

UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA



TESIS DOCTORAL

**MODELO TRIDIMENSIONAL DE CAMINO ALEATORIO
PARA UN DERRAME DE PETRÓLEO. APLICACIÓN AL
DERRAME PRODUCIDO POR EL "NORTH CAPE"**

DIANA GRISOLÍA SANTOS

Las Palmas de Gran Canaria, Julio de 1998

72/1997-98

**UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA
UNIDAD DE TERCER CICLO Y POSTGRADO**

Reunido el día de la fecha, el Tribunal nombrado por el Excmo. Sr. Rector Magfco. de esta Universidad, el/a aspirante expuso esta TESIS DOCTORAL.

Terminada la lectura y contestadas por el/a Doctorando/a las objeciones formuladas por los señores miembros del Tribunal, éste calificó dicho trabajo con la nota de SOBRESALIENTE "CUM LAUDE" Las Palmas de Gran Canaria, a 29 de septiembre de 1998. POR UNANIMIDAD.

El/a Presidente/a: Dr. D. José Miguel Pacheco Castelao,

El/a Secretario/a: Dr. D. Antonio Martínez Marrero,

El/a Vocal: Dr. D. Emiliano Hernández Martín

El/a Vocal: Dr. D. Gregorio Parrilla Barrera.

El/a Vocal: ~~Dr. D. Carmen Rosa Hernández Suero,~~
7 Dr. D. CARMEN ISABEL FERNÁNDEZ DE LA NUEZ

El/a Doctorando/a: D^a. María Diana Grisolia Santos,

Universidad de Las Palmas de Gran Canaria



Departamento de Física

**Modelo tridimensional de camino aleatorio para un
derrame de petróleo. Aplicación al derrame producido por
*el North Cape***

Diana Grisolía Santos

1998

UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA

DOCTORADO EN CIENCIAS FÍSICAS

PROGRAMA DE OCEANOGRAFÍA FÍSICA Y FÍSICA

APLICADA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**MODELO TRIDIMENSIONAL DE CAMINO ALEATORIO
PARA UN DERRAME DE PETRÓLEO. APLICACIÓN AL
DERRAME PRODUCIDO POR EL *NORTH CAPE***

Tesis Doctoral presentada por Dña. Diana Grisolfá Santos, dirigida por el Dr. Malcom L. Spaulding y codirigida por el Dr. D. Francisco Rubio Royo.

El Director

El Codirector

El Doctorando

Fdo.: Dr. M.Spaulding

Fdo.: Dr. F. Rubio Royo

Fdo: Diana Grisolfá Santos

Las Palmas de Gran Canaria, 7 de julio de 1998

A mis padres, Carmen y Alfredo.

*A mis hermanos, Alfredo, Pili, Juan
Carlos, M^a Carmen, Lu y José
María.*

Con todo mi cariño.

Índice de Contenidos

1.	Introducción	1
	Introducción.....	1
	Antecedentes	4
	Objetivos.....	15
	Organización del estudio	16
2.	Fundamento teórico	19
	Introducción.....	19
	Ecuación de Difusión-Advección	20
	Método del camino aleatorio	28
	Aspectos conceptuales y origen del camino aleatorio	29
	Analogía con el transporte de soluto	35
	Aspectos computacionales generales.....	44
	Número de partículas.....	51
	Condiciones auxiliares.....	52
	Condiciones iniciales: representación de fuentes	52
	Condiciones de contorno.....	54
	Contorno $\partial\Omega_1$ o de Dirichlet	55
	Contorno $\partial\Omega_2$ o de flujo de entrada.....	56
	Contorno $\partial\Omega_3$ o de flujo cero	56
	Contorno $\partial\Omega_4$ o de flujo de salida.....	57
	Tratamiento de datos y sensibilidad de un modelo de camino aleatorio ...	57
3.	Aplicación de un modelo de camino aleatorio a un derrame de petróleo: Generalidades	63
	Introducción.....	63
	Procesos físicos que afectan a un derrame de petróleo.....	64
	Advección y difusión turbulenta	65
	Expansión horizontal	67
	Dispersión mecánica y mezcla en la vertical	73
	Ecuaciones que rigen los procesos descritos	79
	Implementación	81
	Campo de velocidades	81
	Velocidad terminal.....	82
	Coeficientes de difusión.....	84
	Coeficientes de difusión horizontal	84
	Coeficientes de difusión vertical.....	87

