

Simulación de la distribución de materia particulada en un lago estratificado

XAVIER CASAMITJANA (*)
GEOFFREY SCHLADOW (**)

RESUMEN. Se describe la distribución de materia particulada en un lago mediante el acoplamiento de un modelo de mezcla con un modelo de partículas. El modelo de mezcla simula la respuesta de la columna de agua estratificada a las fuerzas externas. El modelo de partículas simula la sedimentación, difusión y coagulación de una distribución dada de partículas en la columna de agua. De esta manera, el mecanismo de distribución de materia particulada queda totalmente acoplado a los procesos generales de mezcla del lago.

ABSTRACT. A model is described that represents the coupling of a stratified lake mixing model with a particle settling, coagulation and diffusion model. The lake model simulates the response of the stratified water column to external forcing. The particle model simulates the settling, aggregation and diffusion of a given distribution of particles within this changing water column. This model greatly extends previous work in that particle distribution is now totally linked to the general mixing processes.

1. INTRODUCCION

La variación temporal de la distribución de materia particulada en un lago es el resultado de una serie compleja de procesos físicos, químicos y biológicos, así como de su mutua interacción. Las escalas temporales asociadas a estos procesos cubren un amplio espectro, variando desde milisegundos, para el caso de las reacciones fotosintéticas, hasta meses o incluso años, para el caso de la sedimentación de las partículas más pequeñas. Para tratar de describir la distribución de materia particulada en un lago, es esencial que la interacción entre las partículas y los procesos físicos de mezcla sea representada utilizando la escala temporal adecuada para dichos procesos.

El modelo aquí presentado representa el acoplamiento de un modelo de mezcla de un lago estratificado, con un modelo de distribución de partículas, que caracteriza los procesos de difusión, coagulación y sedimentación. Parametrizando los procesos fundamentales de mezcla, el modelo de mezcla simula la respuesta de la columna de agua estratificada a las fuerzas externas. Al mismo tiempo, el modelo de distribución de partículas simula la sedimentación, agregación y difusión de una distribución dada de partículas en la columna de agua mencionada.

En los siguientes apartados el modelo de mezcla y el modelo de partículas serán descritos y se presentarán los resultados de su aplicación conjunta para calcular la distribución de partículas que sigue a un aporte fluvial.

2. MODELO DE MEZCLA DEL AGUA DE UN LAGO

DYRESM es un modelo unidimensional que simula la distribución vertical de la temperatura y la salinidad en lagos o embalses de tamaño pequeño o medio (Imberger *et al.*, 1978; Spigel e Imberger, 1980; Imberger y Patterson, 1981; Imberger, 1982; Patterson *et al.*, 1984; Hocking *et al.*, 1988; Imberger y Patterson, 1988).

El perfil vertical del lago es representado por un conjunto de, hasta 100 capas lagrangianas, que pueden moverse verticalmente, contraerse o expandirse, en respuesta a aportes y salidas de agua y a flujos máscicos superficiales. El espesor de una capa viene determinado por su posición en la columna de agua, siendo mínimo en la capa superficial y en la termoclina. El intervalo temporal de integración (timestep) varía, siendo tan pequeño como 15 minutos para los procesos de mezcla superficial, y tan grande como 24 horas para los procesos de aporte fluvial. En todos los casos, el intervalo de integración es compatible con la escala temporal del proceso que se modela.

En su presente aplicación el modelo de mezcla utiliza promedios diarios de variables meteorológicas, así como caudales totales diarios de entradas y salidas de agua a través de los ríos. Los flujos superficiales de masa, calor

(*) Departamento de Física e Instituto de Ecología Acuática, Universidad de Girona.

(**) Centre for Water Research, University of Western Australia.

sensible y momento son computados a partir de fórmulas aerodinámicas. Los flujos radiativos de onda corta se distribuyen en la columna de agua de acuerdo con un perfil de atenuación. La radiación de onda larga se supone totalmente absorbida y emitida por la capa más superior, en contacto con la atmósfera.

