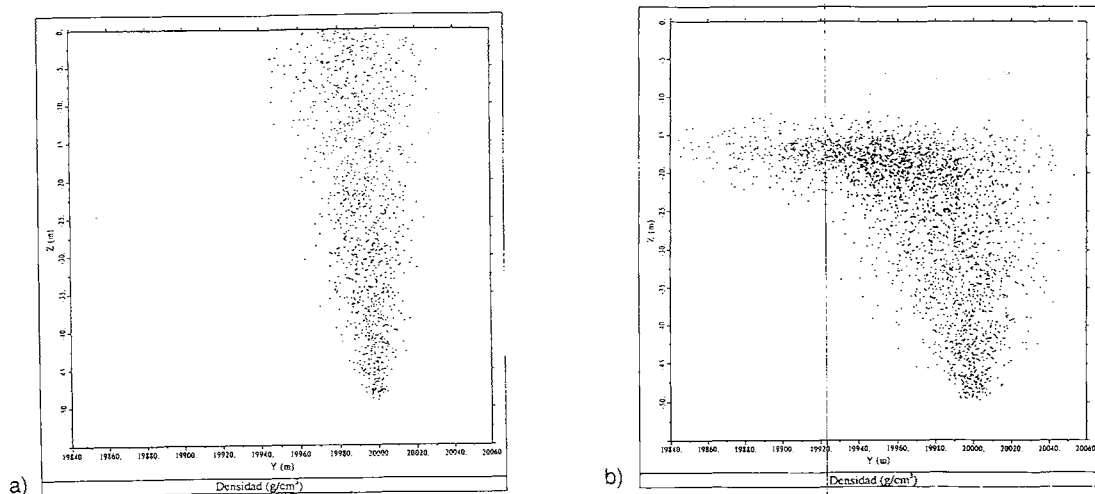


Figura 6. Continuación

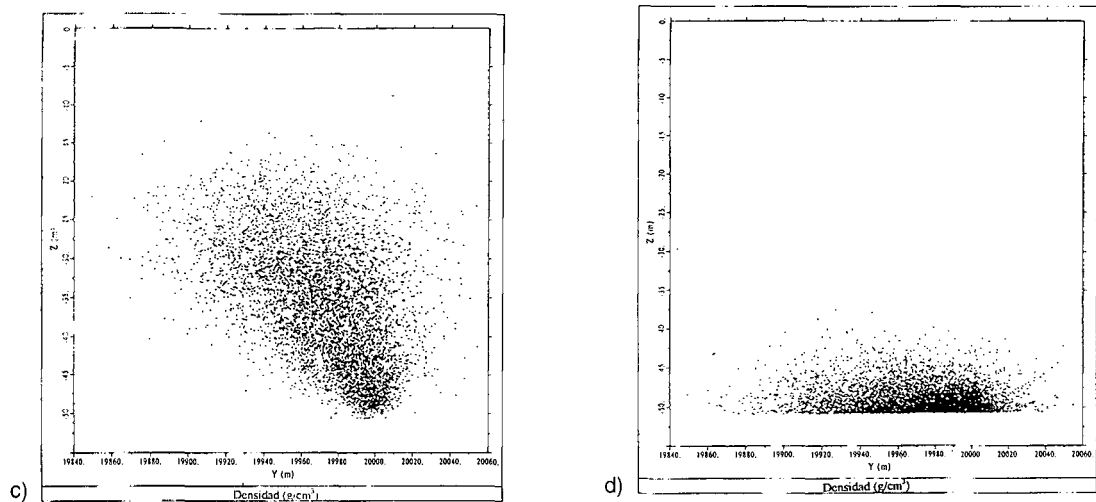


Figura 6. Sensibilidad de la simulación a la densidad de la descarga. En todos los casos la estratificación ambiental es típica de verano: La densidad del efluente es de a) $1,010 \text{ g/cm}^3$, b) $1,026 \text{ g/cm}^3$, c) $1,027 \text{ g/cm}^3$ y d) $1,029 \text{ g/cm}^3$

