



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

SIMSAFADIM-CLASTIC: Modelización 3D de transporte y sedimentación clástica subacuática

Òscar Gratacós Torrà



Aquesta tesi doctoral està subjecta a la llicència **Reconeixement- NoComercial – Compartir Igual 4.0. Espanya de Creative Commons.**

Esta tesis doctoral está sujeta a la licencia **Reconocimiento - NoComercial – Compartir Igual 4.0. España de Creative Commons.**

This doctoral thesis is licensed under the **Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0. Spain License.**

Capítulo 4

La ecuación de transporte-sedimentación: solución y discusión

- 4.1 [Introducción](#)
- 4.2 [Discretización espacial y temporal](#)
 - 4.2.1 *Generación de la malla de elementos finitos*
 - 4.2.2 *Criterios de estabilidad de la solución numérica*
- 4.3 [Comparación con soluciones analíticas](#)
 - 4.3.1 [Transporte difusivo](#)
 - 4.3.2 [Transporte dispersivo](#)
 - 4.3.3 [Control del balance de masa](#)
 - *Primer experimento: sistema cerrado sin flujo de agua (I)*
 - *Segundo experimento: sistema cerrado sin flujo de agua (II)*
 - *Tercer experimento: contornos cerrados con flujo de agua entrante (I)*
 - *Cuarto experimento: contornos cerrados con flujo de agua entrante (II)*
 - *Método para solucionar el error en el balance de masa*
 - 4.3.4 [Efecto de la dimensión](#)
 - 4.3.5 [Discusión de los resultados](#)

[↶ Arriba](#)

4.1 Introducción

La simulación del transporte y sedimentación de depósitos clásticos en una cuenca sedimentaria, requiere una solución numérica de la ecuación del transporte que, en este estudio, se ha considerado de tipo advectivo-dispersivo-difusivo.

Hasta el momento, la principal dificultad que presenta la solución numérica de la ecuación del transporte, radica en satisfacer una serie de criterios que garanticen una solución numérica que sea lo más correcta posible. Por ello, en este capítulo se introducen los diferentes criterios de estabilidad utilizados y se comparan los valores obtenidos con el programa con los valores analíticos respectivos para poder verificar el método utilizado. Finalmente, se discuten las limitaciones inherentes del método utilizado para solucionar la ecuación del transporte y el error que supone en el balance de masa final, y se expone un nuevo método para minimizar dichos errores (Bitzer, 2004, inédito).

[↶ Arriba](#)

[Índice](#) [▲](#)

[↶ Arriba](#)

4.2 Discretización espacial y temporal

La solución numérica de la ecuación del transporte requiere una discretización temporal y espacial de la zona de estudio. Esta discretización controlará e influenciará los resultados numéricos de la ecuación y debe ser tratada lo más correctamente posible para poder llegar a una solución que pueda ser considerada fiable.

4.2.1 Generación de la malla de elementos finitos

La discretización espacial de la zona de estudio se basa en la generación de la malla de elementos finitos sobre la que se aplicarán los cálculos pertinentes. Esta malla de elementos finitos utilizada en el programa SIMSAFADIM-CLASTIC se crea utilizando una adaptación del programa NODEMAKER (versión original de Bitzer 2003, inédito, véase apartado 5.2), el cual posiciona los nuevos nodos que definen la malla.

Una vez generados los nodos con sus respectivas coordenadas, el programa SIMSAFADIM-CLASTIC establece la numeración de los mismos y define los elementos triangulares de la malla (y su notación) a partir de dos filas y columnas que definen dos elementos triangulares según el modelo utilizado por Bitzer (1996) -figura 4.1-.

En este modelo, la numeración de los nodos empieza en el origen de coordenadas (situado por el usuario al definir la posición de la primera fila) y crece en dirección al eje x en función del número total de columnas establecidas, hasta terminar la primera fila. Luego se prosigue del mismo modo por las siguientes filas hasta completar el número total de filas que definen la malla.

El número que identifica a un nodo puede calcularse en función del número de la fila y la columna en la que se encuentra según la expresión:

$$nnod = ncol \cdot (j - 1) + i \quad (4.1)$$

Donde **nnod** indica el número del nodo.
ncol indica el número total de columnas.
i indica el número de columna considerado.
j indica el número de fila considerado.

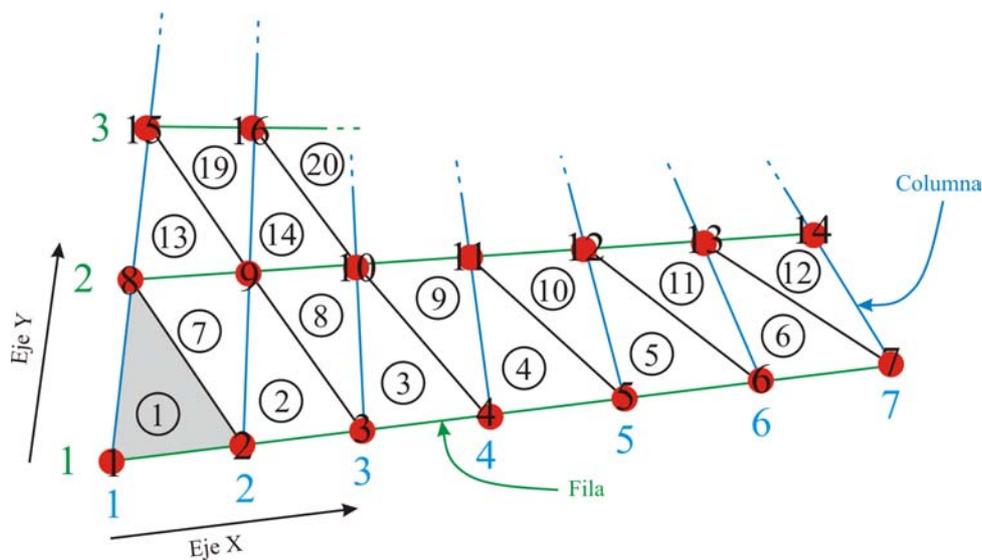


Figura 4.1.- Representación del modelo utilizado para numerar la malla de elementos finitos generada con el programa NODEMAKER. En azul se enumeran las columnas, y en verde, las filas. Los puntos rojos indican los nodos y su correspondiente número se indica encima en color negro. Los triángulos delimitan el área de cada elemento y su índice viene señalado dentro de un círculo.

Representation of the finite element mesh generated with the program NODEMAKER. Red dots are nodes. Two triangular elements are delimited by two rows and two columns. Rounded numbers indicate the triangular elements defined by three nodes. Columns are in blue and rows in green.

Por lo que se refiere a la numeración de los elementos, ésta se realiza de forma similar, iniciándose en el origen de coordenadas y de forma creciente a lo largo de cada fila (figura 4.1). El número de cada elemento también puede ser calculado, aunque la ecuación a utilizar estará en función del número de nodos situados sobre una fila. Así, si el elemento triangular contiene dos nodos sobre una fila inferior, su índice puede encontrarse a partir de la siguiente ecuación:

$$nel_i = (j-1) \cdot (ncol-1) \cdot 2 + i \quad (4.2)$$

Donde nel_i es el número del elemento inferior.

$ncol$ indica el número total de columnas.

i indica el número de columna que limita el elemento por la izquierda.

j indica el número de la fila que limita el elemento por la parte inferior.

En cambio, si el elemento contiene dos nodos sobre una fila superior, su índice puede ser calculado con la ecuación:

$$nel_s = nel_i + (ncol-1) \quad (4.3)$$

Donde nel_s es el número del elemento superior.

nel_i es el número del elemento inferior.

$ncol$ indica el número total de columnas.

4.2.2 Criterios de estabilidad de la solución numérica

Para la solución de la ecuación del transporte y sedimentación (transporte reactivo) existen diferentes métodos de aproximación numérica. Entre estos destacan: el método **SIA** o *Sequential Iteration Approach* -Aproximación Iterativa Secuencial- que consiste en solucionar de manera separada las ecuaciones de reacción o sedimentación y transporte; y el método **DSA** o *Direct Substitution Approach* -Aproximación por Substitución Directa- donde las ecuaciones de reacción y transporte se resuelven simultáneamente.

Ambos métodos son robustos y eficaces, y su mayor o menor adecuación para resolver la ecuación del transporte y sedimentación depende de diferentes factores como puede ser el número y complejidad de las ecuaciones y complejidad de las mismas, dimensión de trabajo (2D o 3D) o el número total de nodos de la malla (Saaltink *et al.*, 2000 y 2004). En consecuencia, puede decirse que no existe un método que sea más robusto y eficaz para solucionar cualquier tipo de modelo ya que, si en un experimento uno de los métodos destaca por ser el más eficiente, en otro puede ser el menos eficaz.

En los experimentos con mallas 2D y 3D relativamente grandes Saaltink *et al.* (2000) consideran que el método SIA es el más eficaz ya que, mientras este método aumenta el uso de la CPU de manera lineal a medida que se incrementa el número de nodos, el método DSA lo hace de manera cuadrática. Es por ello que en el programa SIMSAFADIM-CLASTIC se ha utilizado el método de aproximación SIA, ya que los modelos que se pretenden generar pueden incluir grandes mallas complejas y con un gran número de nodos, haciendo que el método SIA sea la mejor, aunque no la única, aproximación a la solución.

Una vez establecido el método de aproximación para resolver la ecuación del transporte y sedimentación, la solución numérica de la misma requiere aplicar una serie de condiciones espaciales y temporales, que deben ser satisfechas para poder reducir los errores numéricos que se generan y asegurar su estabilidad.

Una de estas condiciones viene impuesta por el denominado *número de grid-Peclet*, **Pe** (ecuación 4.4). Éste es un número adimensional que compara el tiempo característico para la difusión y dispersión definiendo una unidad longitudinal característica (que en este caso coincide con el espaciado de malla Δx) con el tiempo característico para la advección.

$$Pe_x = \frac{v_x \Delta x}{D_{hyd}} \quad (4.4)$$

Donde v_x es la velocidad lineal media del flujo en dirección x .
 Δx es la distancia entre los nodos de la malla.
 D_{hyd} coeficiente de dispersión hidrodinámica.

Por lo tanto, los valores del número de grid-Peclet están relacionados directamente con la dinámica que se establece en el sistema: para valores del número de grid-Peclet altos, el sistema está dominado por el transporte advectivo y, por el contrario, a valores pequeños, el sistema está dominado por los procesos dispersivos y difusivos.

En estos casos donde el número de grid-Peclet es mayor que 1, el sistema está dominado por el transporte advectivo, y debido a este término, la ecuación del transporte se comporta de modo hiperbólico y puede producirse una **dispersión numérica** en los resultados obtenidos en la solución de la ecuación (figura 4.2). Para minimizar este error, la discretización espacial de la zona de estudio requiere una distancia entre los nodos de la malla inferior a la dispersividad (Kinzelbach, 1986) -ver apartado 4.3.2-. En consecuencia, la dispersividad es un factor importante que condiciona la discretización de la zona de estudio.

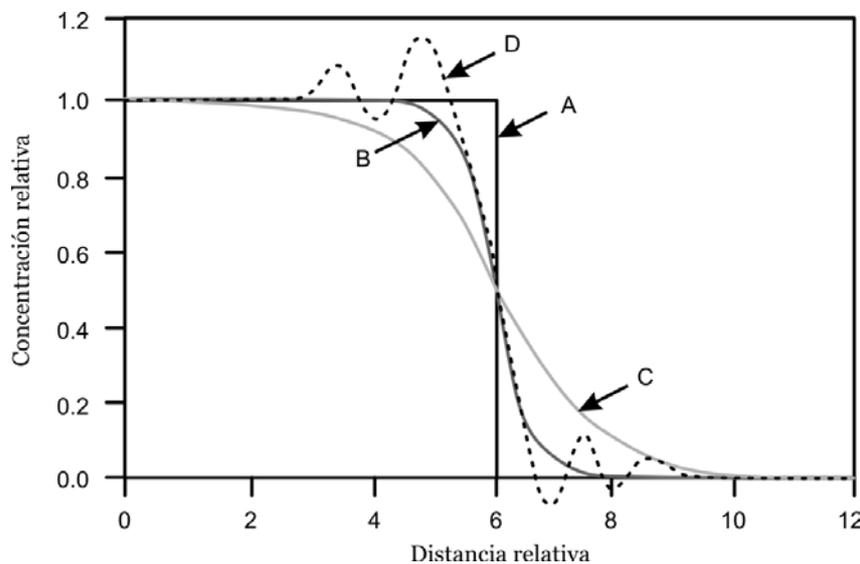


Figura 4.2.- Representación de diferentes frentes de concentración para un flujo simple y para ilustrar los diferentes tipos de errores numéricos que pueden aparecer en la solución numérica de la ecuación del transporte. **A.** Frente de concentración para un flujo sin dispersión. **B.** Solución "exacta" para un transporte con dispersión. **C.** Solución numérica para el caso B que exhibe una dispersión numérica. **D.** Solución numérica para el caso B pero presentando un comportamiento oscilatorio. Modificada de Konikow (1996).

Representative breakthrough curves for a simple flow and transport problem to illustrate types of numerical error that may occur in numerical solution to transport equation. A. Plug flow having no dispersion. B. "Exact" solution for transport with dispersion. C. Numerical solution for case B that exhibits effects of numerical dispersion. D. Numerical solution for case B that exhibits oscillatory behaviour. Modified from Konikow (1996).

El transporte dispersivo representa las inhomogeneidades presentes dentro del sistema. Al ser la dispersividad una cantidad que depende de la escala, sus valores deben ser escogidos en función de la escala del ejemplo a realizar. Obviamente, un transporte dispersivo utilizando una malla con distancias entre nodos grandes, conlleva inhomogeneidades a gran escala que no serán observables en ejemplos con distancias entre nodos menores, y viceversa.

El número de grid-Peclet también puede ser definido a partir de la relación de dos nuevos números adimensionales llamados números de **Damköhler**, que se expresan según las ecuaciones 4.5 y 4.6:

$$\text{Damköhler número I} = \frac{k_d \Delta x}{v} \quad (4.5)$$

$$\text{Damköhler número II} = \frac{k_d \Delta x^2}{D_{hyd}} \quad (4.6)$$

Donde v es la velocidad lineal media del flujo.
 Δx es la distancia entre los nodos de la malla.
 D_{hyd} coeficiente de dispersión hidrodinámica.
 K_d volumen de material que ha reaccionado (considerando una reacción química) por unidad de volumen por unidad de tiempo.

Estos dos números se pueden interpretar como una medida de la tendencia a la reacción (o sedimentación) o al transporte dentro del sistema. En este sentido, si el número de grid-Peclet es alto la influencia del número de Damköhler I es mayor y, por lo tanto, indica que el sistema está dominado por el transporte advectivo. Si, por el contrario, el número de grid-Peclet es bajo, el número de Damköhler II es el de mayor influencia e indica que el sistema está dominado por la sedimentación.

Desde un punto de vista temporal, también existe una limitación importante a considerar para la solución numérica de la ecuación del transporte. Esta limitación parte de la idea que los intervalos de tiempo utilizados en el avance temporal del programa tienen que ser escogidos de manera que (Bitzer, 1997) “la distancia máxima que una partícula virtual pueda viajar durante el intervalo de tiempo definido sea inferior a la distancia existente entre dos nodos adyacentes de la malla establecida” (figura 4.3).

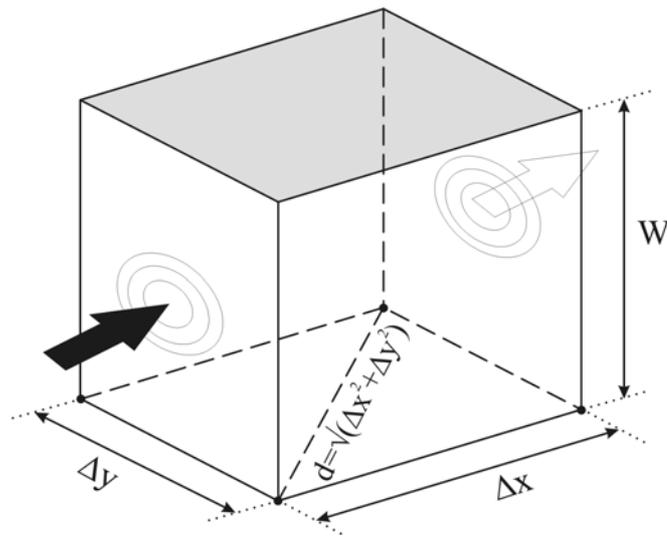


Figura 4.3.- Esquema representativo de las distancias máximas que puede recorrer una partícula dentro de un elemento representativo, teniendo en cuenta que la partícula puede viajar tanto en la horizontal como en la vertical en función del proceso dominante: transporte o sedimentación. d es la distancia máxima en la horizontal si domina el transporte, y W (profundidad de agua) es la distancia máxima vertical si domina la sedimentación. Modificada de Bitzer y Pflug (1990).