La dinámica de la capa superficial está basada en un modelo de energía cinética turbulenta de agitación del viento, mezcla convectiva, producción de cizalla (shear production) en la interfase y rizamientos de Kelvin-Helmholtz (Sherman *et al.*, 1978). En cada uno de estos procesos, la energía disponible para la mezcla se compara con la energía potencial necesaria para combinar la capa mezclada con la capa inmediatamente inferior. Si la energía disponible es suficiente, las capas se mezclan, promediándose sus propiedades.

Los aportes fluviales se modelan en tres partes. A medida que el río penetra en el lago, el agua de éste es desplazada hasta que las fuerzas de flotabilidad, debidas a la diferencia de densidad entre el agua del río y del lago, confinan el caudal. Llegados a este punto el río, bien fluye por encima de la superficie del lago, si la densidad es menor, o se sumerge por debajo de su superficie, si su densidad es mayor. Una vez sumergido, el río incorpora progresivamente agua del lago hasta que su densidad equivale a la del lago. A este nivel, el río se introduce horizontalmente en una estrecha distribución determinada por el gradiente local de densidad y las propiedades de su caudal.

Cuando en un embalse se extrae agua por un punto de drenaje, la mayoría del agua procede de una estrecha capa centrada aproximadamente en el punto de drenaje. El espesor de la capa viene determinado por la estratificación, el caudal de salida, y la naturaleza del punto de drenaje.

La mezcla en el hipolimnion se modela mediante un coeficiente de difusión D_t , el cual depende directamente de la disipación de la energía cinética turbulenta, e inversamente de la estratificación (Weinstock, 1981; Ivey and Imberger, 1990),

$$D_t = \frac{\beta \epsilon}{N^2 + k_\epsilon u^2} \quad (1)$$

Aquí k_ϵ representa el número de onda de los remolinos turbulentos, u^* la escala de velocidades turbulentas, ϵ la disipación, β una constante relacionada con la eficiencia para la mezcla de la energía cinética turbulenta, y N la frecuencia de Brunt-Vassala,

$$N^2 = \frac{g \partial \rho}{\rho \partial z} \quad (2)$$

3. MODELO DE DISTRIBUCION DE PARTICULAS

El modelo de partículas empleado está basado en el propuesto por O'Melia (O'Melia, 1980; O'Melia, 1985). La

distribución de partículas de cualquier tamaño puede escribirse como

$$\frac{\partial n_k(z)}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \alpha \lambda(i,j) n_i n_j - n_k \sum_{i=1}^{\infty} \alpha \lambda(i,j) n_i - w_k \frac{\partial n_k}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(A(k,z) \frac{\partial n_k}{\partial z} \right) \quad (3)$$

donde $n_k(z)$ es la concentración de partículas de tamaño k , α es un factor de eficiencia para las colisiones que refleja la estabilidad de las partículas y la química superficial de las mismas, $\lambda(i,j)$ es la frecuencia de colisión, que depende del modelo físico para los contactos entre partículas, w_k representa la velocidad de sedimentación de las partículas de tamaño k , y $A(k,z)$ es un coeficiente de intercambio, que da cuenta de los efectos turbulentos y moleculares. El término de la izquierda de (3) describe la velocidad a la cual el número de partículas de tamaño k , o volumen v_k , cambia con el tiempo. El primer término del lado derecho de (3) representa la velocidad de formación por agregación de partículas de tamaño k , a partir de partículas más pequeñas, dando un volumen total v_k . La expresión $i+j=k$, de debajo del sumatorio, denota la condición $v_i + v_j = v_k$, asegurando la conservación de la masa. El segundo término del lado derecho representa la pérdida de partículas de tamaño k por agregación, para formar agregados de tamaño superior. Esto ocurre cuando una partícula de tamaño k colisiona con una de tamaño i . El tercer término del lado derecho describe la sedimentación de partículas de tamaño k , y el cuarto término representa la difusión.