La Figura 7 muestra las plumas obtenidas en la simulación de la descarga de los diez difusores más lejanos a la costa para el caso de ambiente estratificado y uniforme, respectivamente. El plano $z = 0$ en la Figura 7a corresponde a una profundidad aproximada de 14 metros, mientras que en la Figura 7b corresponde a la superficie libre. En ambos casos la concentración en estos planos es superior a la inicial debido al rápido ascenso del contaminante y a la consiguiente acumulación de partículas en estas regiones. Este fenómeno disminuirá al introducir el efecto de la dilución adicional por “entrañamiento” del agua o mezcla del vertido con el cuerpo receptor. Los efectos del viento son evidentes en la Figura 7b, en la cual los ejes x e y crecen hacia el este y el norte, respectivamente. Las simulaciones se han hecho con 40.500 partículas y un tiempo total de simulación de 30 minutos, con intervalos Δt de 4 segundos. El modelo calcula del orden de 3.700 posiciones por segundo de tiempo CPU en un ordenador ALPHA 7630 AXP (Digital).

Para ilustrar con un ejemplo la solución del campo cercano, en las Figuras 8a,b se presentan las vistas en planta y corte de uno de los multidifusores, donde se aprecia la descarga proveniente de cada una de las cuatro bocas horizontales, así como su rápida fusión en un único penacho. El origen del penacho está situado a final de la fase de chorro puro de la descarga, simulada analíticamente a partir de las ecuaciones propuestas por Fischer *et al.*²⁹.

$$l_M = \frac{M^{3/4}}{B^{1/2}}; \quad l_Q = \frac{Q}{M^{1/2}}; \quad \frac{\mu}{Q} = 0,25 \left(\frac{l_Q}{z} \right) \quad (26)$$

donde l_M es la distancia entre la boca y el punto a partir del cual las fuerzas debidas a gradientes de densidad predominan sobre el exceso de momentum del chorro, l_Q es una escala de longitud dependiente del flujo inicial Q ; μ/Q es la dilución media de la descarga a un distancia z de la boca y M y B son los flujos iniciales de cantidad de movimiento y flotabilidad, respectivamente.