Índice de Contenidos

Condiciones iniciales.....	91
Condiciones de contorno.....	92
Superficie.....	93
Fondo.....	93
Océano abierto.....	94
Costa.....	94
Distribución de partículas.....	94
Distribución Uniforme.....	95
Distribución Forrester (1971).....	96
Distribución Delvigne y Sweeny (1988).....	97
Número de partículas.....	97
Dispersión mecánica.....	98
4. Aplicación de un modelo de camino aleatorio al derrame de petróleo producido por el <i>North Cape</i>.....	101
Introducción.....	101
Aplicación unidimensional: estudio de la dispersión mecánica por oleaje rompiente.....	105
Introducción.....	105
Método y aplicaciones.....	107
Procesos de entrada de petróleo en la columna de agua.....	107
Fuente inicial.....	108
Coeficiente de difusión vertical.....	108
Aplicación a un caso teórico: Barreras de contención.....	109
Modelo teórico.....	110
Estimación de $K_z(\infty)$	112
Límite operacional para el control de un derrame.....	113
Casos de estudio.....	114
Resultados y discusión.....	114
Aplicación a un caso real: Derrame de petróleo <i>North Cape</i>	119
Entrada en la columna de agua del petróleo.....	121
Profundidad de intrusión.....	122
Aumento de turbulencia en la profundidad dt	124
Resultados y discusión.....	125
Conclusiones.....	133
Aplicación bidimensional: estudio de la expansión horizontal del petróleo por dispersión turbulenta.....	134
Introducción.....	134
Método y definiciones.....	135
Expansión de una mancha de soluto por dispersión turbulenta.....	137
Simulaciones numéricas.....	144
Análisis de resultados.....	147

Resultados numéricos para cada uno de los intervalos de tamaño ...	150
Resultados para las distribuciones	163
Discusión	169
Conclusiones	173
Aplicación tridimensional: estudio de los procesos físicos relacionados con el derrame	175
<i>North Cape</i>	
Introducción	175
Petróleo superficial	176
Método y resultados	178
Petróleo subsuperficial	185
Método y resultados	187
Discusión	192
Mancha superficial	193
Mancha subsuperficial	196
Conclusiones	212
5. Conclusiones	215
Resumen y Conclusiones	215
Bibliografía	219
6. Apéndices	231
Procesos de Wiener-Lévy	231
Evaluación del tensor \mathbb{B}	232
Derivación de la ecuación de desplazamiento	237

Índice de Figuras

1.1	Principales procesos que afectan al petróleo.	5
1.2	Procesos característicos de interacción de la mancha de petróleo con la costa.	7
2.3	Definición del problema de contorno. El sistema que se modeliza aparece sombreado en gris.	26
2.4	Movimiento de una partícula en diferentes pasos hasta la posición \mathbf{X}, T	36
2.5	Simulación del movimiento de N partículas partiendo de X_0, t_0 hasta un tiempo final T . Se muestra así mismo la función de distribución de las partículas.	37
2.6	Movimiento de N partículas que se distribuyen inicialmente en el espacio según la función $f(X, t_0)$	38
2.7	Sobreestimación en la advección debido a un incremento finito en el tiempo para un campo de velocidades definido.	46
2.8	Sobreestimación en la celdilla de cálculo.	47
2.9	Movimiento de dos partículas usando el primer método. El trazo grueso determina el desplazamiento advectivo, el trazo fino representa el desplazamiento aleatorio. Finalmente las flechas indican la velocidad en cada célula.	50
2.10	Movimiento de dos partículas según el segundo método propuesto. Los desplazamientos dentro de cada celda son de longitud variable, moviéndose siempre con el flujo marcado en cada celdilla. Los símbolos se deben interpretar igual que en la figura precedente.	51
2.11	Distribución de 30 partículas. (a) Aleatoriamente en tres celdillas. (b) Como fuente lineal de partículas.	53