Los contactos entre partículas en el agua pueden ocurrir por tres diferentes procesos: difusión browniana, cizalladura del fluido y sedimentación diferencial. Las funciones de frecuencia de colisión, para estos procesos, son:

$$\lambda(i,j)^{br} = \frac{2KT(d_i + d_j)^2}{3\mu d_i d_j} \quad (4)$$

$$\lambda(i,j)^{sh} = \frac{1}{6} (d_i + d_j) \left(\frac{\epsilon}{\nu} \right)^{1/3} \quad (5)$$

$$\lambda(i,j)^{sd} = \frac{\pi(\rho_p - \rho)}{72\mu} (d_i + d_j)^3 |d_i - d_j| g \quad (6)$$

Aquí $\lambda(i,j)^{br}$ es el coeficiente bimolecular de difusión browniana para contactos entre partículas de diámetros d_i y d_j , $\lambda(i,j)^{sh}$ es el coeficiente de cizalladura del fluido en presencia de flujo turbulento, $\lambda(i,j)^{sd}$ es el coeficiente de velocidad diferencial de sedimentación, K es la constante de Boltzman, T es la temperatura absoluta μ y ν son las viscosidades absoluta y cinemática respectivamente, y ρ_p es la densidad de las partículas. La dis-

pación ε , según Imberger (1982) puede suponerse igual a la energía transmitida por el viento, y distribuida en la dirección vertical de manera que

$$\varepsilon = \langle \varepsilon \rangle \quad \text{for } z > H - h_1 \quad (7)$$

$$\varepsilon = \langle \varepsilon \rangle \exp - \frac{[(H - h_1 - z) / \sigma]^2}{\sigma^2} \quad \text{for } z < H - h_1 \quad (8)$$

donde z es la profundidad medida desde el fondo del lago, H es la profundidad total del lago, h_1 es la distancia desde el fondo del lago hasta el centroide de la distribución N^2 , y σ es el primer momento de la distribución de N^2 por debajo de h_1 . Por tanto ε es constante en la capa mezclada, y decrece exponencialmente desde la región donde la estratificación es más severa.

Para describir la velocidad de sedimentación de las partículas, se supone válida la ecuación de Stokes:

$$w_s = \frac{g(\rho_p - \rho)}{18\mu} d_k^2 \quad (9)$$

El coeficiente de difusión que aparece en (3) se supone igual a $A(k, z) = D_i + D'_i$, donde D_i viene definido por la ecuación (1) y D'_i es el coeficiente de difusión molecular para la partícula k , para el cual se supone válida la relación de Einstein:

$$D'_i = \frac{KT}{3\pi\eta d_k} \quad (10)$$

Para poder cubrir un espectro óptimo de tamaños para las partículas presentes en el agua de los lagos, requeriremos de una escala logarítmica para el volumen de estas partículas. Cuando dos partículas colisionan, supondremos que el volumen se conserva. Sin embargo, dividiendo el espectro de partículas en un número discreto de clases, distribuidas uniformemente según el logaritmo de su volumen, la suma aritmética de dos volúmenes «standard» no produce necesariamente otro volumen «standard». Por tanto, cuando dos partículas i y j , de dos clases diferentes colisionan, el volumen de la nueva partícula formada se reparte entre entre clases diferentes, según el método propuesto por Lawler *et al.* (1980).

4. ACOPLAMIENTO ENTRE EL MODELO DE MEZCLA Y EL MODELO DE DISTRIBUCIÓN DE PARTICULAS

La concentración de partículas en una de las capas del modelo se representa por $C(I, K)$, donde I designa el número de la capa (hasta un máximo de 100) y K la clase a la que pertenece la partícula (hasta un máximo de 10). El modelo de mezcla trata a la concentración de partículas como cualquier otra propiedad de la capa, como la temperatura o la salinidad. Cuando dos o más capas se mezclan, las concentraciones se promedian. De

manera similar, cuando una capa se suprime debido al drenaje, las partículas son extraídas. Sin embargo, y contrariamente a lo que sucede con la temperatura y la salinidad, la densidad del agua se supone no afectada por la presencia de las partículas. Para casos en los que la concentración de partículas fuera alta, sería necesario tener en cuenta su contribución a la densidad. Por tanto, la mezcla de partículas se realiza en conjunción con el modelo general de mezcla del agua del lago. El término de difusión de partículas en (3) es resuelto con el modelo general de mezcla. Esto parece ser conveniente, ya que así la difusión de partículas se resuelve conjuntamente con la de sal y de calor.