Maximum distance (horizontal and vertical) that can be covered by a particle inside a representative element in function of the dominant process (transport or deposition). d is the maximal distance in the horizontal if transport dominates, and W (water depth) is the maximal vertical distance if settling dominates. Modified from Bitzer and Pflug (1990).

Teniendo en cuenta este principio, se puede extraer el intervalo de tiempo de avance o de cálculo en función del denominado **criterio de Courant** o *Courant-Friedrichs-Lewy (CFL)* que se define según la siguiente expresión:

$$CFL = \frac{(v\Delta t)}{\Delta x} \quad (4.7)$$

Donde **CFL** es un número adimensional que relaciona el espaciado de malla (Δx) con la velocidad de flujo (v)

Considerando que CFL es igual a 1, el criterio proporciona un valor de Δt (que llamaremos $\Delta t_{courant}$) que asegura la estabilidad de la solución numérica (Steeffel y MacQuarrie, 1996).

En este punto, es importante volver a la idea principal de la cual parte el criterio de Courant: “...**distancia máxima** que una partícula virtual pueda viajar durante el intervalo de tiempo definido...”. Como se puede ver reflejado en esta cita, la distancia

máxima que podrá recorrer una partícula estará en función de la velocidad del flujo (como se define en la ec. 4.7) y, por tanto, pueden considerarse dos situaciones:

- Cuando el sistema esté dominado por el transporte (dominio del número de Damköhler I) las partículas viajarán con el flujo y la distancia máxima que podrán recorrer dependerá del espaciado de malla y de la velocidad del flujo. En estos casos, el intervalo de tiempo $\Delta t_{courant}$ vendrá definido por la ecuación:

$$\Delta t_{Courant} = \frac{\Delta x}{v} \quad (4.8)$$

Donde, v se refiere a la velocidad lineal del flujo y Δx a la distancia máxima entre nodos.

- En cambio, cuando la velocidad del flujo sea baja el sistema estará dominado por la reacción o deposición (dominio del número de Damköhler II), y la distancia máxima que podrá recorrer cada partícula estará en función de la profundidad de agua presente y de la velocidad de deposición. Por consiguiente, en estas situaciones, estos dos parámetros son los que redefinen la ecuación 4.7, obteniéndose la ecuación siguiente:

$$CFL = \frac{(v_s \Delta t_{Courant})}{W} \quad \text{de la que se puede extraer:} \quad \Delta t_{Courant} = \frac{W}{v_s} \quad (4.9)$$

Donde, en este caso, v_s se refiere a la velocidad de deposición y W a la profundidad de agua o distancia máxima que puede recorrer una partícula en la vertical.

Teniendo en cuenta estas limitaciones, el programa SIMSAFADIM-CLASTIC aplica un esquema automático de avance temporal que compara las velocidades (tanto de transporte como de deposición) y las diferentes distancias que puede recorrer una partícula, tanto en la horizontal (distancia entre los nodos) como en la vertical (profundidad de agua) para calcular el intervalo de tiempo de avance necesario para la solución numérica y satisfacer el citado criterio de Courant (figura 4.4). De este modo, el programa avanza al intervalo de tiempo que corresponde al proceso más rápido que se produce dentro del sistema. Así, si el sistema está dominado por la advección, el tiempo de avance o $\Delta t_{courant}$ toma el valor de dt_f (tiempo de transporte). En cambio, si está dominado por la deposición, toma el valor de dt_s (tiempo de deposición).

El intervalo de tiempo $\Delta t_{courant}$ normalmente es más pequeño (minutos o días) que los intervalos de tiempo impuestos por el usuario en el experimento (que denominaremos Δt_{layer} y que generalmente es de años). En consecuencia, para cada intervalo de tiempo $\Delta t_{courant}$ obtenido, se calcula el sistema de flujo y el transporte en toda la cuenca, teniendo en cuenta que, aunque se trata de un flujo en régimen transitorio, se considera en régimen estacionario dentro de un intervalo de tiempo $\Delta t_{courant}$.

Cada cálculo del sistema de flujo y el transporte realizado en un incremento de tiempo $\Delta t_{courant}$ proporciona un valor de concentración para cada nodo en toda la cuenca (C_n) según el sistema de flujo presente en la misma (ver figura 4.4). Este valor

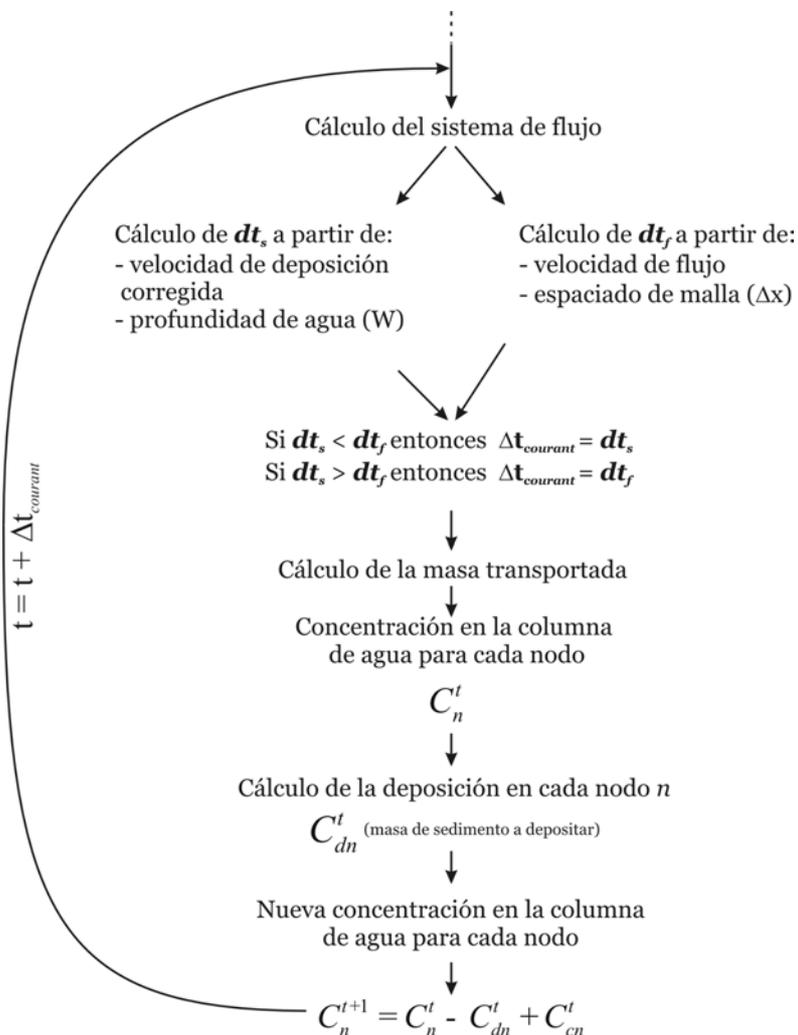


Figura 4.4.- Esquema del avance temporal utilizado en el modelo para el cálculo del flujo, transporte y sedimentación. Véase explicación en el texto.

Time discretization utilized for fluid flow, transport and sedimentation calculation. For this purpose, the program compare two time steps: transport time (dt_f) and settling time (dt_s) to determine which one is the smaller.

de concentración puede incrementarse en función de una parte del sedimento producido por organismos productores de carbonato (C_{cn}) que es susceptible de ser transportado. La masa de sedimento depositada en cada nodo (C_{dn}) dentro de un incremento de tiempo $\Delta t_{courant}$ se extrae y calcula a partir de la concentración C_n presente en la columna de agua suprayacente. De este modo, se obtiene un nuevo valor de concentración en la columna de agua para cada nodo ($C_n^{t+\Delta t}$) que pasa a ser transportada en el siguiente intervalo de tiempo $t+\Delta t_{courant}$.

[↶ Arriba](#)

[Índice ↴](#)

↶ Arriba

4.3 Comparación con soluciones analíticas

Para poder verificar los resultados numéricos obtenidos por el programa SIMSAFADIM-CLASTIC y contrastar su grado de fiabilidad se han realizado diferentes cálculos analíticos que se han comparado con los citados resultados. Estos cálculos se centran sobre todo en comparar y analizar los resultados que se obtienen aplicando un transporte difusivo y/o dispersivo, así como controlar los errores que pueden producirse en el balance de masa. Con este fin se han realizado una serie de experimentos que se asimilan a las condiciones establecidas en el cálculo analítico para su correcta comparación.

↶ Arriba

4.3.1 Transporte difusivo

En relación al transporte difusivo, la comprobación de los resultados numéricos obtenidos se ha realizado utilizando la solución analítica propuesta por Freeze y Cherry (1979) para este tipo de transporte.

La *primera Ley de Fick* indica que la masa difusa que pasa a través de una sección definida, por unidad de tiempo, es proporcional al gradiente de concentración según la ecuación:

$$F = -D^* \frac{dC}{dx} \quad \left| \begin{array}{l} \text{donde } F \text{ (flujo de masa) es la masa por unidad de área y tiempo.} \\ D^* \text{ es el coeficiente de difusión.} \\ C \text{ es la concentración.} \\ x \text{ es la coordenada espacial.} \end{array} \right. \quad (4.10)$$

A partir de esta ecuación, si se considera la ecuación de continuidad, puede derivarse una ecuación diferencial que relaciona la concentración de una masa difusa respecto al espacio y el tiempo. En una dimensión, la relación que define esta ecuación se conoce como la *segunda Ley de Fick*, y se expresa como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad \left| \begin{array}{l} \text{donde } D^* \text{ es el coeficiente de difusión.} \\ C \text{ es la concentración.} \\ t \text{ es el tiempo.} \\ x \text{ es la coordenada espacial.} \end{array} \right. \quad (4.11)$$

Considerando las siguientes condiciones iniciales y de contorno:

$$\begin{aligned} C(x,0) &= 0 & x &\geq 0 \\ C(0,t) &= C_0 & t &\geq 0 \\ C(\infty,t) &= 0 & t &\geq 0 \end{aligned}$$

La solución analítica de la ecuación 4.11 puede expresarse como (Freeze y Cherry, 1979):

$$C(x,t) = C_0 \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{D^*t}}\right)$$

donde **erfc** es la función de error complementaria. (4.12)
C es la concentración.
C₀ es la concentración inicial.
x es la coordenada espacial.
D* es el coeficiente de difusión.
t es el tiempo.

Para comparar la solución numérica analítica con la numérica obtenida con el programa SIMSAFADIM-CLASTIC, se ha realizado un experimento cuyas características pueden resumirse en la figura 4.5 y en la tabla 4.1.

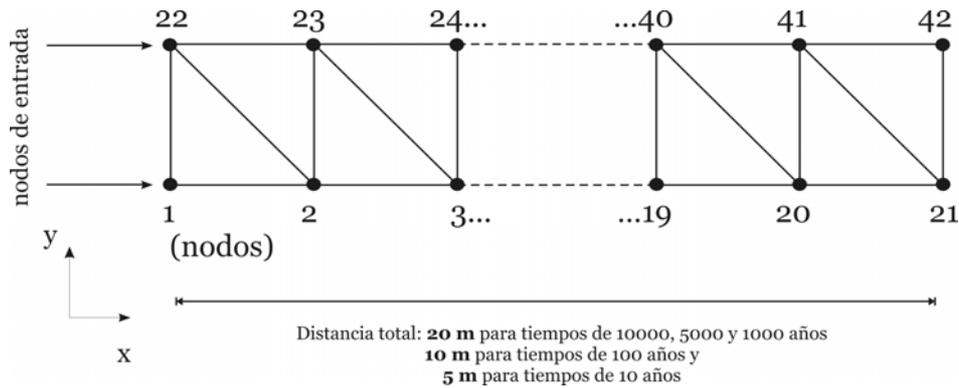


Figura 4.5.- Esquema del experimento utilizado para la comparación con los valores analíticos. En él sólo se consideran dos filas de nodos para asimilar el experimento a un ejemplo unidimensional.

Initial configuration of the experiment considering a diffusive transport. Note that the experiment has been designed as unidimensional and includes only two rows of nodes in order to assimilate it to the analytical calculation.

Tabla 4.1.- Valores introducidos en el experimento considerando un transporte difusivo.

Initial data introduced in the experiment considering only a diffusive transport.

Número de filas y columnas	2 filas por 21 columnas
Concentración inicial en los nodos de entrada	0,2 (Tn/m ³)
Tiempo total del experimento	10000, 5000, 1000, 100 y 10 años
Espaciado de malla (en función del tiempo total de cálculo)	1 metro para los tiempos de 10000, 5000 y 1000 años 0,5 metros para el tiempo de 100 años 0,25 metros para el tiempo de 10 años
Coefficientes de difusión utilizados	1x10 ⁻⁹ m ² /s 1x10 ⁻¹⁰ m ² /s

Este experimento considera una malla de elementos sencilla de dos filas de 21 nodos cada una que puede equipararse a un modelo unidimensional y que puede, por lo tanto, compararse con la solución analítica expuesta en la ecuación 4.12 para modelos de una sola dimensión. Se han realizado diferentes cálculos variando el coeficiente de difusión (dos diferentes) y el tiempo total de cálculo (cinco diferentes) -tabla 4.1-.

Observando los resultados del experimento (figura 4.6) puede apreciarse como los diferentes frentes de concentración calculados por el programa SIMSAFADIM-CLASTIC se ajustan muy bien a los resultados analíticos obtenidos para los cinco tiempos calculados y para los dos coeficientes de difusión considerados.

De este modo, puede decirse que el programa SIMSAFADIM-CLASTIC no genera errores en el cálculo del transporte difusivo y los resultados se ajustan perfectamente a los resultados analíticos correspondientes.

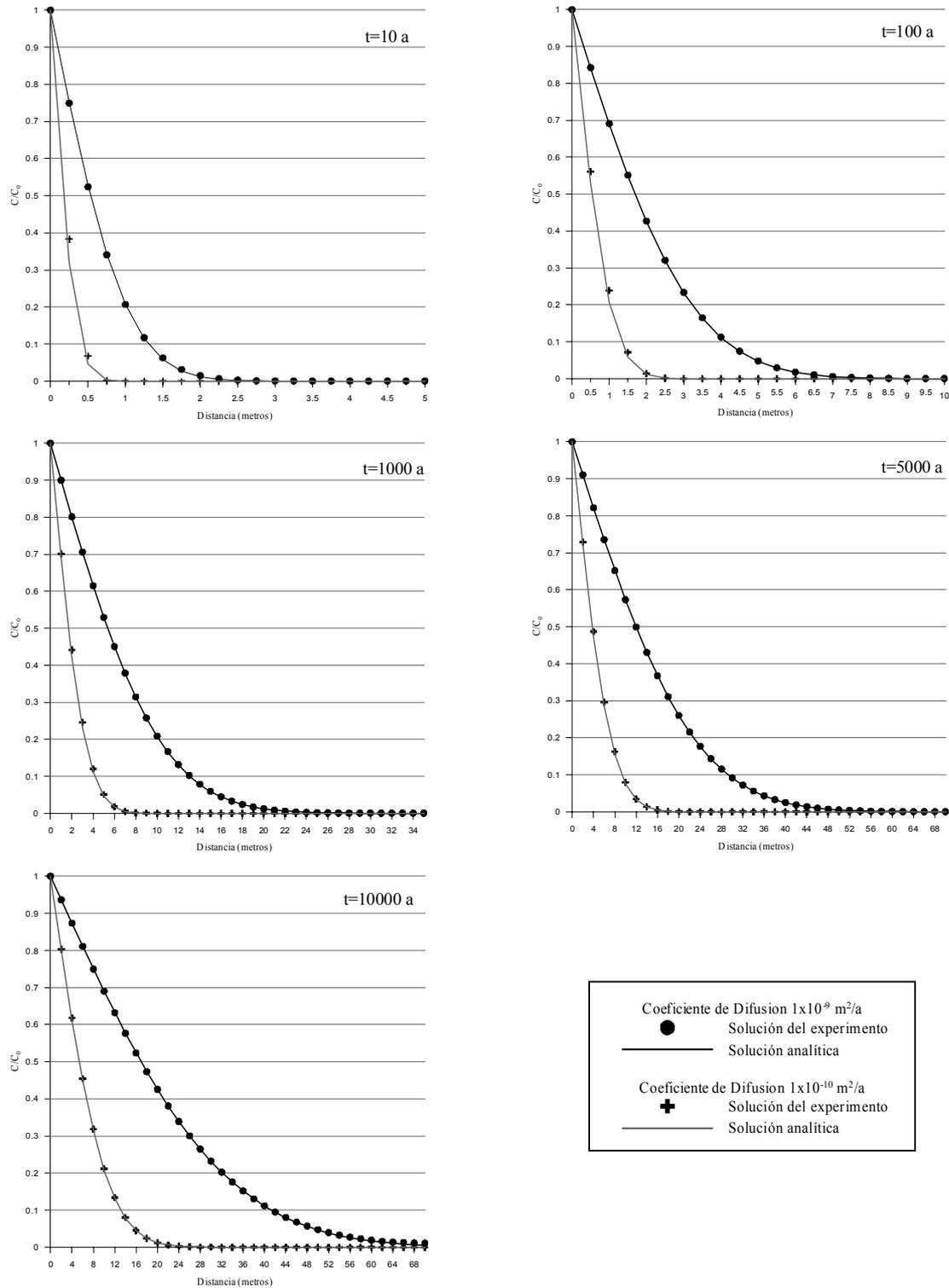


Figura 4.6.- Comparación de la distribución de los frentes de concentración obtenidos en la solución analítica y en el experimento utilizado para verificar la validez del modelo de transporte difusivo propuesto. Los diagramas muestran los resultados en función de los dos coeficientes de difusión utilizados y para cada tiempo total de cálculo. En el eje y se indica la relación entre la concentración final (C) y la concentración inicial (C_0). En el eje x se representa la distancia respecto al nodo de entrada (situado en el origen, a cero metros). Nótese el cambio de escala en el eje X para los diferentes tiempos calculados.