2.12	Diferentes dominios de cálculo y condiciones de contorno	55
2.13	Condición de contorno de flujo nulo, o condición $\partial\Omega_3$	57
2.14	Posición del volumen de muestra Ω_S en el dominio de cálculo Ω_c . (Simplificado a dos dimensiones)	58
2.15	Ruido debido a la simulación de una distribución de concentración concreta. El área sombreada en gris representa la distribución real, la blanca es la suma de polígonos que representa la distribución.	60
3.16	(a) Número de partículas según tamaño y (b) masa de petróleo que ocupan las partículas de cada intervalo de tamaño para cada distribución de partícula utilizado.	98
4.17	Malla de la costa de Rhode Island (EEUU) en donde se produjo el derrame de petróleo <i>North Cape</i> en enero de 1996.	102
4.18	Probabilidad de que una partícula de petróleo esté en el metro superior de la superficie oceánica para diferentes tamaños de partículas.	115
4.19	Probabilidad de que una partícula esté en el metro superior de la superficie oceánica en función de la velocidad del viento. La dispersión de la mancha superficial de petróleo viene dada únicamente por la turbulencia oceánica como proceso de entrada de petróleo en la columna.	116
4.20	Probabilidad de que una partícula esté en el primer metro de la superficie oceánica en función de su tamaño y de la velocidad del viento. La dispersión se debe tanto al oleaje como a la turbulencia oceánica.	117
4.21	Probabilidad de que una partícula esté en el primer metro de la superficie oceánica en función de su tamaño y de la velocidad del viento, cuando la dispersión se debe únicamente a la debida al oleaje que rompe sobre la mancha.	118
4.22	Profundidad media de las partículas para cada uno de los	

Índice de Figuras

	intervalos de tamaño y velocidad de viento utilizada en el caso en el que la dispersión de petróleo superficial viene dado únicamente por el oleaje.	119
4.23	Variación de la masa superficial de petróleo en superficie dependiendo de la distribución de partículas para el caso de dispersión dada únicamente por turbulencia oceánica.	120
4.24	Variación de masa superficial de petróleo según distribución de partículas para diferentes velocidades de viento cuando la dispersión se ha representado por la acción conjunta de la dispersión mecánica por oleaje rompiente y por turbulencia oceánica.	121
4.25	Masa superficial de petróleo para las diferentes distribuciones de partículas en el caso en que la dispersión de petróleo superficial se debe únicamente al oleaje.	122
4.26	Velocidad y dirección del viento desde las 20:00 h del 19 de enero de 1996	123
4.27	Profundidad hasta la que se registra un aumento de la turbulencia, dada por Agrawal et al. (1992) para diferentes velocidades del viento.	124
4.28	Variación de la masa superficial de petróleo para las simulaciones en las que se ha representado el proceso de entrada de petróleo en la columna como debido, (a) únicamente al oleaje y (b) cuando actúan conjuntamente la turbulencia oceánica y el oleaje (Caso I).	127
4.29	Variación temporal de la masa superficial de petróleo para las simulaciones en las que se ha representado el proceso de entrada de petróleo en la columna como debido (a) únicamente al oleaje y (b) cuando oleaje y turbulencia oceánica actúan conjuntamente (Caso II).	128
4.30	Variación del número de partículas en superficie para cada uno de los intervalos de tamaño utilizado para el caso I.	129

4.31	Variación del número de partículas en superficie para cada uno de los intervalos de tamaño utilizado para el caso II	130
4.32	Variación temporal de la masa superficial de petróleo para cada una de las distribuciones de partículas cuando se ha aumentado la profundidad de intrusión de las partículas por oleaje (Caso III) para la dispersión de petróleo superficial por (a) oleaje rompiente y (b) turbulencia oceánica y oleaje, conjuntamente.	130
4.33	Variación temporal de la masa superficial de petróleo cuando se ha aumentado la turbulencia en profundidad dt así como la profundidad de intrusión de las partículas en la columna (Caso IV) para la entrada de petróleo por (a) oleaje y (b) turbulencia oceánica y oleaje, conjuntamente.	131
4.34	Variación temporal de la masa superficial de petróleo utilizando condiciones reflectantes en superficie para las condiciones correspondientes al Caso I cuando el proceso de entrada de petróleo en la columna viene dado por (a) oleaje rompiente y (b) acción conjunta de la turbulencia oceánica y del oleaje.	131
4.35	Distribuciones de velocidad en el plano vertical, calculadas a partir de los perfiles Van Veem.	145
4.36	Varianza horizontal de diferentes manchas superficiales de petróleo formadas por partículas de igual tamaño para un perfil de velocidad de Van Veem para $q = 2$	150
4.37	Varianza horizontal de diferentes manchas superficiales de petróleo formadas por partículas de igual tamaño para un perfil de velocidad de Van Veem para $q = 4$	151
4.38	Varianza horizontal de diferentes manchas superficiales de petróleo formadas por partículas de igual tamaño para un perfil de velocidad de Van Veem para $q = 6$	152
4.39	Varianza horizontal de diferentes manchas superficiales de petróleo formadas por partículas de igual tamaño para un	