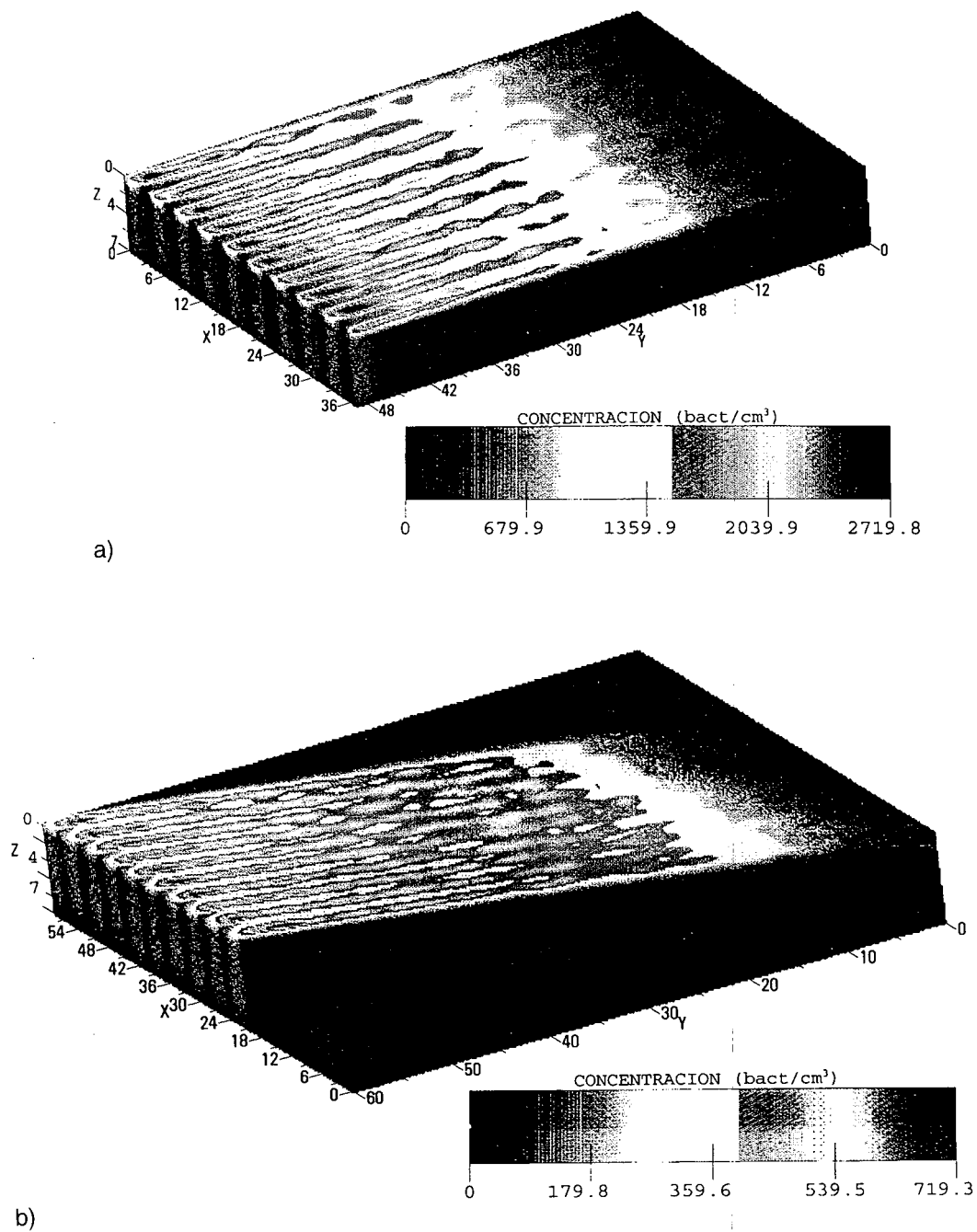


Figura 7. Penachos resultantes de la descarga submarina de sustancias contaminantes en ambiente estratificado (a) y no estratificado (b). En ambos casos las unidades de los ejes son x (15 m), y (22 m) y z (5 m)

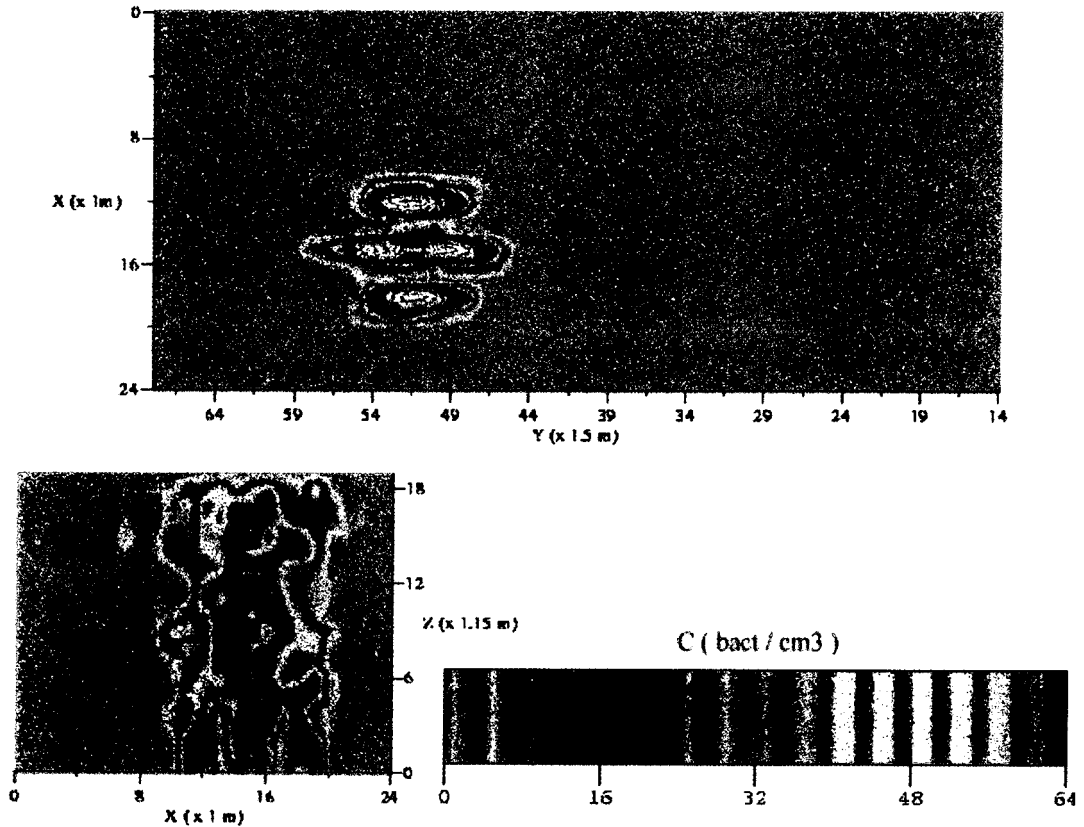


Figura 8. Vista detallada de la descarga a través de las cuatro bocas horizontales de cada difusor; a) planta y b) corte. Las unidades de los ejes son x (1 m), y (1,5 m) y z (1,15 m)