Representation for different concentration fronts in function of the diffusion coefficient (dots and crosses) for different total time of calculus (t) in comparison with analytical data (continuous line). C is the concentration and C_0 the initial concentration. The inflow sediment is located in $x=0$ m. Note the change in the X axis scale.

↶ Arriba

4.3.2 Transporte dispersivo

La comprobación de los resultados numéricos obtenidos considerando un transporte sin difusión (transporte advectivo-dispersivo), se ha realizado comparando estos resultados con la solución analítica que deriva de la ecuación del transporte (ver ecuación 3.10), que puede simplificarse según la fórmula:

$$\alpha_x \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) - v_x \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right) = \left(\frac{\partial C}{\partial t} \right) \quad (4.13)$$

Donde α_x es la dispersividad en dirección x .
 C es la concentración de sedimento en la columna de agua.
 v_x es la velocidad lineal del flujo en dirección x .
 t es el tiempo.

Considerando las siguientes condiciones iniciales y de contorno que indican, respectivamente que, para todos los intervalos de tiempo considerados, en el punto de entrada de sedimento ($x = 0$) la concentración C es igual a la concentración inicial C_0 , y que en todo el eje x , en el instante inicial, la concentración es cero:

$$\begin{aligned} C(0, t) &= C_0 & t &\geq 0 \\ C(x, 0) &= 0 & x &\geq 0 \end{aligned}$$

Entonces, la solución analítica propuesta para la ecuación del transporte advectivo-dispersivo (ecuación 4.13) es (Domenico y Schwartz, 1990):

$$C(x, t) = \left(\frac{C_0}{2} \right) \operatorname{erfc} \left[\frac{(x - vt)}{2} (\alpha_x vt)^{1/2} \right] \quad (4.14)$$

Donde α_x es la dispersividad.
 erfc es la función de error complementaria.
 v es la velocidad lineal.
 t es el tiempo.
 x es la distancia (en metros).
 C es la concentración de sedimento en la columna de agua.
 C_0 es la concentración inicial.

Para comparar los resultados de esta ecuación analítica con los obtenidos con el programa SIMSAFADIM-CLASTIC, se ha vuelto a realizar un experimento sencillo con una malla de dos filas de 50 nodos cada una con una separación de malla de 100 por 100 metros que reproduce un sistema que se puede considerar unidimensional y comparable con el analítico (figura 4.7). En este ejemplo se han aplicado diferentes intervalos de

tiempo de avance (conseguidos variando el intervalo $\Delta t_{courant}$) y diferentes valores de dispersividad para controlar si estos factores generan diferencias significativas con los resultados obtenidos analíticamente (tabla 4.2).

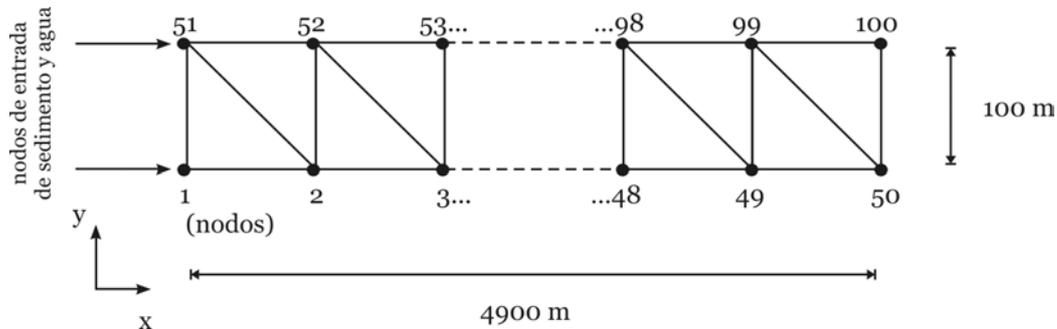


Figura 4.7.- Esquema del experimento utilizado para comparar los resultados mediante un transporte advectivo-dispersivo obtenidos numéricamente con el programa y los obtenidos analíticamente. En el ejemplo sólo se consideran dos filas de nodos para asimilarlo a un ejemplo unidimensional.

Initial configuration of the experiment considering an advective-dispersive transport. Note that the experiment has been designed as unidimensional and includes only two rows of nodes in order to assimilate it to the analytical calculation.

Tabla 4.2.- Valores introducidos en el experimento considerando un transporte advectivo-dispersivo.

Initial data introduced in the experiment considering an advective-dispersive transport.

Número de filas y columnas	2 filas por 50 columnas
Concentración inicial en los nodos de entrada	100 (Tn/m ³)
Tiempo total del experimento	10 años
Espaciado de malla (dirección x e y)	100 x 100 metros
Total eje X e Y (respectivamente)	4900 m y 100 m
Velocidad lineal	154 m/a
Dispersividad longitudinal	100 m
Factores que multiplican al tiempo de Courant	1, 2, 0.5 y 0.1

Como se puede observar en la figura 4.8, los resultados numéricos obtenidos a partir de diferentes incrementos de tiempo de *Courant* (para el incremento de tiempo de *Courant* o $1\Delta t_{courant}$ establecido por el programa, $2\Delta t_{courant}$, $0.5\Delta t_{courant}$ y $0.1\Delta t_{courant}$) son ligeramente diferentes en función de la fila del experimento considerada (fila con nodos del 1-50 o fila con nodos del 51-100) debido, principalmente, a la anisotropía que generan los elementos triangulares de la malla de elementos finitos. No obstante, ambos resultados se aproximan a los obtenidos analíticamente, lo que indica su coherencia. Las diferencias presentes entre ambos tipos de valores entran dentro de los márgenes aceptables y se pueden atribuir a la propia dispersión numérica de los cálculos (Kinzelbach, 1992).

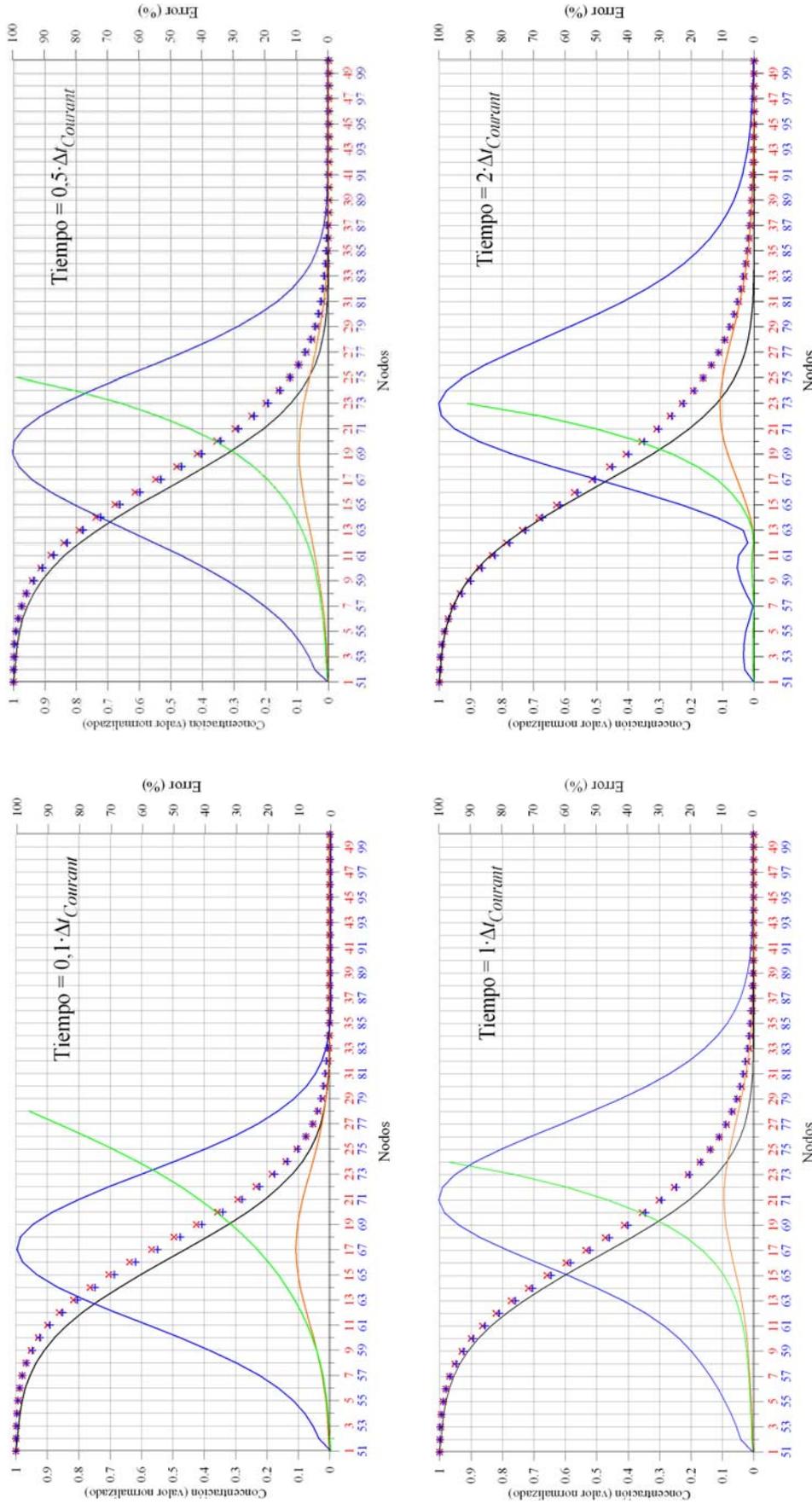
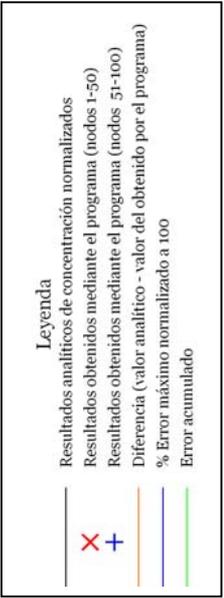


Figura 4.8.- Comparación de la distribución de los frentes de concentración calculados analíticamente y mediante el programa SIMSAFADIM-CLASTIC al final del experimento de la figura 4.7 y considerando un transporte por dispersión. Los cuatro gráficos muestran los resultados para diferentes tiempos de avance determinados a partir de diferentes factores que multiplican al tiempo de avance de Courant. También se representa la diferencia entre los valores analíticos y los obtenidos mediante el programa y el error que supone (en % máximo normalizado a 100 y acumulado).

Figure 4.8.- Representation of the different concentration fronts (blue and red crosses) considering a dispersive transport and for different time steps (note the factor that multiplies the Courant time step) in comparison with analytical solution (black line). The maximal error normalized at 100% (blue line) is represented too.



Los diferentes valores de tiempo de avance considerados no producen variaciones muy grandes en los resultados obtenidos. El rango de error es similar en todos los casos y sólo se observa un ligero cambio en la morfología de la curva, que provoca al incrementar el tiempo de avance un desplazamiento hacia el exterior (más lejos del origen) del punto donde se sitúa el máximo error (figura 4.9).

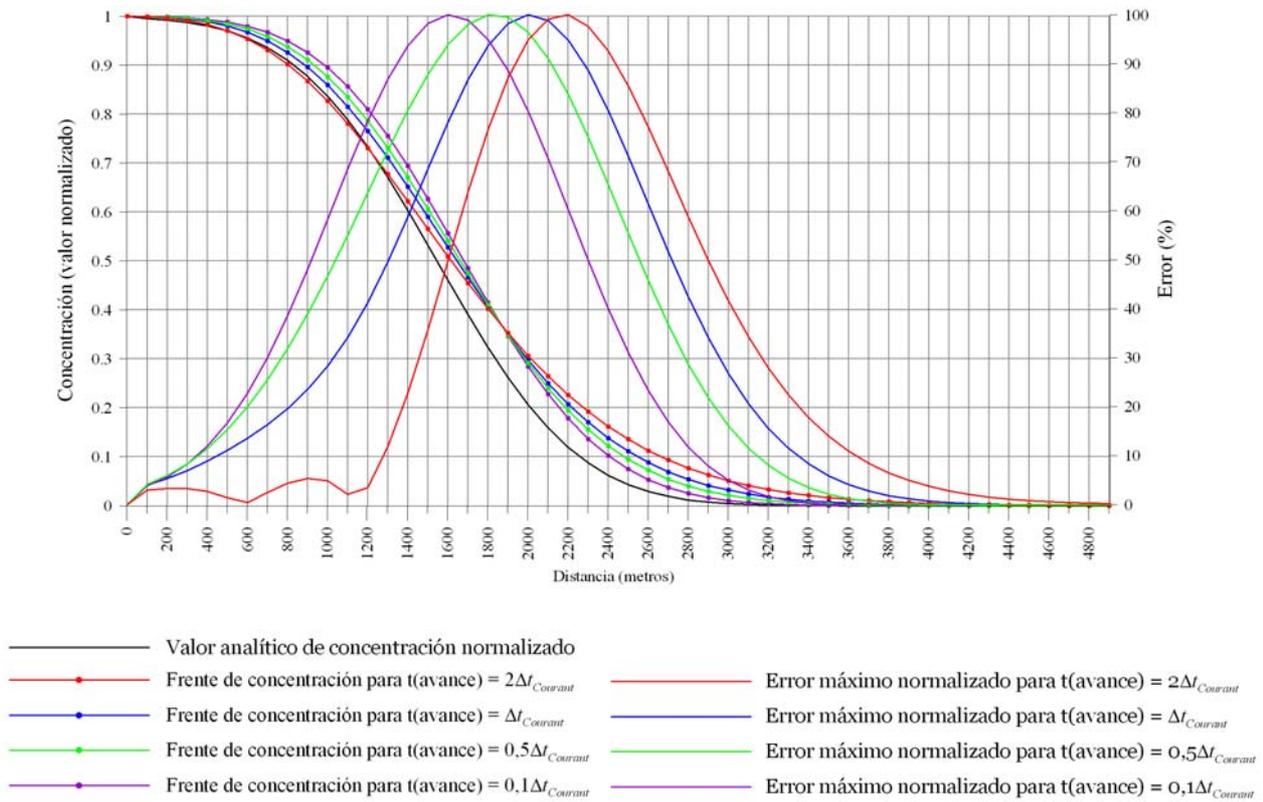


Figura 4.9.- Comparación entre el resultado analítico considerando un transporte advectivo-dispersivo utilizando valores de dispersividad de 100 m (línea negra) y los resultados obtenidos por el programa (frentes de concentración) utilizando diferentes tiempos de avance, así como los respectivos errores máximos normalizados al 100% (líneas de colores).

Representation of analytical solution (black line) for an example with dispersivity of 100 m in comparison with concentration fronts (colour lines with dots) for different time-steps (note the factor that multiplies the Courant time-step). The maximal error normalized at 100% (colour lines) is represented too.

Por otra parte, si se realiza el mismo experimento pero manteniendo fijo el tiempo de avance calculado por el programa y variando los valores de dispersividad, se constata que existe cierta diferencia entre los valores obtenidos analíticamente y los calculados mediante el programa. Esta diferencia depende, básicamente, de la relación existente entre el espaciado de la malla y los valores de dispersividad utilizados, tal y como indica el número de grid-Peclet.

Así, como puede verse reflejado en la figura 4.10, cuando los valores de dispersividad son inferiores al espaciado de malla (dispersividades de 10 y 50 m), se produce una dispersión numérica localizada preferentemente en la zona próxima al punto de entrada del material. Por lo contrario, cuando los valores de dispersividad son superiores al espaciado de malla (valores de 150 y 200 m) se observa que esta dispersión se desplaza hacia las zonas más distales, ya que los valores altos de dispersividad permiten una mayor movilidad y un mayor desplazamiento del sedimento. Independientemente de estas diferencias de localización de la máxima dispersión, también puede apreciarse como todos los valores de dispersividad provocan una dispersión numérica, incluso en aquellos casos en los que los valores de dispersividad son iguales al espaciado de malla (valor de 100 metros).