Índice de Figuras

	perfil de velocidad de Van Veem para $q = 8$	153
4.40	Profundidades máximas de intrusión para las velocidades terminales correspondientes a los tamaños de partícula utilizados. Simulaciones con diferentes valores del coeficiente de difusión turbulenta vertical.	154
4.41	(a) Distribución de la velocidad en el plano vertical calculada a partir de la ecuación 4.139 para $q = 1$ (b) Mismo perfil en el que se ha señalado las profundidades de intrusión para dos tamaños de partículas (Zona 1 y Zona 2).	155
4.42	Varianzas horizontales para diferentes manchas horizontales de petróleo formadas por partículas de petróleo del mismo tamaño para un perfil de velocidad con $q = 1$	156
4.43	Tiempo de mezcla para partículas de petróleo con respecto a (a) velocidad terminal y (b) profundidad máxima de intrusión.	157
4.44	Valor de los coeficientes de dispersión turbulenta en la horizontal con respecto a la velocidad terminal para los diferentes perfiles de velocidad horizontal.	158
4.45	Coefficientes de dispersión turbulenta calculados a partir de la ecuación 4.154 con respecto a la velocidad terminal para diferentes perfiles de velocidad horizontal.	161
4.46	Diferencias relativas entre los coeficientes de difusión calculados a partir de la ecuación y los obtenidos a partir de las simulaciones con respecto a la velocidad terminal para los diferentes perfiles de velocidad horizontal, $u(z)$, utilizados.	162
4.47	Varianza horizontal para manchas de petróleo formada por partículas de diferente tamaño para un perfil de velocidad, $u(z)$, con $q = 6$. Condiciones reflectantes en superficie.	164
4.48	Coefficientes de dispersión turbulenta horizontal con respecto a la velocidad terminal. Condiciones reflectantes (a) y semiabsorbentes (b) en superficie.	165

4.49	Evolución temporal de la varianza horizontal para manchas de petróleo formada por partículas de diferentes tamaños y perfiles de velocidad. Trazo grueso: distribución Forrester; trazo punteado: distribución Delvigne y Sweeney; Trazo segmentado: distribución uniforme.	166
4.50	Tiempo de mezcla con respecto a varios coeficientes de difusión turbulenta vertical para las diferentes distribuciones utilizadas.	167
4.51	Coefficientes de dispersión turbulenta para manchas de petróleo formadas por partículas de diferente tamaño. Se han calculado a partir de simulaciones para cada uno de los perfiles de velocidad Van Veem utilizados.	168
4.52	Coefficientes de dispersión turbulenta horizontal para cada uno de los perfiles de velocidad utilizados. Se consideran manchas de petróleo formadas por partículas de diferente tamaño.	169
4.53	Mapa de la zona afectada por el derrame. En él se sitúa el lugar donde encalló el barco y los lugares mencionados en el trabajo.	177
4.54	Extensión y forma del derrame causado por el carguero <i>North Cape</i> para el día 21 de enero de 1996. El petróleo ha alcanzado Block Island	178
4.55	Trayectoria del centroide de la mancha superficial desde el día 19 a las 20 horas hasta el 21 a las 9 horas.	181
4.56	Mancha superficial de petróleo para la simulación F1 cuando el 0% del petróleo se libera en la columna de agua. Se utiliza una distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones dadas en ppm).	182
4.57	Mancha superficial de petróleo para la simulación F2 cuando el 0% del petróleo se libera en la columna de agua. Se utiliza una distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones dadas en ppm).	183
4.58	Mancha superficial de petróleo para la simulación F3 cuando	