VENTAJAS Y LIMITACIONES DEL MODELO

El modelo LAD_3D ha sido desarrollado para operar desde distinto tipo de ordenadores como "main frames" y PCs. Su formulación de tipo "partículas" hace que el costo computacional y la precisión obtenida sean proporcionales. El tiempo de cálculo también es afectado por el paso temporal, que está limitado no por razones de estabilidad, sino por la fiabilidad de la simulación de los efectos de la flotabilidad en el campo cercano. Para optimizar este aspecto se desacoplan secuencialmente la simulación del *campo cercano* y el *campo lejano* con pasos temporales y cantidad de partículas distintas. Una ventaja adicional de este tipo de modelos es que pueden simular naturalmente distintos tipos de "constituyentes" o fracciones granulométricas de sedimentos en suspensión; también son especialmente aptos para aprovechar las ventajas de las técnicas de computación en paralelo. Las ventajas y limitaciones

numéricas en el tratamiento de los términos advectivos y difusivos ya han sido mencionados anteriormente.

El desarrollo actual del modelo presenta ciertas limitaciones de carácter físico que serán previsiblemente eliminadas en el futuro. Así, el modelado de la turbulencia, actualmente algebraico, debe ser refinado mediante el acoplamiento de un modelo de turbulencia de alto orden (p.e. $K - \epsilon$) y el término de flotabilidad debe ser corregido para incorporar el proceso de dilución por “entrañamiento” de agua en el cuerpo del penacho. Los efectos de la radiación solar sobre la inactivación bacteriana se suponen constantes y no se considera su variabilidad horaria ni por otros factores (p.e. cobertura del cielo, latitud, etc.).

Por otra parte, la formulación del término de difusión por flujo oscilatorio está basada en la teoría de olas, mientras que en determinadas zonas esta aproximación puede no ser la más aconsejable para describir el oleaje. Finalmente, el modelo trata de forma simplificada la fase inicial de “chorro puro” de la descarga. Sin embargo, esta aproximación está razonablemente justificada, ya que su escala espacial es mucho menor que el tamaño total de la del penacho (el cual se resuelve con precisión) y es en esta última fase donde se produce la mayor dilución del contaminante.

CONCLUSIONES

Se ha desarrollado un modelo tridimensional general de dispersión de contaminantes y transporte de sedimentos en suspensión basado en una formulación lagrangiana capaz de reproducir la evolución de una descarga submarina tanto en el *campo cercano* como en el *campo lejano*. Este modelo 3D está acoplado a uno hidrodinámico Q-3D que incluye un módulo 1DV de cálculo de perfiles verticales inducidos por oleaje y viento. Se han realizado pruebas con tres métodos de transformación discreto-continuo en un caso sencillo obteniendo buenos resultados con todos ellos, pero con distintos costos computacionales: tomando el costo de PIC en 100 %, se consigue un costo de aproximadamente 105 % con kPIC y hasta un orden de magnitud más con SPH. En la validación del modelo se han simulado casos sencillos y analíticos 3D y finalmente se ha aplicado al caso real del emisario del Besòs en Barcelona. La simulación realizada ha incluido la evolución en detalle del campo cercano por una parte y la evolución del cuerpo de la pluma por otra, con distintos pasos de tiempo computacional. La distribución de concentraciones de bacterias coliformes obtenida es compatible con la normativa europea en la mayoría de simulaciones realizadas. Sin embargo, estos resultados deben ser contrastados con medidas directas para calibrar adecuadamente el modelo. La comparación con otros modelos comerciales 3D existentes (p. e. CORMIX de Jirka³⁰ que sólo considera una hidrodinámica uniforme o el de Mead y Cooper³¹ que simplifica la hidrodinámica, no incluye el efecto del oleaje, ni resuelve la zona de rompientes) muestra la mayor generalidad de la formulación propuesta.