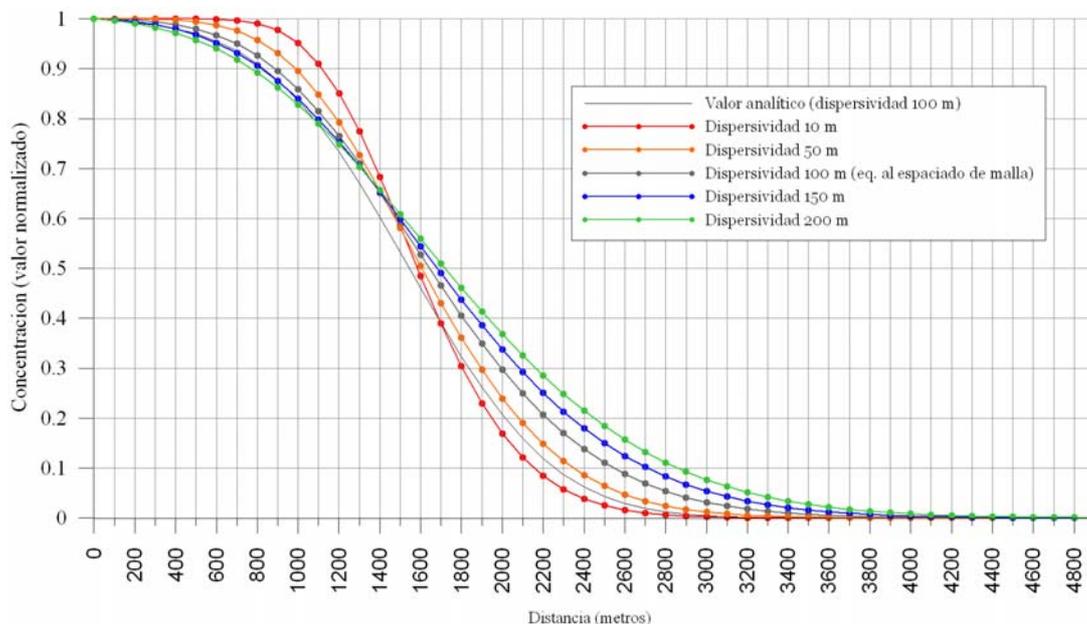


Figura 4.10.- Efecto del valor de la dispersividad sobre la situación del frente de concentración al cabo de 10 años para un experimento con una distancia entre nodos de 100 m. La línea gris indica el valor analítico para una dispersividad igual a 100 m. La zona de entrada del sedimento y agua se sitúa en el primer nodo a cero metros (izquierda del gráfico). Sólo se han representado los resultados para una sola fila (nodos 1-50).

Effect of the change in dispersivity values (colour lines with dots) on concentration fronts at $t=10$ years for an experiment considering a distance mesh equal to 100m. The grey line corresponds to the analytical solution considering a dispersivity equal to 100 m.

La comparación realizada entre los resultados analíticos y los resultados obtenidos por el programa SIMSAFADIM-CLASTIC, permite concluir que existen errores en el cálculo del transporte dispersivo realizado mediante el programa que son difíciles de eliminar y sólo se puede intentar minimizarlos. Aun así, las diferencias obtenidas se

encuentran dentro de los márgenes aceptables y son del mismo orden que las obtenidas por Kinzelbach (1992). El control del error pasa, forzosamente, por la utilización de los valores de dispersividad adecuados a la malla de elementos generada, que a su vez estará en función de las inhomogeneidades presentes en el sistema y que quieran ser representadas.

[↶ Arriba](#)

4.3.3 Control del balance de masa

Un punto importante en la validación del programa es comprobar que éste cumple con la ley de conservación de masa. Para ello, se han realizado un serie de experimentos teniendo en cuenta que todo el material que entra en el sistema se deposita o permanece en suspensión dentro del mismo.

Debido a que la ecuación del transporte utilizada por el programa contiene tres componentes diferenciadas (término difusivo, dispersivo y advectivo), se ha considerado imprescindible realizar varios experimentos para controlar los efectos que se pueden producir en el balance de masa por parte de cada una de ellas y, de esta manera, localizar los posibles errores que puedan producirse y facilitar la proposición, en su caso, de las medidas correctoras necesarias. En la figura 4.11 puede observarse un esquema con los cuatro experimentos realizados, así como el método propuesto para solventar el error en el balance de masa.

La configuración básica utilizada en todos los experimentos es prácticamente la misma y se representa en la figura 4.12. Se considera un espaciado de malla de 200 x 200 metros, con una longitud total en los ejes X e Y de 4000 x 800 m respectivamente. El tiempo total de cálculo corresponde a 400 años (10 intervalos de tiempo de 40 años cada uno), y la profundidad inicial es de 20 metros en todos los nodos del sistema.

En estos experimentos se ha comparado el volumen de sedimento depositado o en suspensión, calculado por el programa SIMSAFADIM-CLASTIC, con el volumen de sedimento que entra en el sistema, calculado analíticamente en un tiempo determinado. El valor analítico se ha calculado a partir de la siguiente ecuación:

$$\text{Volumen} = Q \cdot T \quad \left| \quad \text{donde } Q = Q_m / \rho \text{ es la tasa del volumen de sedimento que entra dentro del sistema (en } m^3/a). Q_m \text{ es la tasa de entrada (kg/año) y } \rho, \text{ la densidad del sedimento (en Kg/m}^3). T \text{ es el tiempo total de cálculo en años.} \right. \quad (4.15)$$

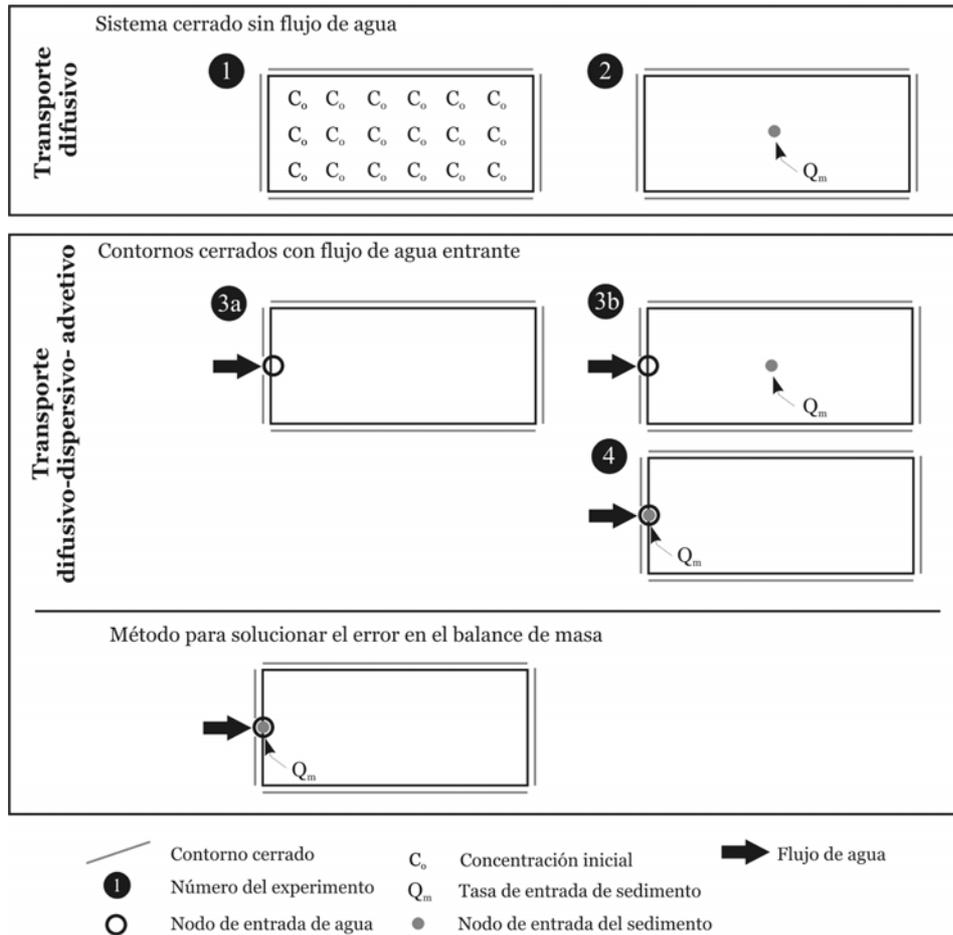


Figura 4.11.- Esquema de las configuraciones utilizadas en los cuatro experimentos realizados para controlar el volumen de sedimento obtenido por el programa, y en el método para solucionar el error en el balance de masa.

Flow diagram for the configuration of the different experiments used to control mass balance. **1.** System closed with an initial concentration for all nodes. **2.** System closed with an inflow sediment rate (Q_m). **3a.** Boundary closed with only an inflow water. **3b.** Boundary closed with an inflow water and sediment. **4.** Inflowing water and sediment in the same boundary node. The last experiment presents the method used to control the mass balance error.

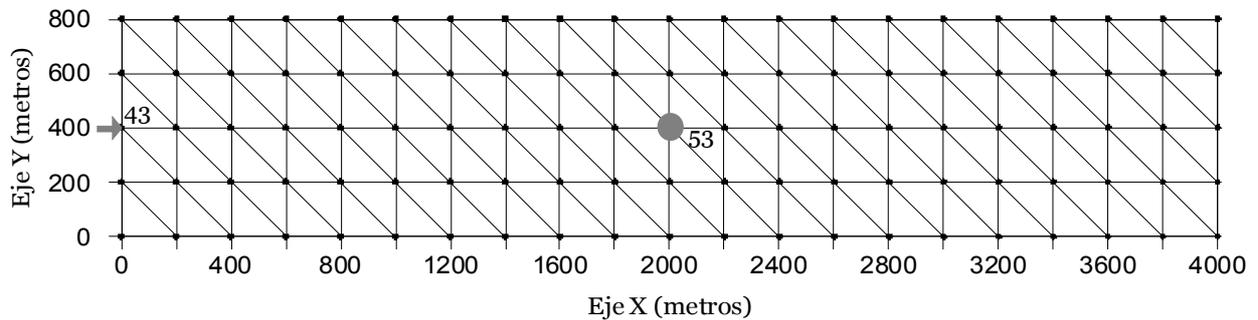


Figura 4.12.- Configuración inicial básica utilizada en los cuatro experimentos realizados para verificar si el programa SIMSAFADIM-CLASTIC cumple con la ley de conservación de masa. El círculo gris indica la posición del nodo de entrada del sedimento para el segundo y tercer experimentos. La flecha gris señala la posición del nodo definido con la entrada del flujo de agua para el tercer y cuarto experimento, y la entrada del sedimento en el cuarto experimento.

Initial configuration used for the four experiments designed to control the mass balance. The grey dot show the location of the inflow sediment node for the second and third experiments. The grey arrow indicates the inflow boundary node for water for the third and fourth experiments, and the inflow sediment node for the fourth experiment.

- **Primer experimento: sistema cerrado sin flujo de agua (I)**

La configuración establecida para este experimento proporciona un sistema donde el sedimento que entra se transporta únicamente por difusión. Utilizando esta configuración se han realizado dos cálculos diferentes para controlar el volumen de sedimento que proporciona el programa en dos casos distintos: si se utiliza la ecuación del transporte y sedimentación (por lo tanto, volumen de sedimento depositado); o si sólo se considera la ecuación del transporte (volumen de sedimento en suspensión).

Al considerar una entrada de sedimento en el instante inicial definiendo una concentración de sedimento igual en todos los nodos de la malla, el transporte es mínimo (ya que todos los nodos presentan la misma concentración) y se puede controlar el volumen de sedimento presente (en suspensión o depositado) al final del cálculo y si éste coincide con el valor analítico. De esta comparación se han obtenido errores muy bajos (0,0001 % de error) en ambos casos, considerando sólo el transporte (volumen de sedimento en suspensión) o considerando también la sedimentación (volumen depositado).

Con la misma configuración establecida para este primer experimento y para comprobar el efecto que pueden producir los valores utilizados de la velocidad de deposición del sedimento (por lo tanto, considerando la ecuación del transporte y sedimentación), se han realizado diferentes cálculos utilizando diferentes valores de dicha velocidad. De este modo, al final del experimento se obtiene un volumen de sedimento total (el depositado más el que resta en suspensión según el caso) que tiene que coincidir con el volumen analítico. Los resultados pueden verse reflejados en la figura 4.13.

Como se puede observar en la figura 4.13, la suma del sedimento depositado y el que resta en suspensión calculado por el programa al final del tiempo de cálculo (línea continua) prácticamente es igual al volumen de sedimento calculado analíticamente (valor de 1 en el eje Y). Para valores de la velocidad de deposición bajos (inferiores a $1 \cdot 10^{-6}$ m/d) el sedimento sigue en suspensión al final del experimento pero, a medida que la velocidad de deposición es mayor, aumenta la proporción de sedimento depositado al final del experimento, de tal modo que a velocidades de sedimentación superiores a 0,001 m/d no existe sedimento en suspensión y todo el material queda depositado.

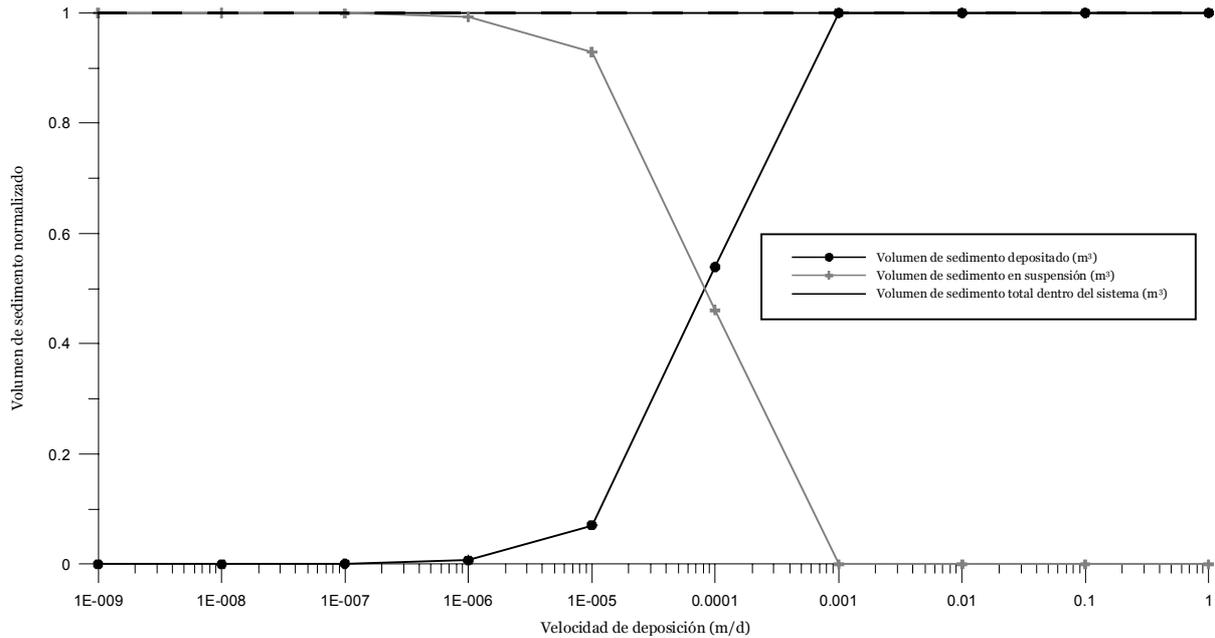


Figura 4.13.- Volumen de sedimento (depositado y en suspensión) calculado dentro del sistema al final del experimento en función de la velocidad de deposición del sedimento utilizada. Los valores del volumen obtenidos han sido normalizados según el valor analítico (valor igual a 1 en el eje Y).

Normalized volume sediment, deposited (black dots) and in suspension (grey crosses), at the end of the first experiment in function of the settling velocity. The black line is the sum of the sediment deposited and in suspension. The volume value of 1 shows the analytical solution.

• Segundo experimento: sistema cerrado sin flujo de agua (II)

Este experimento se ha realizado con el objetivo de controlar la componente difusiva de la ecuación del transporte y determinar los posibles errores que puedan aparecer en el volumen de sedimento transportado, al final del experimento. Para este fin, se ha utilizado la misma configuración establecida para el primer experimento aunque, en este caso, el sedimento se ha introducido a partir de una tasa de entrada de sedimento ($0.1 \cdot 10^{-6}$ Tn/s) que se ha mantenido constante durante todo un intervalo de tiempo *jti* definido (40 años) y que se ha localizado en el centro del experimento (nodo 53, figura 4.12). Además, se han utilizado distintos valores del coeficiente de difusión y, al igual que en el primer experimento, se han repetido los cálculos a partir de dos situaciones diferentes: considerando sólo la ecuación del transporte (*sin sedimentación*) y que implica que todo el sedimento permanecerá en suspensión; o considerando la ecuación del transporte y sedimentación (*con sedimentación*), que implica la deposición de todo el sedimento al final del cálculo si se utiliza una velocidad de deposición elevada.