Como en el caso del modelo de mezcla DYRESM, el modelo de mezcla acoplado con el modelo de distribución de partículas opera en dos escalas de tiempo: un intervalo diario de integración (daily timestep), y uno subdiario (subdaily timestep). El valor del intervalo subdiario viene determinado teniendo en cuenta el proceso de mezcla de que se trate. Sin embargo, una vez este intervalo ha sido establecido para un día particular, el modelo avanza con este intervalo de integración, y resuelve las transferencias superficiales, la mezcla superficial, y la mezcla hipolimnética.

Al final de cada ciclo diario, se modelan aquellos procesos que usan un intervalo diario de integración (entradas y salidas de agua). El presente modelo se ha configurado de manera que el caudal del río aporta nuevas partículas al lago. Consecuentemente, la rutina de integración de la ecuación (3) es llamada una vez en cada ciclo diario, inmediatamente después de las rutinas «inflow» y «outflow», que dan cuenta de las entradas y salidas de caudales de ríos. El intervalo de integración de aquella rutina es menor (30 min.), y viene dictado meramente por técnicas computacionales.

5. RESULTADOS

El modelo acoplado ha sido probado usando datos de Canning Reservoir, pantano que se halla en Australia Occidental (Hocking *et al.*, 1988). Canning Reservoir tiene una capacidad total de 88 millones de metros cúbicos, un área superficial de 490 Ha, una profundidad máxima de 62 m y una longitud total de 10 km. Hay, básicamente, 4 torrentes por los cuales el agua entra y 4 puntos de drenaje. Se simuló el período de 1986 que va desde el día 28 de octubre (86301) hasta el 26 de noviembre (86330). A fin de efectuar un test de modelo, durante los primeros tres días se estableció una entrada constante de agua de 50.000 m³ día⁻¹. A este caudal se le asoció una concentración de partículas de 10¹⁰ par m⁻³, para cada una de las clases representadas en la tabla 1. Usando una densidad $\rho_p = 1,05 \text{ gm}^{-3}$, un valor considerado representativo de partículas y agregados formados mayoritariamente de materia orgánica (Weilenmann *et al.*, 1988), aquella distribución de partículas equivale a una concentración total de 1,16 g l⁻¹. Aunque en aguas de lagos la distribución de materia particulada suele disminuir con el tamaño, se ha escogi-

do esta particular distribución para facilitar la presentación gráfica de los resultados. La distribución inicial de partículas en el lago se fijó en cero.

En la figura 1 se presentan los perfiles de temperatura de los días 86303 y 86330, para ilustrar el calentamiento del epilimnion en este período.

La figura 2 ilustra la distribución de partículas con la profundidad para cuatro clases de partículas, el último día de entrada de caudal, el día 86303. Como se puede apreciar por el «pico» en la distribución, la inser-

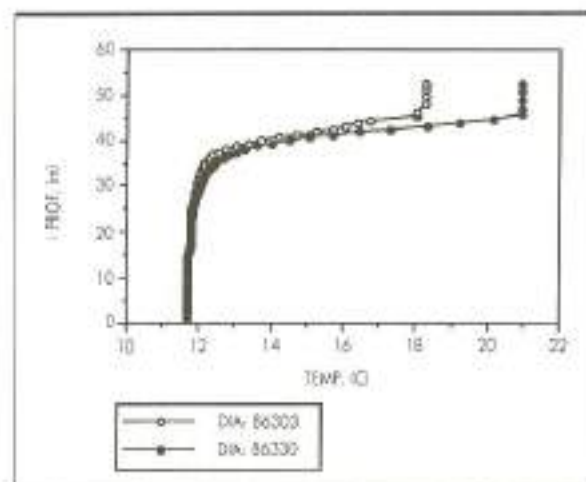


FIGURA 1. Perfiles de temperatura para los días 86303 y 86330.