Índice de Figuras

	el 0% del petróleo se libera en la columna de agua. Se utiliza una distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones dadas en <i>ppm</i>).	184
4.59	Mancha superficial de petróleo para la simulación F3 cuando el 100% del petróleo se libera en la columna de agua. Se utiliza una distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones dadas en <i>ppm</i>).	185
4.60	Mancha superficial de petróleo para la simulación F3 cuando el 0% de petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Forrester (concentraciones dadas en <i>ppm</i>)	186
4.61	Mancha superficial de petróleo para la simulación F3 cuando el 0% de petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Uniforme (concentraciones dadas en <i>ppm</i>)	187
4.62	Área afectada por el petróleo subsuperficial. En la figura da una idea de la biota dañada.	188
4.63	(a) Localización de las estaciones cercanas a la costa en donde se midió la cantidad de petróleo total en la columna de agua a profundidades de 1 <i>m</i> por encima del fondo durante el día 21 a las 12 h (b) Valores de concentración de petróleo en <i>ppm</i> tomados en dichas estaciones (Latimer, 1996)	189
4.64	Distribución en superficie de partículas de petróleo para el día 21 a las 9 h cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna. Los diferentes colores representan cada uno de los intervalos de tamaño utilizados.	191
4.65	Trayectoria del centroide de la mancha de petróleo subsuperficial desde el día 19 a las 20 horas hasta el 21 a las 9 horas.	192
4.66	Distribución de partículas de petróleo aproximadamente a 1 <i>m</i> por encima de los sedimentos para la simulación F3 el día 21 a las 12 h, cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna.	193
4.67	Isolneas para petróleo medido a 1 <i>m</i> por encima del fondo	

para la simulación **F3** cuando el 60% del petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones en *ppm*) 194

4.68 Isolneas para petróleo medido a 1 *m* por encima del fondo para simulación **F3** cuando el 60% del petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Forrester (concentraciones en *ppm*) 195

4.69 Isolneas para petróleo medido a 1 *m* por encima del fondo para la simulación **F3** cuando el 60% del petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Uniforme (concentraciones en *ppm*) 196

4.70 Movimiento del centroide para una mancha superficial de petróleo formada a partir de una fuente puntual instantánea. La simulación K1 utiliza los coeficientes de difusión $K_x = K_y = 10 \text{ m}^2/\text{s}$; $K_z = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$. En la simulación K2 los coeficientes de difusión son variables. 197

4.71 Movimiento del centroide de una mancha superficial de petróleo formada a partir de una fuente instantánea puntual con un factor de viento del 0% para la simulación V1 y de un 2% para la simulación V2. En ambas, los coeficientes de difusión empleados son $K_x = K_y = 10 \text{ m}^2/\text{s}$ y $K_z = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$ 198

4.72 Movimiento del centroide para una mancha superficial de petróleo formada a partir de una fuente instantánea superficial. El petróleo se mueve por corrientes y difusión cuando alcanza la costa para la simulación L1 mientras que sólo lo hace por difusión para la simulación L2. 199

4.73 Distribución de partículas de petróleo en la columna para la simulación **F3** cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna. La turbulencia generada por el oleaje ha aumentado de acuerdo con la formulación dada por Thorpe (1995). 200

4.74 Distribución de partículas de petróleo aproximadamente a 1 *m* por encima de los sedimentos para la simulación **F3** en donde el 60% del petróleo se ha liberado en columna, y la turbulencia superficial oceánica generada por el oleaje aumenta de acuerdo

Índice de Figuras

	a la formulación dada por Thorpe (1995).	201
4.75	Isolíneas para petróleo medido a 1 m por encima del fondo para simulación F3 cuando el 60% del petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones en ppm). La turbulencia oceánica generada por el oleaje rompiente se ha incrementado siguiendo Thorpe (1995)	202
4.76	Distribución de partículas de petróleo en la columna cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna. La turbulencia generada por el oleaje ha aumentado de acuerdo con la formulación dada por Thorpe (1995) y se utiliza una condición semiabsorbente en el fondo.	203
4.77	Distribución de partículas de petróleo aproximadamente a 1 m por encima de los sedimentos para la simulación en donde el 60% del petróleo se ha liberado en columna, y la turbulencia superficial oceánica generada por el oleaje aumenta de acuerdo a la formulación dada por Thorpe (1995).	204
4.78	Isolneas para petróleo medido a 1 m por encima del fondo para la simulación F3 cuando el 60% del petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones en ppm). La turbulencia oceánica generada por el oleaje rompiente se ha incrementado siguiendo Thorpe (1995) y se ha utilizado una condición semiabsorbente en el fondo.	205
4.79	Distribución de partículas de petróleo en superficie para el día 21 a las 9 h cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna y la turbulencia oceánica superficial aumenta por el oleaje según formulación dada por Thorpe(1995).	206
4.80	Distribución de partículas de petróleo en superficie para el día 21 a las 9 h cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna y la turbulencia oceánica superficial aumenta por el oleaje según formulación dada por Thorpe (1995). Condición en el fondo semiabsorbente.	207
4.81	Distribución de partículas de petróleo en superficie para el día 21 a las 9 h cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna.	208