Los resultados del experimento (figura 4.14) muestran que el volumen de sedimento calculado por el programa en función de los dos casos expuestos (con o sin sedimentación), y que proporcionan un volumen de sedimento depositado o en suspensión respectivamente, siguen el mismo patrón. En este sentido, las dos curvas son prácticamente iguales y se ajustan al valor analítico para valores del coeficiente de difusión superiores a 10000 m²/a. En cambio, para coeficientes de difusión inferiores a este valor, las dos curvas se separan hacia valores superiores al valor analítico. Esta diferencia se incrementa paulatinamente a medida que disminuye el coeficiente de difusión y alcanza un valor máximo a valores inferiores a 1 m²/a. A partir de este valor, para coeficientes más bajos, la diferencia entre el volumen determinado analíticamente y el calculado a través del programa se mantiene constante.

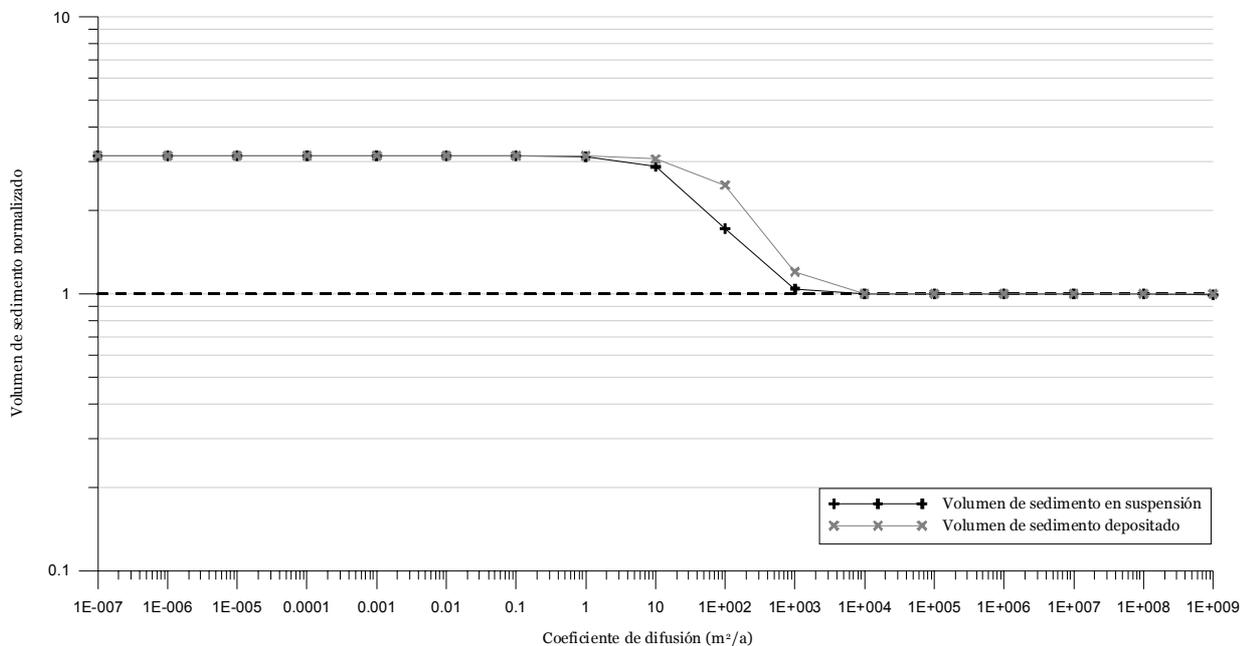


Figura 4.14.- Representación del volumen de sedimento dentro del sistema para los dos casos considerados (con y sin sedimentación) en función del coeficiente de difusión utilizado. La línea discontinua indica el valor analítico.

Total volume in the system for the second experiment considering settling (grey crosses) or not (black crosses) and in function of diffusion coefficient. The discontinuous line represents the analytical volume values.

La causa de esta discrepancia, entre el volumen de sedimento determinado analíticamente y el calculado mediante el programa, está asociada al espaciado de malla y a su relación con el avance del frente de concentración. En efecto, el cálculo mediante el programa del volumen de sedimento presente en el sistema al final del tiempo de cálculo se realiza a partir de la interpolación lineal entre los valores de concentración obtenidos para cada nodo de la malla. En consecuencia, cabe esperar que para todos aquellos valores del coeficiente de difusión bajos, que generan un frente de

concentración que no alcanza los nodos colindantes al nodo de entrada del sedimento en un intervalo de tiempo, se obtendrá un valor del volumen de sedimento que será superior al esperado (figura 4.15-A). En cambio, esta diferencia entre el valor esperado y el calculado, disminuirá paulatinamente hasta ser mínima a medida que el valor del coeficiente de difusión sea mayor (figura 4.15-C) y el frente de concentración alcance un mayor número de nodos colindantes al definido con la entrada del sedimento, en un mismo intervalo de tiempo (es decir, a medida que el frente de concentración adquiriera pendientes menores y se iguale al valor real). La misma explicación puede ser aplicada si el cálculo se refiere al sedimento depositado.

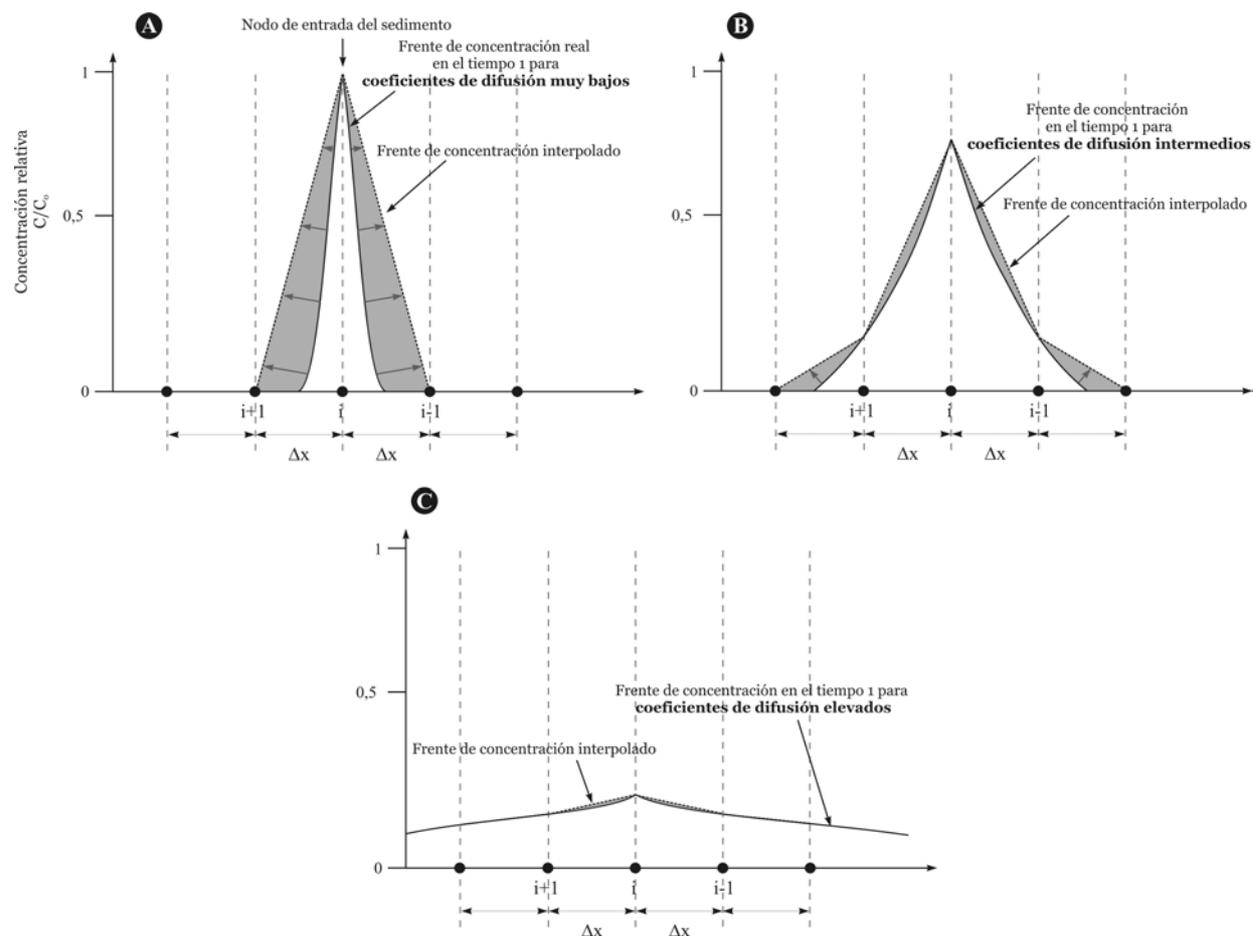


Figura 4.15.- Esquema explicativo de la diferencia observada entre el volumen de sedimento calculado por el programa en el segundo experimento y el valor analítico (o valor real) correspondiente. **A.** Valores del Coeficiente de difusión muy bajos. **B.** Coeficientes de difusión intermedios. **C.** Coeficientes de difusión elevados. Las líneas discontinuas marcan la interpolación lineal realizada por el programa y que causa un aumento en el volumen de sedimento presente (tanto depositado como en suspensión). La zona gris indica el exceso calculado a causa de la interpolación lineal entre nodos. Para coeficientes de difusión elevados, la interpolación lineal es prácticamente igual que el frente de concentración real (o el sedimento depositado).

*Simplified sketch to explain the difference between the sediment volume calculated with the program for the second experiment and the analytical (or real) solution. **A.** Lower diffusion coefficients. **B.** Middle diffusion coefficients. **C.** Higher diffusion coefficients. Discontinuous lines display the lineal interpolation from node i to node $i+1$ or $i-1$ that may cause an increment in volume sediment calculation (deposited or in suspension). The shaded area represents the increment measured due to lineal interpolation. Note that for higher diffusion coefficients, the lineal interpolation is better and similar to real solution.*

Si se tiene en cuenta que el espaciado de malla en el experimento es de 200 m, sería necesario un coeficiente de difusión de $5 \text{ m}^2/\text{a}$ para que el frente de concentración alcance los nodos colindantes al nodo de entrada de sedimento al cabo de 40 años (1 intervalo de tiempo jt_i). De este modo y como se observa en la figura 4.14, este valor del coeficiente de difusión es el que marca el límite por debajo del cual el volumen de sedimento calculado (en suspensión o depositado) es anormalmente elevado. En cambio, para valores superiores, el sedimento se distribuye más rápidamente por todos los nodos (equiparando los valores entre los nodos) y el exceso de sedimento calculado por el programa va disminuyendo hasta ser similar al valor analítico esperado.

Por lo tanto, este experimento pone de manifiesto que, si se considera un transporte difusivo, puede generarse un error en el balance de masa calculado cuya magnitud e importancia depende del espaciado de malla, del coeficiente de difusión y de los intervalos de tiempo considerados. Este error puede minimizarse disminuyendo el espaciado entre nodos (o densificando la malla), utilizando coeficientes de difusión más elevados o aumentando el intervalo de tiempo de cálculo. Dicho de otra manera, para controlar y minimizar este error, la discretización de la zona de estudio tiene que estar en función del valor del coeficiente de difusión que va a ser utilizado y que caracterizará el sistema bajo estudio.

- **Tercer experimento: contornos cerrados con flujo de agua entrante (I)**

Este experimento se ha diseñado para controlar el balance de masa en el programa si se considera un transporte de sedimento principalmente de tipo advectivo. Para tal efecto, se ha definido una entrada de flujo de agua en el nodo 43 situado en el contorno (figura 4.12). Todos los cálculos se han repetido utilizando diferentes valores del flujo de agua entrante. Además, se han considerado dos casos distintos, uno que no considera la entrada de sedimento en el sistema y otro que sí la considera. En este último caso, el sedimento se ha introducido a partir de una tasa de entrada de sedimento constante que se realiza en el centro del experimento (nodo 53), al igual que en el segundo experimento.

a) Experimento **sin sedimento**: Al considerar un sistema sin salida de agua, este experimento se ha utilizado para comprobar si el volumen de agua que ha entrado en el sistema al final del tiempo total de cálculo (400 años) equivale al volumen de agua calculado analíticamente a partir del flujo de agua que entra en el sistema. En la solución obtenida con el programa, el volumen de agua se ha calculado a partir de la altura de la superficie del agua al final del experimento.

Como se observa en la figura 4.16, hay una muy buena correlación entre el volumen de agua calculado por el programa y el calculado analíticamente a partir de los diferentes valores del flujo de agua definidos en el nodo de entrada.

Esta buena correlación es básica ya que permite verificar los valores de profundidad de la columna de agua obtenidos en cada nodo por el programa y, por consiguiente, las concentraciones de sedimento que de ella se extraen. Un valor erróneo de esta profundidad conllevaría también errores en la concentración de sedimento resultante y, en consecuencia, en el cálculo del volumen de sedimento depositado o en suspensión.

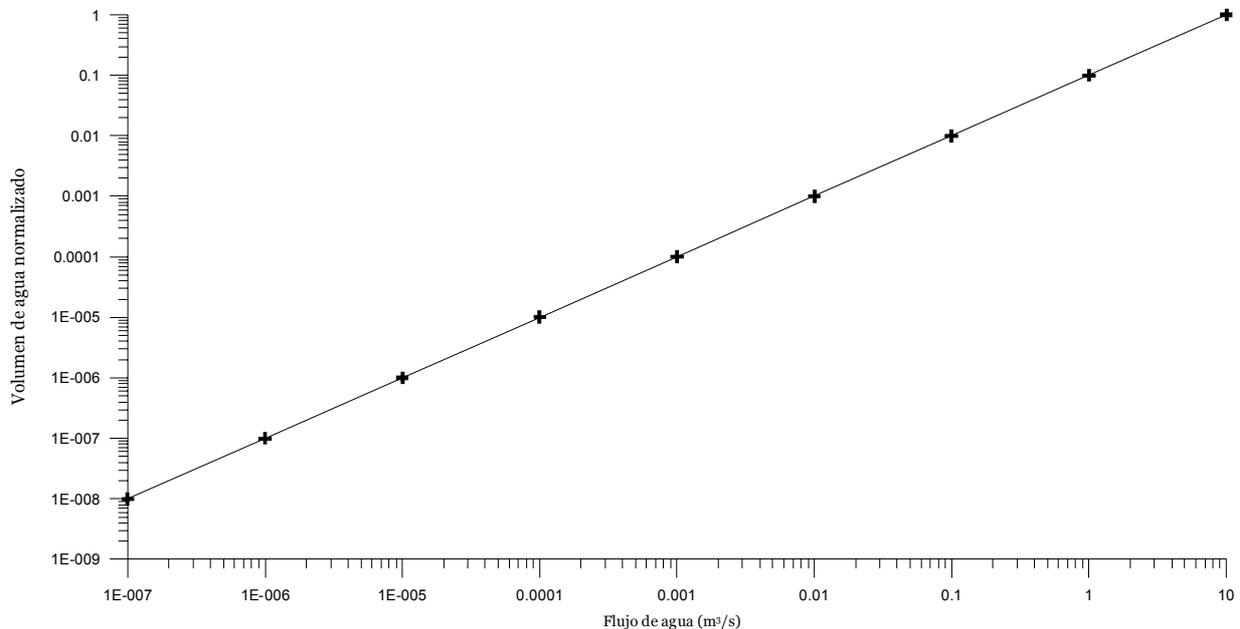


Figura 4.16.- Volumen de agua calculado en el tercer experimento sin considerar entrada de sedimento. La línea continua marca el valor analítico, mientras que las cruces indican el volumen de agua calculado por el programa aplicando diferentes flujos de agua en el nodo de entrada.

Water volume in function of the considered inflow water rate. The black line shows the analytical solution. Black crosses correspond to the experimental results.

b) Experimento **con sedimento**: Para controlar el balance de masa en un sistema dominado por la componente advectiva de la ecuación del transporte, se ha utilizado la misma configuración anterior añadiendo la entrada de sedimento, a partir de una tasa de entrada de sedimento constante y definida en el centro de la malla. Se han realizado los cálculos variando el flujo de agua entrante en el sistema y según dos casos extremos: con sedimentación y sin sedimentación. Además, teniendo en cuenta las observaciones

realizadas en el segundo experimento, se han repetido todos los cálculos considerando un coeficiente de difusión bajo ($0.1 \text{ m}^2/\text{a}$) y otro elevado ($1 \cdot 10^9 \text{ m}^2/\text{a}$).

Los resultados obtenidos para este experimento (figuras 4.17 y 4.18) muestran la presencia de diferencias apreciables entre los volúmenes calculados analíticamente y los obtenidos aplicando el programa SIMSAFADIM-CLASTIC. Estas diferencias varían tanto en función del coeficiente de difusión como del flujo de agua introducido, así como al considerar o no la deposición.