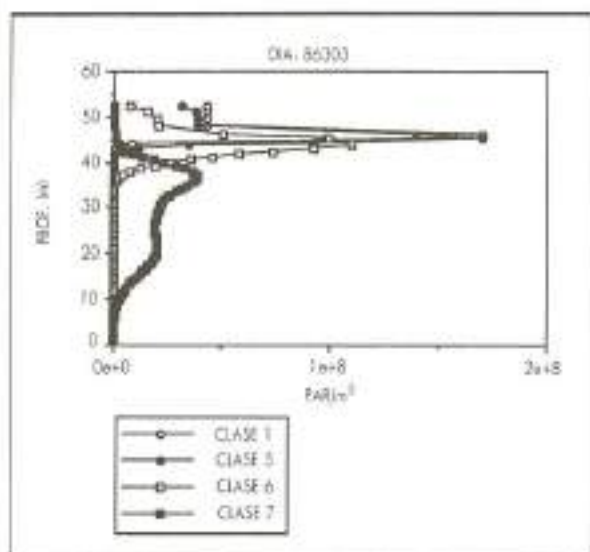


FIGURA 2. Distribución de la concentración de partículas con la profundidad, el día 86303.

ción tuvo lugar en la base del epilimnion, aproximadamente a 46 m de profundidad. En esa figura puede observarse claramente, primero, que las partículas más pesadas sedimentan más rápidamente, y segundo, que las partículas de tamaño más pequeño se distribuyen uniformemente en el epilimnion. Para la clase 1, esta distribución es prácticamente uniforme. Para las clases 5 y 6, la concentración en el epilimnion aumenta con la profundidad.

CLASES	VOLUMENES mm ³	DIAMETROS mm	VELOCIDAD DE SEDIMENTACION m h ⁻¹
1	0,1	0,575	0,28 10 ⁻⁴
2	1	1,240	0,13 10 ⁻³
3	10	2,673	0,61 10 ⁻³
4	100	5,758	0,28 10 ⁻²
5	1.000	12,407	0,13 10 ⁻¹
6	10.000	26,730	0,61 10 ⁻¹
7	100.000	57,588	0,28

TABLA 1. Volumen, diámetro y velocidad de sedimentación a 15 °C para las diferentes clases usadas.

Las figuras 3, 4 y 5 muestran la evolución de las distribuciones los días 86311, 86320 y 86330. En el día 86311 las partículas de la clase 7 prácticamente han desaparecido de la columna de agua. Las de la clase 6 han desaparecido del epilimnion, y su distribución se encuentra centrada a los 31 m aproximadamente. Las dos clases de menor tamaño se encuentran, casi en su totalidad, distribuidas en el epilimnion y termoclina. El día 86330, solamente las partículas de la clase 1 tienen su «pico» de concentración en el epilimnion, ya que su velocidad de sedimentación y pérdida por agregación son muy pequeñas.

El único coeficiente ajustable en el modelo de partículas es el coeficiente de eficiencia de las colisiones α . Su valor es una función compleja de la química superficial, de la naturaleza de las partículas y de los efectos hidrodinámicos (O'Melia, 1987). En las figuras 2, 3, 4 y 5 α se fijó en 0,01, representando una eficiencia en las colisiones del 1 %. La figura 6 nos muestra la distribución de partículas para el día 86303, si la eficiencia hubiera sido $\alpha = 1$, es decir, cada colisión hubiera producido coagulación. Comparando la figura 6 con la figura 2, se puede observar cómo las concentraciones de las dos clases de menor tamaño se han reducido debido al aumento de la coagulación, al mismo tiempo que la con-

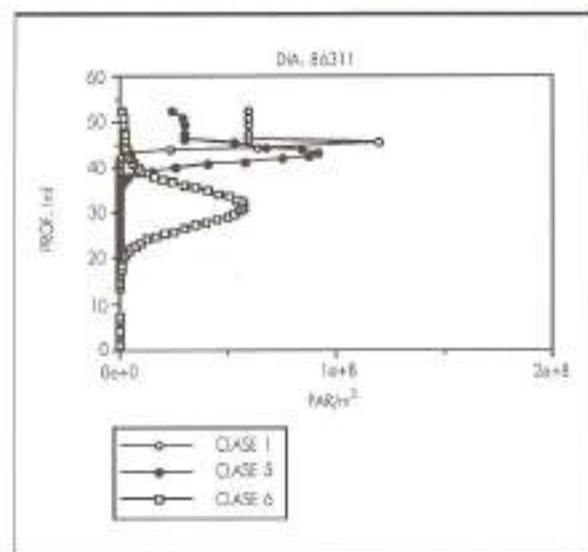


FIGURA 3. Distribución de la concentración de partículas con la profundidad, el día 86311.