4.82	Mancha superficial de petróleo para la simulación F3 cuando el 60% de petróleo se libera en la columna de agua, para la Distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones en <i>ppm</i>).	209
4.83	Mancha superficial de petróleo para la simulación F3 cuando el 60% de petróleo se libera en la columna de agua, para la Distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones en <i>ppm</i>). La turbulencia en superficie se ha implementado según Thorpe.	209
4.84	Mancha superficial de petróleo para la simulación F3 cuando el 60% de petróleo se libera en la columna de agua, para la Distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones en <i>ppm</i>). La turbulencia en superficie se ha implementado según Thorpe. Condiciones no reflectantes en el fondo.	210
4.85	Distribución de partículas de petróleo en superficie, pertenecientes al intervalo de tamaño menor, para el día 21 a las 9 h.	210
4.86	Distribución de partículas de petróleo en superficie, pertenecientes al intervalo de tamaño mayor, para el día 21 a las 9 h.	211
6.87	Relación entre el vector velocidad V , la línea de corriente y el sistema de ejes rotados X^*	234

Capítulo 1. Introducción

1.1 Introducción

La frecuencia con que se producen derrames de petróleo en el océano ha dado lugar a un elevado interés por parte de los investigadores para desarrollar métodos que permitan predecir el movimiento y las alteraciones que sufre el petróleo cuando se introduce en el mar. El petróleo constituye un contaminante potencial en todas y cada una de sus fases: su explotación, su transporte por ríos y océanos y su almacenamiento. Por ejemplo, según datos del periodo que va desde 1988 a 1991, se produjeron veintiocho derrames de petróleo, con vertidos superiores a 500.000 litros. Para este mismo periodo, los derrames de petróleo de mayor envergadura, -excluyendo los derrames de petróleo causados por la Guerra del Golfo en Kuwait e Irak-, llegaron a alcanzar los 293.000.000 litros. Sin duda, la cantidad más importante conocida hasta la fecha se debe a la Guerra del Golfo (1991), siendo ésta de 143 billones de litros según la *National Oceanic and Atmospheric Administration* de EE. UU. (NOAA, 1992). Pero si estas cantidades no fuesen suficientes, baste con considerar el siguiente panorama (Brown et al., 1997): cada año se vierten 8,8 millones de toneladas de petróleo en los océanos; de ellas, el Mediterráneo recibe 2 millones de toneladas de residuos al año, de las cuales 600.000 son de petróleo. Añadido a esto, hay que considerar que en el fondo de los océanos hay acumuladas más de 280.000 toneladas de alquitrán.

Debido al interés en evaluar y paliar el indudable daño mediambiental que se produce como consecuencia directa de estos derrames, se han ido desarrollando modelos matemáticos que simulan su transporte y alteración. El desarrollo se ha

Introducción

realizado fundamentalmente para el océano, a pesar de lo cual, pocos de los diferentes modelos que han aparecido durante estos años se consideran efectivos para estos propósitos según la *American Society of Civil Engineers* (ASCE). Estos modelos se emplean básicamente para predecir el movimiento del petróleo durante los accidentes y evaluar el impacto medioambiental. Otra aplicación importante de los modelos es la planificación de las técnicas de eliminación y contención de petróleo que se debieran usar.

La evolución de los modelos de derrames de petróleo desarrollados en los pasados 25 años, ha consistido en el paso de simples modelos bidimensionales a modelos tridimensionales que contemplan una gran variedad de procesos físicos. Los primeros trataban básicamente de predecir la trayectoria del petróleo superficial, mientras que los actuales modelos tridimensionales ya incluyen procesos tanto de transporte como de alteración del petróleo.