De este modo, si el coeficiente de difusión es bajo ($0.1 \text{ m}^2/\text{a}$) -figura 4.17-, puede observarse como, a valores del flujo de agua también bajos (inferiores a $0.0001 \text{ m}^3/\text{s}$), la respuesta del sistema es similar a la observada en el segundo experimento para el mismo valor del coeficiente de difusión, y se obtiene más sedimento que el esperado. Entonces, esta diferencia está causada por un transporte del sedimento neto (dominado por la difusión) muy pequeño que genera frentes de concentración con grandes pendientes y una interpolación lineal entre nodos irreal (figura 4.15). A medida que el flujo de agua se incrementa y domina el término advectivo de la ecuación de transporte, esta diferencia entre el valor calculado y el esperado disminuye, ya que existe un mayor

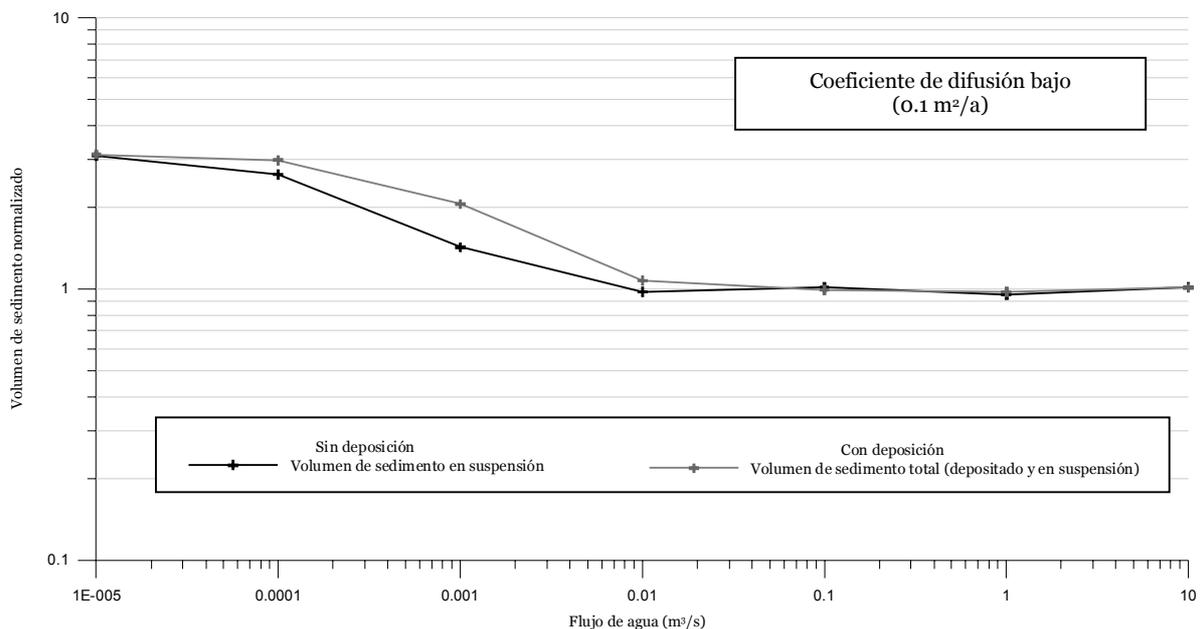


Figura 4.17.- Volumen de sedimento obtenido en el tercer experimento considerando un coeficiente de difusión bajo para los dos casos tratados (con y sin sedimentación) y en función del flujo de agua entrante. En el caso considerando la deposición, el volumen corresponde al volumen total ya que para flujos altos no todo el sedimento queda depositado al final del experimento, y se ha representado la suma de los dos (el depositado más el que queda en suspensión). El valor del volumen igual a 1 marca el valor analítico.

Sediment volume in suspension (without settling, black line) or deposited (with settling, grey line) for the third experiment with a lower diffusion coefficient and in function of inflow water rate. In the experiment considering deposition, the volume is the total volume (deposited plus sediment in suspension). The volume equal to 1 corresponds to the analytical volume.

transporte del sedimento en dirección y sentido igual al del flujo dominante (de izquierda a derecha) provocando frentes de concentración más suaves y una interpolación lineal entre estos nodos que tiende a la realidad (o al valor analítico).

En cambio, si se utilizan coeficientes de difusión altos ($1 \cdot 10^9 \text{ m}^2/\text{a}$) -figura 4.18-, la tendencia es totalmente contraria: la diferencia entre los volúmenes de sedimento calculados analíticamente y por el programa es prácticamente nula para flujos de agua bajos, y se incrementa paulatinamente a medida que aumenta el valor del flujo de agua introducido (a valores superiores a $0.0001 \text{ m}^3/\text{s}$ del flujo de agua). Así, si el flujo de agua es bajo y el coeficiente de difusión es elevado, la respuesta del sistema es similar a la observada en el segundo experimento para un sistema dominado por la difusión de modo que el sedimento rápidamente se distribuye por todo el sistema debido a un coeficiente de difusión elevado y generando frentes de concentración con pendientes muy suaves que no generan un error significativo. Por el contrario, si el sistema está dominado por la advección (flujos de agua elevados), el hecho de que se produzca una rápida distribución del sedimento por todos los nodos del sistema debido a un

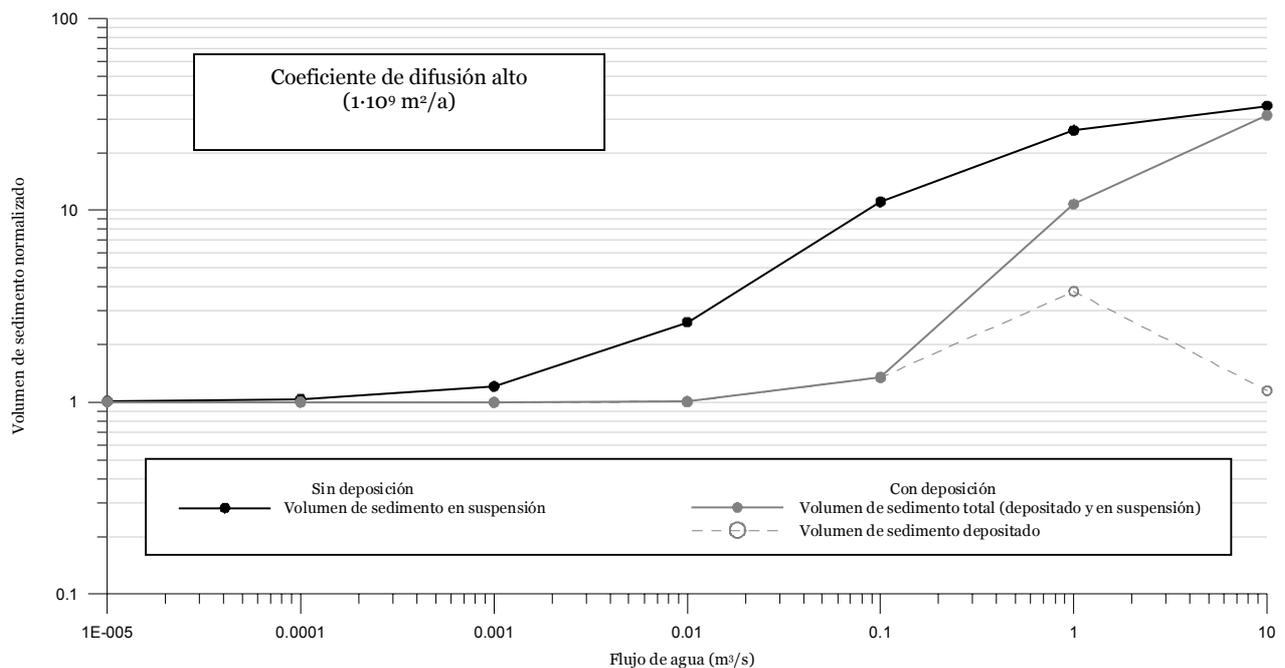


Figura 4.18.- Volumen de sedimento obtenido en el tercer experimento considerando un coeficiente de difusión alto para los dos casos tratados (con y sin sedimentación) y en función del flujo de agua entrante. En el caso considerando la deposición, el volumen corresponde al volumen total (línea continua, el depositado más el que resta en suspensión) y al volumen del sedimento depositado (línea discontinua). El valor del volumen igual a 1 marca el valor analítico.

Sediment volume in suspension (without settling, black graphic) or deposited (with settling, grey graphic) for the third experiment with a higher diffusion coefficient and in function of inflow water rate. In the experiment considering deposition, the continuous grey line corresponds to the total volume (sediment deposited plus in suspension), whereas discontinuous grey line reflects only the deposited volume. The volume equal to 1 corresponds to the analytical volume.

coeficiente de difusión alto, aunque genera frentes de concentración con pendientes suaves, atribuye valores de concentración elevados en el nodo de entrada del flujo de agua. En consecuencia, domina el término advectivo de un nodo definido con una entrada del flujo de agua, y que contiene una concentración elevada, suponiendo una entrada adicional de sedimento que no es real.

En relación a la consideración o no consideración de la deposición del sedimento, destaca que, aunque las dos curvas siguen el mismo patrón descrito anteriormente en función del coeficiente de difusión utilizado, pueden apreciarse diferencias significativas entre las mismas, sobre todo si se considera un coeficiente de difusión alto. Hay que señalar que, la principal consecuencia de considerar, o no, la deposición del sedimento es, respectivamente, la menor o mayor concentración de sedimento en suspensión y que es susceptible de ser transportado. De este modo, para coeficientes de difusión altos y considerando la deposición, el volumen de sedimento total presente en el sistema para flujos de agua situados entre 0.001 y 1 m³/s, es menor que si no se considera la deposición debido a la sedimentación de parte del sedimento que reduce la concentración del sedimento en suspensión. Esto provoca que el sedimento que llega al nodo de entrada de agua sea menor y, por lo tanto, se minimiza el error producido para estos valores del flujo de agua al dominar la componente advectiva del transporte. Para flujos de agua elevados (superiores a 0.1 m³/s) existe menos volumen de sedimento que puede ser depositado y más en suspensión (ya que la sedimentación está en función de la velocidad del flujo presente, la cual es más elevada en estos casos) y puede atribuirse fácilmente una concentración de sedimento mayor al nodo definido con la entrada del flujo de agua. Para un flujo de agua del orden de 10 m³/s, el volumen de sedimento presente en el sistema considerando la sedimentación es prácticamente igual que si ésta no se considera, ya que, al final del experimento la mayor parte del sedimento persiste en suspensión a causa de una velocidad del flujo elevada (cabe recordar que en todos los experimentos no se ha variado la velocidad de deposición del sedimento para mantener los mismos parámetros durante los diferentes cálculos realizados).

Resumiendo, el tercer experimento pone de manifiesto que el programa puede generar errores en el balance de masa cuando el sistema bajo estudio está dominado por la componente advectiva y difusiva del transporte. La magnitud de los errores generados, como puede apreciarse en la figura 4.19, está muy influenciada por los valores del coeficiente de difusión y del flujo de agua considerados. Mientras que con flujos de agua bajos (inferiores a 0.001 m³/s), el balance de masa que presenta menos error se consigue utilizando coeficientes de difusión altos (errores del 1% o inferiores), con flujos de agua altos (superiores a 0.001 m³/s) ocurre lo contrario y se obtienen los errores más bajos (entre el 1 y el 2%) si se usan coeficientes de difusión bajos.

También puede deducirse que un sistema dominado por la advección genera errores en el volumen de sedimento dentro del sistema que no son atribuibles a la

geometría del frente de concentración ni a la interpolación lineal que realiza el programa (errores observados cuando el sistema está dominado por la difusión). Aún así, los errores menores que pueden llegar a obtenerse se sitúan próximos al 1 y 2%, unos valores aceptables, aunque muy susceptibles al valor del coeficiente de difusión utilizado y del flujo de agua presente.

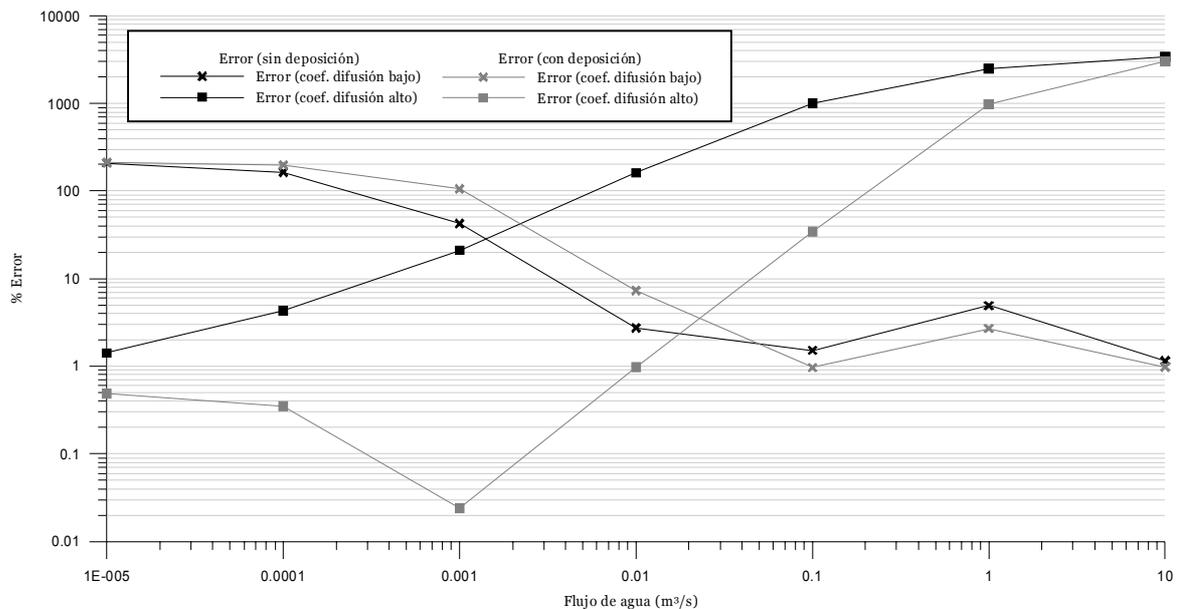


Figura 4.19.- Magnitud de los errores observados en el tercer experimento para los dos casos tratados (con y sin deposición), y en función del flujo de agua entrante y de los dos coeficientes de difusión utilizados.

Error observed for the third experiment. Graphics in black show the error for the experiment with no sediment settling. Graphics in grey show the error for the experiment considering sediment settling. Crosses and squares corresponds to low and high diffusion coefficients, respectively.

• Cuarto experimento: contornos cerrados con flujo de agua entrante (II)

En los experimentos anteriores, la entrada de sedimento se ha localizado, o bien en todos los nodos de la malla (experimento 1), o bien en el nodo central de la misma (experimentos 2 y 3) y, por lo tanto, en una posición que no coincide con la entrada de sedimento que puede producirse en una cuenca sedimentaria real. Es por ello que se ha diseñado un cuarto experimento con el objetivo de analizar el balance de masa obtenido por el programa si éste se aplica a un experimento que considere una situación más “real”. Así, en este experimento se ha considerado que el nodo de entrada del sedimento

coincide con el nodo de entrada del agua y se sitúa sobre un contorno de la malla (flecha gris, figura 4.12).

Los cálculos se han realizado variando el flujo de agua entrante y, al igual que en experimentos anteriores, se han repetido utilizando dos coeficientes de difusión distintos (0.1 y $1 \cdot 10^9$ m^2/a) teniendo en cuenta dos situaciones diferentes (considerando o no la deposición de sedimento).

Si no se considera la deposición del sedimento, los resultados (figura 4.20) siguen un mismo patrón aunque se utilicen coeficientes de difusión distintos, y se genera un volumen de sedimento mayor que el esperado a medida que el flujo de agua aumenta, es decir, a medida que el sistema está dominado por la advección. Comparando las dos curvas representadas en la figura 4.20, puede verse como este aumento del volumen de sedimento siempre es mayor si se consideran coeficientes de difusión bajos.