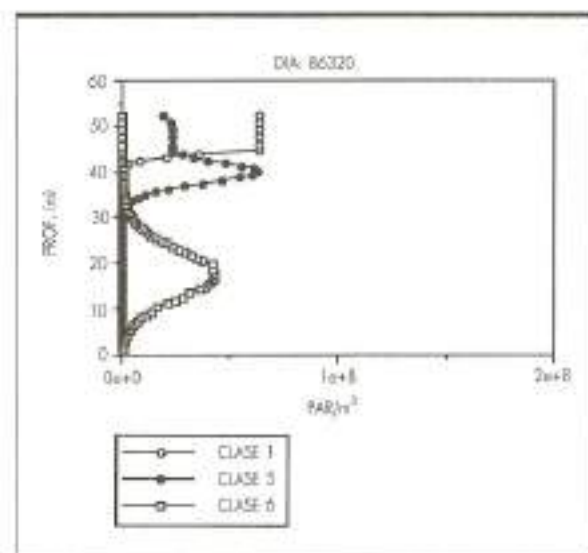


FIGURA 4. Distribución de la concentración de partículas con la profundidad, el día 86320.

concentración de la clase 7 ha aumentado. Este aumento es pequeño debido a que el volumen de las partículas de la clase 7 es grande. Sin embargo, el punto importante a resaltar es que la coagulación puede ser más importante que la sedimentación para desplazar las partículas más pequeñas de los lagos.

6. CONCLUSIONES

Se ha presentado un modelo que combina la dinámica de mezcla en un lago estratificado, con los procesos de

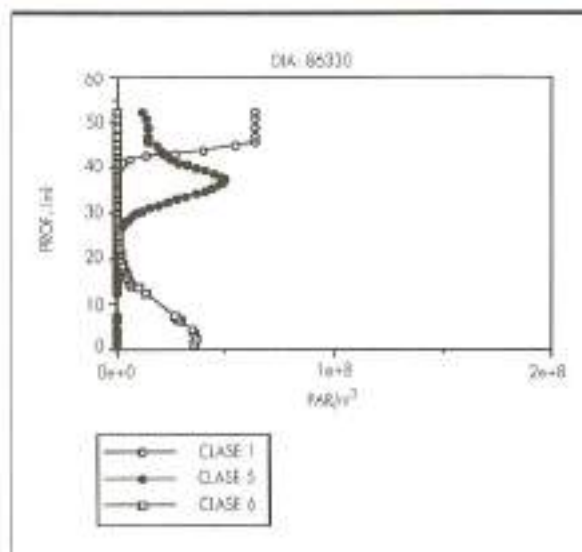


FIGURA 5. Distribución de la concentración de partículas con la profundidad, el día 86330.

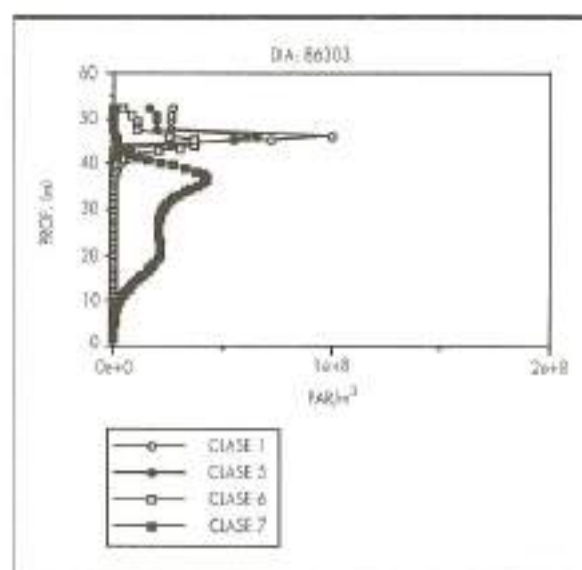


FIGURA 6. Distribución de la concentración de partículas con la profundidad, el día 86303, con $\alpha = 1$.

sedimentación, difusión y coagulación de las partículas. Este modelo extiende ampliamente trabajos anteriores, debido a que la dinámica de la distribución de las partículas se conecta con los mecanismos generales de mezcla. Además, la inserción de partículas por medio de los aportes fluviales es muy realista, desde el punto de vista físico.