La modelización de los procesos que sufre el petróleo en el mar se basa en la integración de las formulaciones matemáticas o algoritmos que describen los fenómenos a representar. Si los modelos incluyen la alteración del petróleo, generalmente contemplarán los procesos de expansión horizontal de la mancha de petróleo por propiedades físico-químicas, su evaporación, dispersión mecánica por oleaje rompiente, disolución, emulsificación (incorporación de agua en la superficie del petróleo), interacción del petróleo con la costa y sedimentación.

La parte del modelo que se refiere a su alteración, estima el transporte de petróleo entre diferentes compartimentos medioambientales (por ejemplo, la evaporación representa transporte desde la superficie del mar a la atmósfera), así como el cambio en las características de la densidad del petróleo, contenido de agua, viscosidad, etc. La mayoría basan la modelización de estos procesos en la inclusión de una ecuación que proporcione el equilibrio de masa para seguir la cantidad de petróleo que existe en cada compartimiento (superficie del mar, atmósfera, columna de agua, petróleo en costa, en hielo, en sedimentos, biodegradación, etc). Existen finalmente, otros procesos que se dan después de todos los que se han enumerado y que pueden ser de interés,

como son la fotooxidación y la biodegradación del petróleo.

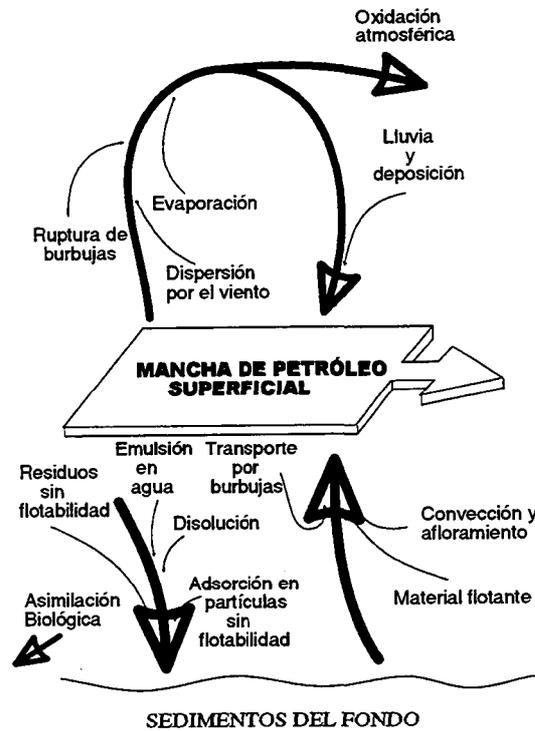
Aunque para la mayor parte de los casos sólo se necesita un modelo superficial para predecir la distribución de la mancha de petróleo, en la actualidad se tiende a incluir la tercera dimensión para poder controlar el petróleo que entra en la columna de agua y evaluar su posterior transporte subsuperficial, ya que se ha demostrado su relevancia en la correcta predicción del movimiento de una mancha de petróleo. Este fenómeno se puso de manifiesto en la catástrofe medioambiental originada por el petrolero *Braer*, cuando la entrada de petróleo en la columna de agua y su posterior transporte subsuperficial por las corrientes marinas originó la formación de nuevas manchas en áreas donde no estaba inicialmente previsto. Paralelamente, debido a que los procesos físicos que actúan sobre el movimiento y alteración de una mancha de petróleo no son suficientemente conocidos, se originan limitaciones que hacen disminuir su eficacia apreciablemente. Aún con dichas limitaciones, resulta evidente que es necesario poder predecir con la máxima precisión el movimiento de la mancha de petróleo y, consecuentemente, en base a los resultados de los modelos, mejorar la eficiencia de las técnicas de contención y eliminación del petróleo en el mar.

1.2 Antecedentes

Existen aproximadamente cerca de 50 modelos conocidos que simulan el transporte y los diferentes procesos que sufre el petróleo cuando se introduce en el mar. Sus características y los procesos físicos que incluye cada uno se pueden encontrar en varias publicaciones (Stolzenbach et al., 1977; Huang y Monastero, 1982; Spaulding, 1988; Yapa y Shen, 1994). La mayor parte sólo trata de seguir el desplazamiento de la mancha superficial de petróleo y son llamados *modelos de trayectoria*, incorporando los fenómenos físicos mejor conocidos. Los modelos más evolucionados ya incorporan la parametrización de procesos más complicados como la deposición del petróleo en costa, pero no incluyen por ejemplo la emulsificación o evaporación, que varían apreciablemente el comportamiento de la mancha. En consecuencia, la evolución de los modelos de derrame de petróleo pasa por la correcta parametrización e incorporación de cada uno de los procesos que afectan a un derrame de petróleo. La Figura 1.1 da una idea de los principales procesos físicos que afectan a la evolución de una mancha de petróleo según Krogh (1984).