Para flujos de agua bajos (inferiores a 0.0001 m^3/s), las dos curvas son prácticamente iguales que las observadas en el tercer experimento bajo los mismos valores del flujo de agua. Por lo tanto, el error producido en estos casos y utilizando coeficientes de difusión bajos es atribuible a la interpolación lineal entre los nodos. Para

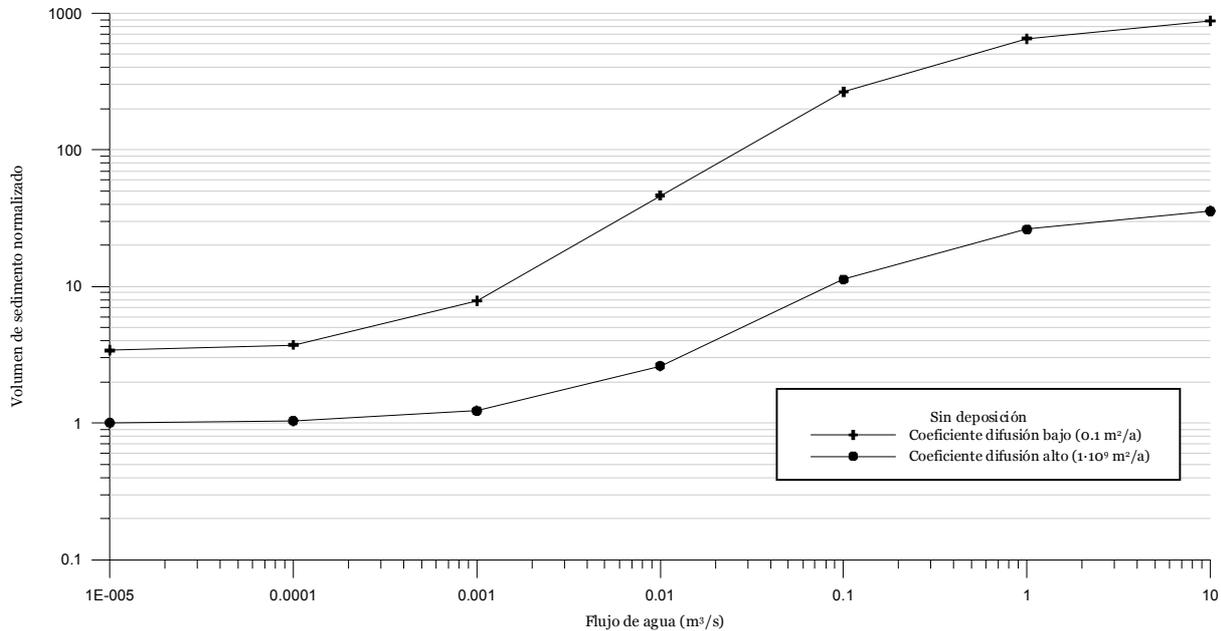


Figura 4.20.- Volumen de sedimento en suspensión (sin deposición) considerando una entrada de sedimento en el mismo nodo de entrada del flujo de agua según diferentes flujos de agua entrantes y para dos coeficientes de difusión distintos. El valor del volumen correspondiente a 1 indica el valor analítico.

Changes of the sediment volume in suspension (in an experiment with no sediment settling) in function of inflow water rate when the inflow sediment and water rate are specified in the same boundary node. Dots and crosses corresponds to high and low diffusion coefficients, respectively. The volume equal to 1 corresponds to the analytical volume.

flujos de agua mayores, la curva que sufre más cambios es la que corresponde a un coeficiente de difusión bajo y el error obtenido aumenta de manera acusada a medida que aumenta el flujo de agua (para coeficientes de difusión altos, la curva sigue la misma tendencia que en el tercer experimento sin observarse grandes cambios). Este comportamiento, como se ha comentado anteriormente, se debe a un menor transporte difusivo que concentra más sedimento en el nodo de entrada (mayor que si se considera un coeficiente de difusión alto) y, como consecuencia, se produce un mayor error en el cálculo del volumen de sedimento en suspensión presente en el sistema.

Si se repite el experimento considerando la deposición de sedimento (figura 4.21), puede observarse que la tendencia al aumento de sedimento dentro del sistema se conserva aunque, en general y sobre todo para flujos de agua inferiores a $1 \text{ m}^3/\text{s}$, el error es menor que el obtenido en el cálculo anterior sin considerar la deposición. Al igual que en el tercer experimento, esta diferencia se debe a la deposición del sedimento que produce una reducción significativa del volumen de sedimento en suspensión y, consecuentemente, del error que puede generarse. Para flujos de agua elevados (superiores a $0.1 \text{ m}^3/\text{s}$) no todo el sedimento queda depositado y permanece, principalmente, en suspensión produciendo un error cada vez mayor y similar al obtenido en el caso anterior que no considera la deposición.

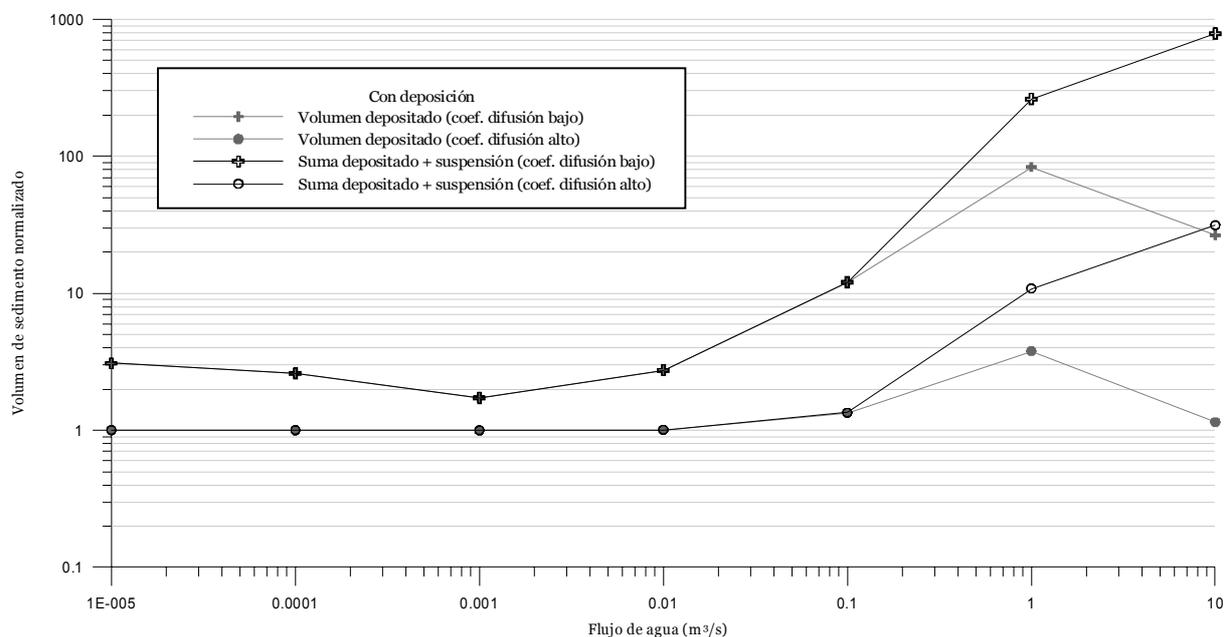


Figura 4.21.- Variación del volumen de sedimento normalizado calculado en el cuarto experimento considerando la deposición del sedimento y una entrada de agua y material en el mismo nodo del contorno. Se han utilizado diferentes valores del flujo de agua y dos coeficientes de difusión distintos. Nótese como para flujos elevados no todo el sedimento queda depositado y una parte del mismo queda en suspensión.

Total sediment volume (graphic in black corresponds to sediment deposited plus sediment in suspension) in function of inflow water rate considering an experiment with sediment settling. The inflow sediment and water rate are specified in the same boundary node (fourth experiment). Dots and crosses corresponds to high and low diffusion coefficients, respectively. Note that, at high inflow water rates, sediment occurs in suspension and deposited. The volume equal to 1 corresponds to the analytical volume.

Por lo tanto puede resumirse que, aunque existen valores del coeficiente de difusión y del flujo de agua que generan errores mínimos (coeficientes de difusión altos y flujos de agua bajos), la respuesta del programa, si se define una entrada de agua y sedimento en un mismo nodo situado en un contorno de la malla, es producir un error mayor en el volumen de sedimento presente dentro del sistema (ya sea depositado o en suspensión) a medida que aumenta el flujo de agua introducido.

- **Método para solucionar el error en el balance de masa**

Como se puede deducir de todos los experimentos anteriores, el error generado en el volumen de sedimento presente dentro del sistema (sin tener en cuenta el error que se puede denominar “geométrico” debido a la interpolación) está muy influenciado por la concentración de sedimento en suspensión presente en el nodo de entrada del flujo de agua. Este error prácticamente es nulo si no existe un flujo dominante en el sistema (dominio del transporte difusivo), y aumenta a medida que se incrementa el valor del flujo de agua, es decir, a medida que la ecuación del transporte está dominada por el término advectivo de la misma. La magnitud del error en estos casos también depende del coeficiente de difusión y de la velocidad de deposición considerada, de tal modo que crece a medida que estos valores disminuyen ya que ambos producen una concentración de sedimento mayor cerca del nodo de entrada del agua y sedimento.

La causa de estos errores puede encontrarse en la ecuación del transporte ya que, en los casos donde domina la componente advectiva de la ecuación (números de grid-Peclet superiores a 2), ésta puede ser descrita mediante una ecuación diferencial parcial de tipo **hiperbólico**. Es conocido que la solución numérica de una ecuación diferencial parcial de tipo hiperbólico, como la que se obtiene en este caso, presenta serias dificultades, sobre todo en los casos donde los frentes de concentración muestran fuertes pendientes.

En este apartado, se expone el método utilizado para minimizar el error producido en la solución de la ecuación del transporte cuando está dominada por la componente advectiva, y que está basado en el método BMFC (**B**oundary **M**ass **F**lux **C**ontrol, Bitzer, 2004, inédito).

Este método parte de la idea básica de la ley de conservación de la masa, que establece que la masa de sedimento que ha entrado en un sistema tiene que coincidir con la masa real de sedimento que hay en él, teniendo en cuenta la que ha salido. En este sentido, es imprescindible controlar y conocer en cada intervalo de tiempo el volumen de sedimento real que ha entrado en el sistema a través de los nodos definidos

para tal efecto (denominaremos **volumen analítico** al volumen total entrante), así como la suma del volumen de sedimento que hay en suspensión, el que queda depositado más el que sale del sistema por los contornos abiertos (a esta suma la denominaremos **volumen aparente**). Este volumen aparente se calcula después del cálculo del transporte y antes del cálculo de la deposición (figura 4.22) ya que, si bien la distribución de sedimento que se obtiene por el programa es correcta, no lo es la concentración de sedimento en suspensión presente en cada nodo.

En el método expuesto, el error obtenido en la concentración de sedimento se minimiza a partir de un **factor de escalamiento** (f_s), el cual se determina según la relación 4.16:

$$f_s = \frac{V_{an}}{V_{ap}} \quad (4.16)$$

Donde V_{an} es el volumen analítico
 V_{ap} es el volumen aparente

Este factor f_s , multiplicado por la concentración de sedimento en suspensión calculada por el programa y que genera un volumen de sedimento anormalmente elevado, permite obtener un nuevo valor de concentración de sedimento en suspensión “real” que minimiza este exceso. A partir de esta nueva concentración de sedimento en suspensión se calcula el volumen de sedimento que va a ser depositado en el intervalo de tiempo t considerado y, en consecuencia, el que permanece en suspensión y que puede ser transportado en el siguiente intervalo de tiempo $t+\Delta t$. Estos dos últimos valores ya corregidos, son los que se suman con la nueva entrada de sedimento producida en el intervalo de tiempo $t+\Delta t$ para formar parte del nuevo volumen analítico correspondiente al volumen total que ha entrado en el sistema desde el tiempo inicial, y que será utilizado para extraer un nuevo factor de escalamiento f_s y, en consecuencia, obtener una nueva concentración corregida de sedimento en suspensión para el intervalo de tiempo $t+\Delta t$.

Para evaluar los resultados obtenidos con este método, se ha repetido, utilizando el factor de escalamiento f_s , el cuarto experimento expuesto en el apartado anterior, en el cual se consideraba un sistema con contornos cerrados y con una entrada de agua y sedimento situada en un mismo nodo, ubicado sobre uno de estos contornos. Como el algoritmo de la deposición no genera ningún error significativo, únicamente se han realizado los cálculos considerando que no existe sedimentación. Además, se ha utilizado un coeficiente de difusión bajo (0.1 m²/a) ya que es el que proporciona un error mayor en los resultados.

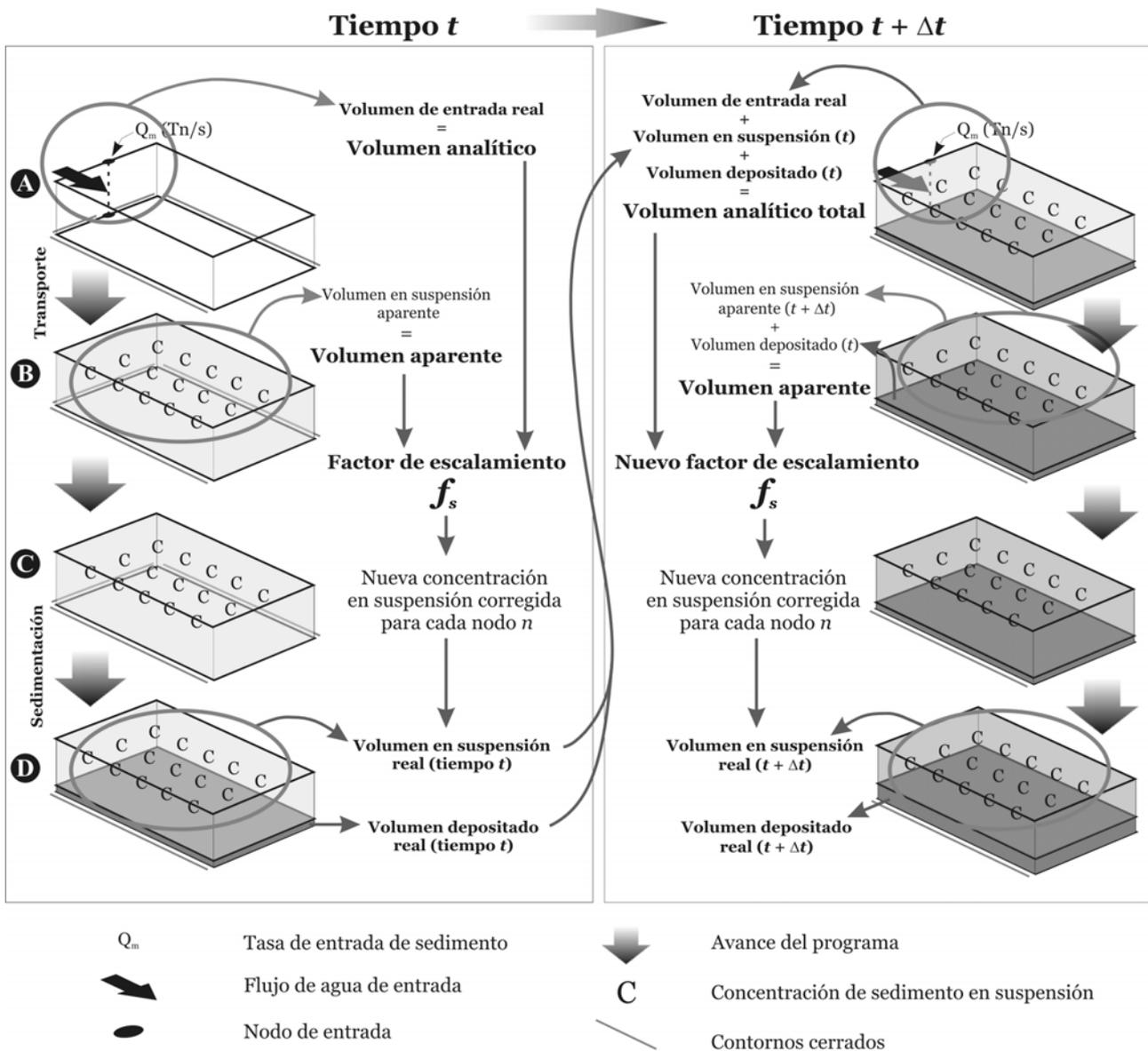


Figura 4.22.- Esquema metodológico del método propuesto para solventar los errores producidos en el balance de masa derivados de la ecuación del transporte bajo condiciones donde domina la componente advectiva. **A.** Cálculo del **volumen analítico** a partir de la tasa de entrada de sedimento y del flujo de agua. **B.** Cálculo del volumen de sedimento en suspensión (**volumen aparente**) a partir de la concentración de sedimento en suspensión obtenida después del cálculo del transporte. **C.** El **factor de escalamiento** (f_s) obtenido a partir del volumen de sedimento analítico y aparente, permite determinar una nueva concentración de sedimento en suspensión corregida. **D.** La deposición del sedimento provoca una disminución de la concentración de sedimento en suspensión. La suma de este volumen de sedimento en suspensión, más el depositado más el que entra en este nuevo intervalo de tiempo $t + \Delta t$, se utilizan para calcular el nuevo volumen de sedimento **analítico** total que ha entrado en el sistema desde el instante inicial.

Flow diagram showing the method proposed to minimize the error due to the advective component of the transport equation. **A.** **Analytical volume** from sediment and water inflow rate. **B.** **Apparent volume** obtained from sediment concentration in suspension after transport. **C.** Scalar factor (f_s) from apparent and analytical volume that allows to obtain a new corrected sediment concentration. **D.** The settling sediment provides a new concentration for sediment in suspension that will be transported in next time step $t + \Delta t$. The volumes of sediment settled and in suspension are used in next time step to determine the new total **analytical volume** that enters the system from initial time step.

Como puede observarse en la figura 4.23, al aplicar el factor de escalamiento, el volumen de sedimento en suspensión que hay al final del experimento coincide con el calculado de forma analítica independientemente del flujo de agua considerado. Por lo tanto, se deduce que el método propuesto permite corregir perfectamente los errores que se pueden producir en el balance de masa si en el sistema bajo estudio domina la componente advectiva del transporte.