Los «tests» presentados para el modelo nos muestran tanto la variabilidad temporal y espacial para la

sedimentación de las partículas según sus diferentes tamaños, como el rango de influencia de la coagulación.

AGRADECIMIENTOS

Esta investigación fue realizada encontrándose el autor principal becado por la Dirección General de Investigación Científica y Técnica (D.G.I.C.Y.T.) en el Centre for Water Research de la Universidad de Western Australia. También se desea agradecer la colaboración prestada al Laboratorio de Ingeniería Hidráulica de la Universidad de Western Australia, así como a los profesores Jörg Imberger y John Patterson y al Dr. Volker Oles por los comentarios y discusiones mantenidas.

REFERENCIAS

- HOCKING, G.; PATTERSON, J. C.; IMBERGER, J., y SCHLADOW, G. (1988). The Canning Reservoir dynamics study. Centre for Water Research. Ref. ED-88-269.
- HOCKING, G. C.; SHERMAN, B. S., y PATTERSON, J. C. (1988). Algorithm for selective withdrawal from stratified reservoir. *J. Hydr. Div. ASCE*, 114, 707-719.
- IMBERGER, J. (1982). Reservoir dynamics modelling. En *Predictions in Water Quality*, E. M. O'Laughlin & P. Callen (eds.), Aust. Acad. Sci. Canberra 223-248.
- IMBERGER, J.; PATTERSON, J.; HEBBERT, B., y LOH, I. (1978). Dynamics of reservoirs of medium size. *J. Hydraul. Div. Am. Soc. Civ. Eng.* 104, 725-743.
- IMBERGER, J., y PATTERSON, J. C. (1981). A dynamic reservoir simulation model. DYRESM: 5. En: *Transport models for inland and coastal waters*. H. B. Fischer (ed.), pp. 310-361. Academic Press, New York.
- IMBERGER, J., y PATTERSON, J. C. (1988). Hydrodynamics of lakes. University of Western Australia, Centre for Water Research Ref. ED-88-276.
- IVEY, G., e IMBERGER, J. (1990). On the nature of turbulence in a stratified fluid, Part 1: The efficiency of Mixing. *J. Phys. Oceanogr.*
- LAWLER, D. F.; O'MELIA, C. R., y TOBIASON, J. E. (1980). Integral Water Treatment Plant Design. From particle size to plant performance, pp. 353-388. In *Particles in water: Characterization, fate, effects and removal*. Adv. Chem. Ser. 189.
- O'MELIA, C. R. (1980). Aquasols: The behavior of small particles in aquatic systems. *Environmental Science and Technology*, 14, pp. 1052-1060.
- O'MELIA, C. R. (1985). The influence of coagulation on the fate of particles, associated pollutants, and nutrients in lakes. En *Chemical Processes in Lakes*, pp. 208-224, Werner Stumm (ed.), John Wiley and Sons.
- O'MELIA, C. R. (1987). En *Particle-particle Interactions*. En *Aquatic Surface Chemistry*, pp. 385-403, Werner Stumm (ed.), John Wiley and Sons.
- PATTERSON, J. C.; HAMBLIN, P. F., y IMBERGER, J. (1984). Classification and dynamic simulation of the vertical density structure of lakes. *Limnol. Oceanogr.* 29, 845-861.
- SHERMAN, F.; IMBERGER, J., y CORCOS, G. M. (1978). Turbulence and mixing in stably stratified waters. *Ann. Rev. Fluid Mech.* 10, 267-288.
- SPIGEL, R. H., e IMBERGER, J. (1980). The classification of mixed layer dynamics in lakes of small to medium size. *J. Phys. Oceanogr.* 10(7), 1104-1121.
- WEINMANN, U.; O'MELIA, C. R., y STUMM, W. (1989). Particle transport in lakes: Models and measurements. *Limnol. and Oceanogr.* 34(1), 1-18.
- WEINSTOCK, J. (1981). Vertical diffusivity for weak or strong stable stratification. *J. Geophys. Res.* 86, C10, pp. 9925-9928.