El presente modelo y su aplicación ilustran como es posible utilizar los modelos numéricos hidrodinámicos y de dispersión como herramientas ingenieriles útiles en la verificación de diseños existentes y predicción de situaciones futuras o hipotéticas. El modelo proporciona elementos de utilidad para la evaluación de los

niveles de contaminación generados por descargas de carácter general para distintas configuraciones de diseño (posición de emisarios, número y tipo de bocas -con o sin multidifusores- o flotabilidad del medio receptor, etc.). El diseño y funcionamiento del emisario submarino pueden ser entonces optimizados para minimizar el impacto ambiental, principalmente en la zona costera. Vertidos accidentales superficiales o roturas de emisarios también pueden ser simulados eficientemente.

Coincidiendo con las conclusiones de un trabajo previo (Rodríguez *et al.*³²) el presente modelo confirma que una correcta simulación del *campo cercano* es altamente sensible a los efectos de la flotabilidad. Por ello, tanto los datos de estratificación o del perfil vertical de densidades del cuerpo receptor (mar o lago) como la utilización de un incremento temporal reducido son claves para obtener una simulación realista de la dispersión de penachos en esta región.

Debe destacarse que para obtener resultados fiables tanto el modelo hidrodinámico como el de dispersión requieren un calibrado detallado a partir de datos de campo y/o experimentos. Este calibrado forma parte de una siguiente etapa, ya en fase de desarrollo. También es interesante realizar una comparación más exhaustiva con otros tipos de modelos existentes con el objetivo de determinar las ventajas de la formulación utilizada, así como para determinar la necesidad de posibles modificaciones y mejoras.

El trabajo pretende ilustrar al potencial usuario (p.e. administración y consultoras) sobre la viabilidad y las ventajas de utilizar este tipo de herramientas ingenieriles.

AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo fue realizado como parte de los proyectos de investigación del grupo CIIRC/LIM-UPC sobre hidrodinámica y calidad de aguas de la zona costera, financiados conjuntamente por Clima Marítimo y Puertos del Estado, la DGICYT, la CICYT y el Proyecto FANS del Programa Europeo MAST3 bajo contrato MAS3-CT95-0037. Los autores agradecen también la atenta colaboración de los profesores Joan P. Sierra y Rafael Mujeriego de la UPC, y de la Empresa FMMSA.

REFERENCIAS

1. C. Allen, "Numerical Simulation of Contaminant Dispersion in Estuary Flows", *Proc. R. Soc. Lond.*, Vol. **A381**, pp. 179-184, (1982).
2. J. Hunter, "Numerical Simulation of Currents in Koombana Bay and the Influence of the Proposed New Power Station", *Env. Dynamics Report ED-83-049*, Univ. of Western Australia, (1983).
3. M. Spaulding y D. Pavish, "A Three-Dimensional Numerical Model of Particulate Transport for Coastal Waters", *Cont. Shelf Research*, Vol. **3**, No.1, pp. 55-67, (1984).
4. B. O'Connor y J. Nicholson, "A Three-Dimensional Model of Suspended Particulate Sediment Transport", *Coastal Eng.*, Vol. **12**, pp. 157-174, (1988).
5. F. Hermosilla, M. Espino, M. García, M. González y A. Sánchez-Arcilla, "RECODE: un modelo Q-3D en elementos finitos para el estudio de la contaminación marina", *9^{er} Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería*, Zaragoza, 3-6 Junio, (1996).