Por otra parte, en la figura 4.24, se han comprado los frentes de concentración relativos a tres intervalos de tiempo diferentes (intervalos de tiempo 1, 5 y 10 correspondientes a 40, 200 y 400 años respectivamente) obtenidos en el mismo experimento fijando, en este caso, una tasa de entrada de agua a $0,001 \text{ m}^3/\text{s}$. Se muestran los perfiles paralelos al eje X y cuyo origen se sitúa en la coordenada $Y=400 \text{ m}$. La comparación de los resultados utilizando o no el factor de escalamiento f_s , pone de manifiesto que, en ambos casos, el patrón de distribución del sedimento es el mismo, aunque con una concentración de sedimento en suspensión inferior si se utiliza el factor de escalamiento.

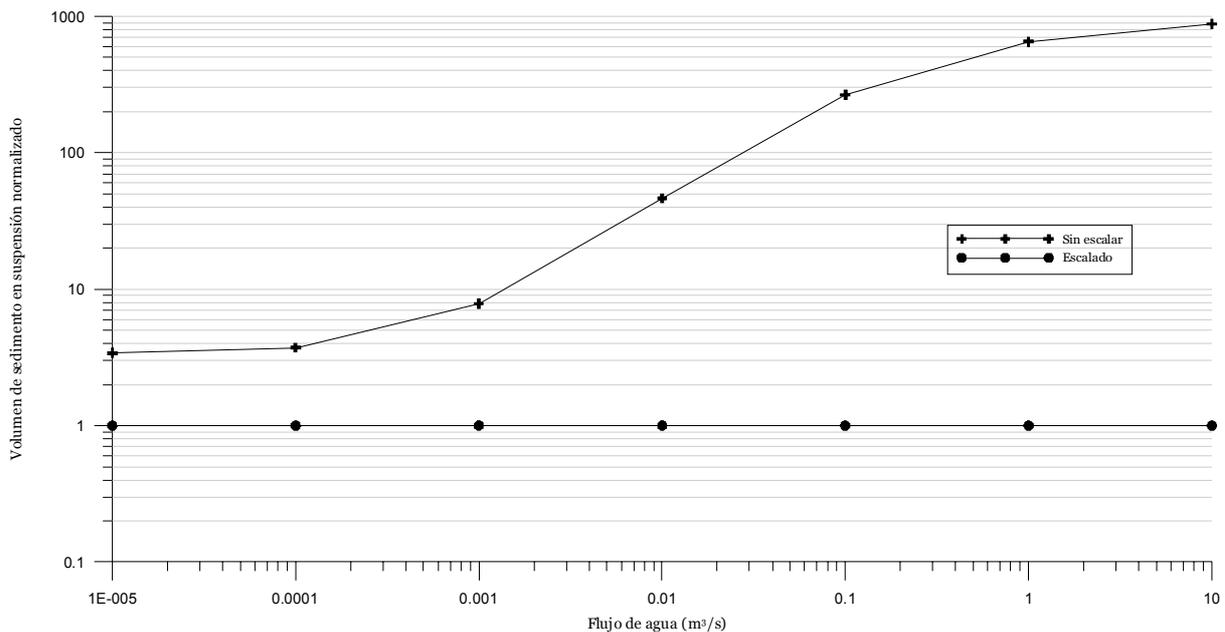


Figura 4.23.- Comparación de los resultados obtenidos utilizando o no el método de escalamiento del volumen de sedimento presente en el sistema. La configuración del experimento es la misma que la utilizada en el cuarto experimento (línea de cruces) utilizando un coeficiente de difusión bajo y sin tener en cuenta la deposición del sedimento. El valor del volumen normalizado correspondiente a 1 indica el valor analítico.

Total volume sediment obtained using the method to control the mass balance error (black dots) in comparison with the volume obtained without this method (black crosses) and that corresponds to the fourth experiment with a lower diffusion coefficient and without sediment settling. The volume equal to 1 corresponds to the analytical volume.

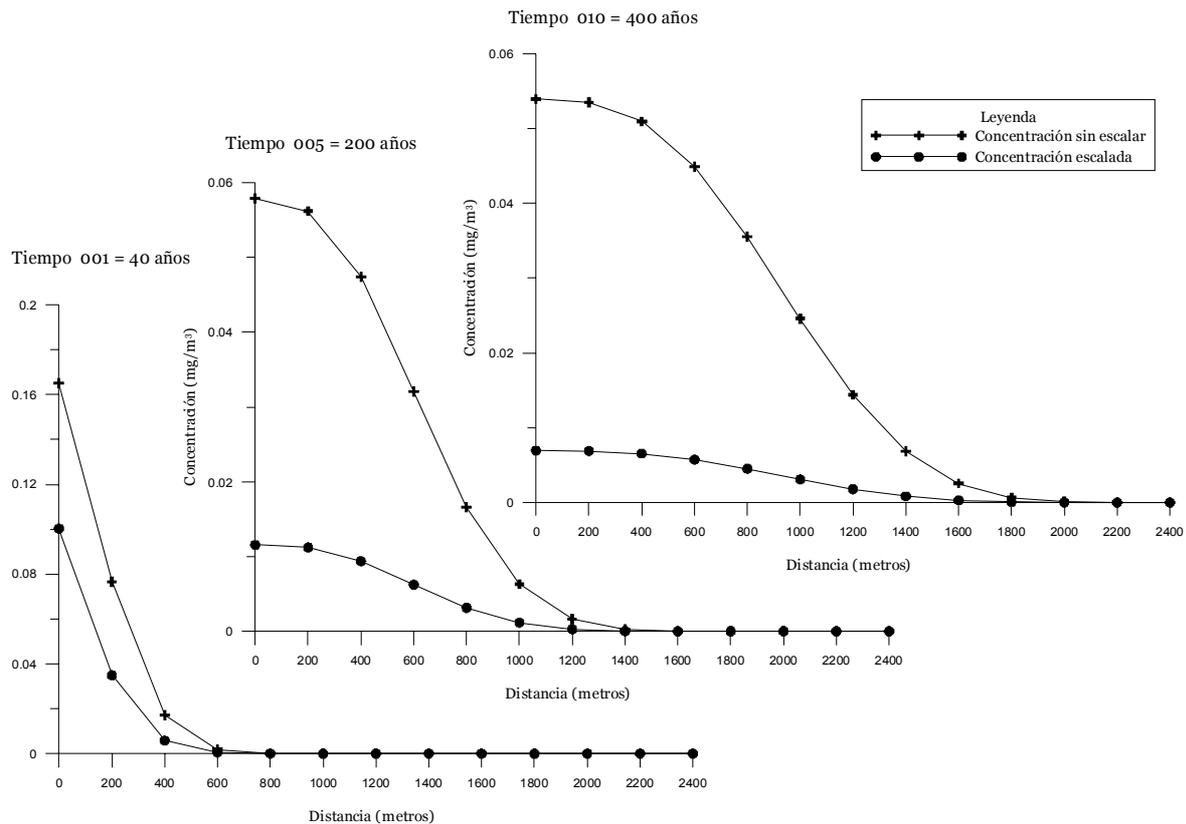


Figura 4.24.- Frentes de concentración obtenidos para tres intervalos de tiempo en un perfil paralelo al eje X y con el origen en la coordenada Y=400 m, donde se sitúa la entrada de agua y sedimento. El eje X sólo se ha representado hasta la coordenada X=2400 m. La escala de la concentración en el tiempo 1 es diferente a la representada en los tiempos 5 y 10.

Cross sections (parallel to X axis, in coordinate Y=400 m) showing the concentration fronts for three different time intervals. Black dots corresponds to the scaled experiment that controls the volume, and crosses indicate the results for the fourth experiment without scaling and sediment settling. Note the change in Y axis for time step 001.

↶ Arriba

4.3.4 Efecto de la dimensión

Finalmente, para validar el modelo de transporte y sedimentación propuesto, se han analizado los resultados obtenidos por el programa si se consideran dos experimentos entre los cuales se introduce, solamente, un cambio en las dimensiones del sistema. Teóricamente, este cambio no debería comportar diferencias en las morfologías obtenidas ni en el volumen de sedimento final.

Para comprobar si esta premisa se cumple, se ha comparado la morfología de la superficie correspondiente a la interfase agua-sedimento que resulta de aplicar un

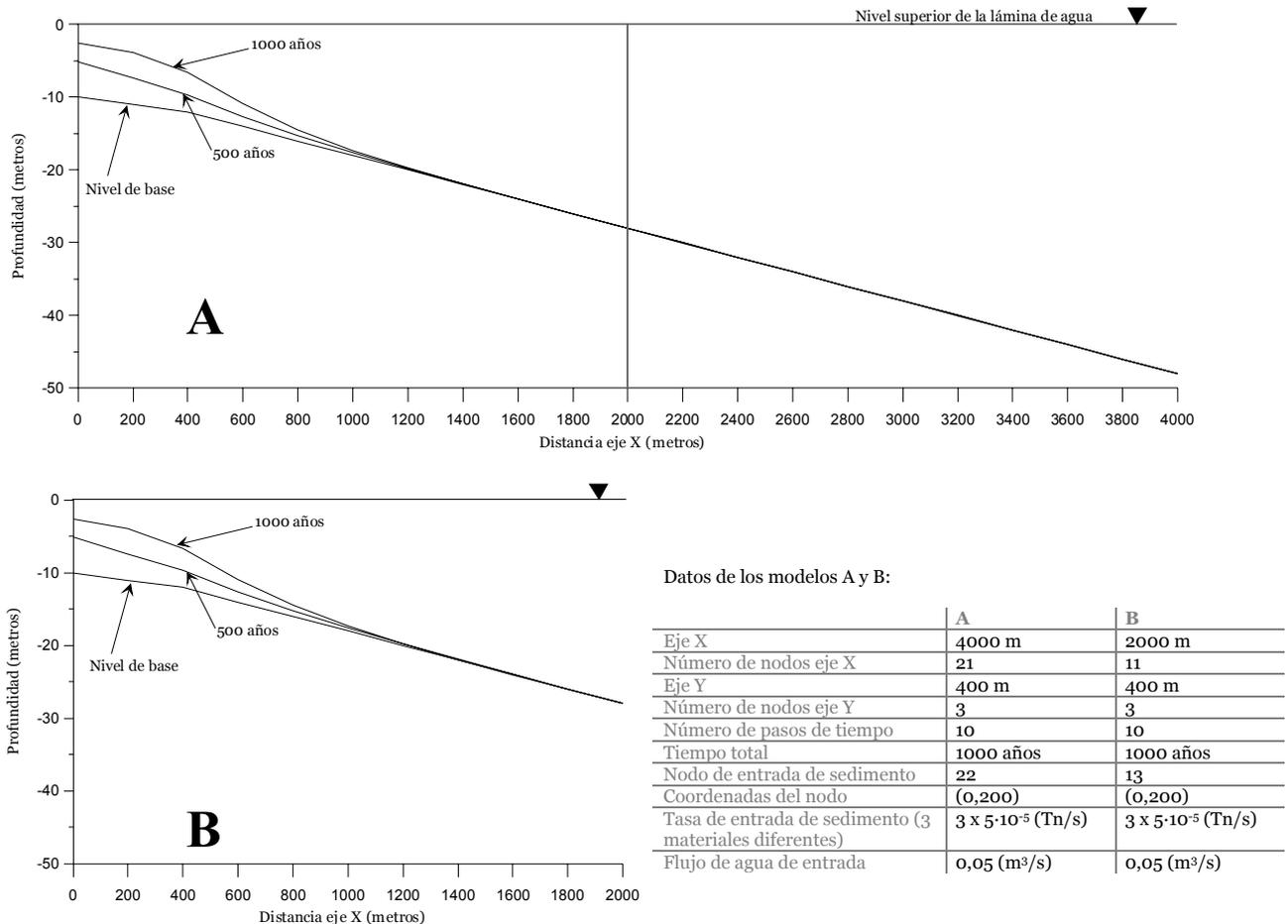


Figura 4.25.- Comparación de los dos experimentos A y B, cambiando las dimensiones de los mismos según se puede observar en la tabla adjunta. Para cada experimento se ha representado un perfil paralelo al eje X y situado en la segunda fila correspondiente al nodo de entrada del flujo agua y del material. Sólo se han representado las superficies de dos de los diez intervalos de tiempo calculados (500 y 1000 años).

Results of the experiments A and B to compare the geometry of the sedimentary bodies. The cross-sections are situated parallel to X axis meeting with the specified inflow boundary node. Only two surfaces are represented corresponding to time intervals of 500 and 1000 years. Note that the geometry of the sedimentary bodies does not change although the dimension of the model does.

mismo experimento sobre dos sistemas de dimensiones distintas (A y B). La configuración básica de los dos experimentos parte de una cuenca sedimentaria con una entrada de agua y sedimento situada en un nodo del contorno izquierdo. El contorno derecho se considera abierto de modo que se produce un flujo de agua de izquierda a derecha. Los parámetros introducidos en los dos experimentos y los resultados obtenidos en cada uno de ellos se recogen en la figura 4.25.

Comparando la geometría de las superficies correspondientes a dos intervalos de tiempo diferentes (500 y 1000 años), puede observarse que ésta es prácticamente la misma aunque cambie la dimensión del experimento. También el volumen de sedimento total (depositado, en suspensión y el que ha salido por el contorno abierto)

calculado al cabo de 1000 años para los dos experimentos es similar: 1751999 m³ (1748020 m³ depositados, 3979,024 m³ en suspensión y 0,101 m³ que han salido fuera) para el experimento **A**, y 1751999,5 m³ (1744053 m³ depositados, 3974,718 m³ en suspensión y 3971,382 m³ que han salido fuera) para el experimento **B**. Ambos valores suponen un error muy bajo o despreciable (inferior a un 0.00001%) si se comparan con el valor analítico definido a partir de la tasa de entrada de sedimento definida y que corresponde a un volumen de sedimento de 1752000 m³.

[↶ Arriba](#)

4.3.5 *Discusión de los resultados*

De las comparaciones realizadas en la primera parte de este apartado 4.3 entre los cálculos analíticos correspondientes a un transporte de sedimento difusivo y los resultados obtenidos mediante el programa SIMSAFADIM-CLASTIC para experimentos que consideran este mismo tipo de transporte, se puede extraer una correlación perfecta entre ambos y, por lo tanto, sin errores.

Si, por el contrario, se tiene en cuenta un transporte de sedimento de tipo dispersivo, se puede apreciar como existen diferencias entre los dos resultados, aunque estos errores se encuentran dentro de los límites aceptables y se atribuyen a la propia dispersión numérica de los cálculos.

De los experimentos descritos para controlar el balance de masa, puede deducirse que el factor más determinante en los resultados finales obtenidos es el carácter hiperbólico del término advectivo de la ecuación del transporte. Este tipo de ecuación provoca que, para sistemas dominados por la advección (número de grid-Peclet superior a 2), el control del balance de masa sea difícil, aunque no imposible. Al ser un problema ampliamente conocido en la comunidad científica, existen diferentes métodos que intentan reducir este efecto (un resumen de estos métodos existentes para solucionar la ecuación del transporte puede encontrarse en Ewing y Wang, 2001). Estos métodos pueden agruparse en los llamados **Lagrangianos** y los matriciales o **Eulerianos**.

Los métodos Lagrangianos incluyen, por ejemplo, el método de características o *characteristics* (MOC), o el algoritmo de paso aleatorio o *random walk* (RW) (véase Kinzelbach, 1986). Estos métodos no muestran una limitación al número de grid-Peclet y se basan en aplicar un sistema de coordenadas cartesianas que se mueva con el sistema a su misma velocidad lineal del flujo. De esta manera se reduce considerablemente el error causado por la advección. No obstante, estos métodos presentan una serie de desventajas conocidas (Haefner *et al.*, 1997):

- Requieren un alto tiempo de cálculo (CPU) debido al gran número de puntos que se mueven.
- Se caracterizan por una alta sensibilidad debido a un número relativamente bajo de puntos móviles por bloque de la malla.

Por el contrario, los métodos matriciales o *eulerianos* (como puede ser el método de las diferencias finitas, FD, o el de los elementos finitos, FE) tienen la ventaja de consumir menos tiempo de cálculo, pero la principal limitación la marca el número de grid-Peclet, que, para valores altos, requiere distancias entre los nodos de la malla muy pequeñas, por lo tanto, mallas muy densas con un gran número de nodos que pueden hacer aumentar considerablemente el tiempo de cálculo.

En el programa SIMSAFADIM-CLASTIC se utiliza un método *euleriano* (elementos finitos) que puede producir que exista un error en el balance de masa cuando el sistema está dominado por la componente advectiva del transporte. El método descrito para controlar este error (BMFC, Bitzer, 2004, inédito) se presenta como una alternativa simple a los métodos existentes, y permite obtener un volumen de sedimento y una distribución del mismo coherente con los valores introducidos en el sistema bajo estudio y, prácticamente, sin errores.

Para finalizar, cabe comentar que, mediante el programa SIMSAFADIM-CLASTIC, un cambio en las dimensiones de la malla de elementos finitos que discretiza la zona de estudio no conlleva errores ni en las geometrías ni en el volumen de sedimento final.