6. I. Glekas, "Application of a Three-Dimensional Model for the Prediction of Pollutant Dispersion in Cyprus Coastal Waters", *Water Science and Tech.*, Vol. 32, No.9 – 10, Pergamon Press, pp. 179-187, (1995).
7. A. Sánchez-Arcilla, F. Collado, C. Lemos y F. Rivero, "Another Quasi-3D Model for Surf-Zone Flows", *ICCE, ASCE*, pp. 316-329, (1990).
8. A. Sánchez-Arcilla, F. Collado y A. Rodriguez, "Vertically Varying Velocity Field in Q-3D Nearshore Circulation", *ICCE, ASCE*, pp. 2811-2838, (1992).
9. S. Massel, "*Hydrodynamics of Coastal Regions*", Elsevier Ocean Series, Vol. 48, (1988).
10. F. Collado, A. Rodriguez, A. Sánchez-Arcilla, M. Coussirat y J. Prieto, "Modelado Q-3D de la zona cercana a la costa", *III Jornadas Españolas de Ing. de Costas y Puertos*, Valencia, pp. 168-180, (1995).
11. L. Davydov, "The Role of Surface Waves in the Transport of Pollutants", *Proc. XXIII IAHR Congress*, Ottawa, pp. 355-359, (1989).
12. G. Csanady, "*Turbulent Diffusion in the Environment*", Reidel, Dordrecht, (1973).
13. S. Ahlstrom, "A Mathematical Model for Predicting the Transport of Oil Slicks in Marine Waters", Batelle Laboratories, Richmond, WA, (1975).
14. I. Vattulainen y T. Ala-Nissila, "Mission Impossible: Find a Random Pseudorandom Number Generator", *Computers in Physics*, Vol. 9, No.5, pp. 500-504, (1995).
15. F. Holly, "Dispersion in Rivers and Coastal Waters", en "*Developments in Hydraulic Engineering 3*", Cap. 1, Novak (Ed.), Elsevier, London, (1985).
16. J. Battjes, "Surf Zone Turbulence", *XX Congress IAHR*, Moscú, pp. 137-140, (1983).
17. E. Thornton, "Variation of Longshore Current across the Surf Zone", *ICCE, ASCE*, pp. 291-308, (1970).
18. K. Nadaoka y B. Hirose, "Modelling of Diffusion Coefficient in the Surf Zone Based on the Physical Process of Wave Breaking", *Proc. 33 Japan Conference on Coastal Eng.*, pp. 26-30, (en japonés), (1986).
19. R. Falconer, "Flow and Water Quality Modelling in Coastal and Inland Waters", *Jour. Hyd. Research*, Vol. 30, No.4, pp. 437-452, (1992).
20. R. Gibbs, M. Mathews y A. Link, "The Relationship between Sphere Size and Settling Velocity", *J. Sed. Petrology*, Vol. 41, pp. 7-18, (1971).
21. J. Richardson y W. Zaki, "Sedimentation and Fluidisation. Part 1.", *Trans. Instn. Chem. Eng.*, Vol. 32, pp. 35-53, (1954).
22. J. Bravo, "Análisis y evaluación de la calidad microbiológica de las aguas costeras", Tesis Doctoral, Univer. Autónoma de Barcelona, (1985).
23. J. Juanes de la Peña, "Indicadores bacteriológicos. Estudio del T_{90} ", *Jornadas sobre proyecto, construcción y vigilancia de emisarios submarinos*, CEDEX, Madrid, (1995).
24. R. Thomman y J. Mueller, "*Principles of Surface Water Quality Modeling and Control*", Harper & Row, New York, (1987).
25. J. Mancini, "Numerical Estimates of Coliform Mortality Rates under Various Conditions", *J. WPCF*, Vol. 50, No.11, pp. 2477-2484, (1978).
26. R. Mujeriego, "Estudio del saneamiento de las zonas costeras de Cambrils y Vilaseca-Salou", *Inf. Sec. Ing. Amb.*, DEHMA, UPC, Barcelona, (1989).
27. G. Lorimer, "The Kernel Method for Air Quality Modelling. I. Mathematical Foundation", *Atmosph. Environ.*, Vol. 20, No.7, pp. 1447-1452, (1986).
28. J. Salat, J. Font y A. Cruzado, "Datos oceanográficos frente a Barcelona (1975-1976)", *Datos Informativos*, Instituto de Investigaciones Pesqueras, CSIC, Barcelona, (1978).
29. H. Fischer, E. List, R. Koh, J. Imberger y N. Brooks, "*Mixing in Inland and Coastal Waters*", Academic Press, New York, (1979).

30. G. Jirka, "CORMIX: Cornell Mixing Zone Expert System", *I.C.E. Short Course on Hydraulics of Sea Outfalls*, Univ. of Hong Kong, (1991).
31. C. Mead y A. Cooper, "Three-Dimensional Numerical Modelling of Coastal Hydrodynamics and Pollutant Dispersal", *II Int. Conf. Hyd. Env. Mod. Coastal, Est. River Waters*, Bradford Ashgate Pub., Vol. 1, pp. 31-41, (1992).
32. A. Rodriguez, A. Sánchez Arcilla, J. Redondo, E. Bahia y J. Sierra, "Pollutant Dispersion in the Nearshore Region: Modelling and Measurements", *Water Science and Tech.*, Vol. 32, No.9 – 10, pp. 169-178 (1995).