Aunque se tienen identificados los diferentes mecanismos que afectan al petróleo en el agua, no ocurre lo mismo con la parametrización de los procesos que representan. Se han propuesto diferentes escalas cualitativas para resumir el conocimiento actual sobre este tema (Mackay y McAuliffe, 1988; Sebastiao y Guedes, 1995). La tabla 1.1 muestra la más reciente, que resume el conocimiento actual sobre este tema (Sebastiao y Guedes, 1995).

En esta tabla, basada en la escala cualitativa definida por Sebastiao y Guedes, aparecen varios procesos que dependen de fenómenos físicos claramente identificados. La *extensión* de la mancha depende, entre otros, de la gravedad, tensión superficial, tamaño de las partículas, difusión por cizalla y viscosidad. La *deriva* se ve básicamente afectada por el viento y las corrientes de agua. La *evaporación* es un fenómeno complejo donde intervienen la presión de vapor del petróleo, área del derrame y espesor de la mancha, dando como resultado un aumento de la densidad



Comportamiento del petróleo en el agua

Figura 1.1. Principales procesos que afectan al petróleo.

y la viscosidad del petróleo. La *disolución* está determinada por el coeficiente de disolución del petróleo en agua, la solubilidad del mismo y puede ser de gran relevancia desde el punto de vista toxicológico. La dispersión depende totalmente del estado del mar, que va a estar definido básicamente por la cizalla del viento y las olas rompientes. La *emulsificación*, proceso por el cual entra agua dentro de la masa de petróleo, aumenta la viscosidad y el volumen del derrame. Depende de la turbulencia oceánica, la temperatura y composición del petróleo. Los procesos de *fotólisis*, *sedimentación* y *biodegradación* son de menor importancia, dependiendo de la radiación solar, la asociación con las partículas en suspensión y el área afectada respectivamente. Se pueden incluir dos procesos más de menor orden, como son la *deposición* y *reflotación*.

Antecedentes

Proceso	Importancia	Tiempo	Conoc. / Param.
Extensión	Extensión del área	Variable	Escaso / Escaso
Deriva	Movimiento sobre grandes áreas	Variable	Bueno / Bueno
Evaporación	Pérdida del 20-40% (masa)	Primeras horas	Excelente / Bueno
Disolución	Pérdida del 1% (masa)	Durante el derrame	Excelente / Escaso
Dispersión	Entre $15\mu\text{g l}^{-1}$ y 2 mg l^{-1} (primeros 10 m)	Variable	Pobre / Muy pobre
Emulsificación	Introduce hasta un 80% de agua	Variable	Pobre / Muy pobre
Fotólisis	Formación de hidrocarburos solubles en agua	> 1 semana	Escaso / Muy pobre
Sedimentación	Posible con materia en suspensión	Variable	Escaso / Pobre
Biodegradación	Destino de la mayor parte del derrame	3 meses ~ años	Bueno / Pobre

Tabla 1.1. Resumen de los procesos dominantes

Ambos sólo son relevantes cuando se considera la interacción de la mancha con la costa, según muestra la Figura 1.2. Parece evidente que, puesto que el conocimiento de la física de muchos de estos fenómenos es pobre, las simulaciones que los incorporan deben ser vistas con ciertas reservas (ASCE, 1996).

La simulación de un derrame de petróleo y los procesos que sufre en su expansión se pueden abordar utilizando diferentes tipos de modelización. Generalmente, los modelos de concentración han empleado una aproximación euleriana y resuelven la ecuación de difusión-advención en los nodos o puntos medios de la malla. Aunque inicialmente predominaron los modelos eulerianos, durante los últimos años la modelización lagrangiana se ha abierto camino. La diferencia esencial entre estos dos tipos de modelizaciones es la forma en la que se aborda la simulación.

La modelización lagrangiana significa el seguimiento de una serie de elementos discretos que se mueven con las corrientes, por lo que siempre la interpretación es más sencilla que en el caso de obtener valores en los puntos medios de una malla. Por

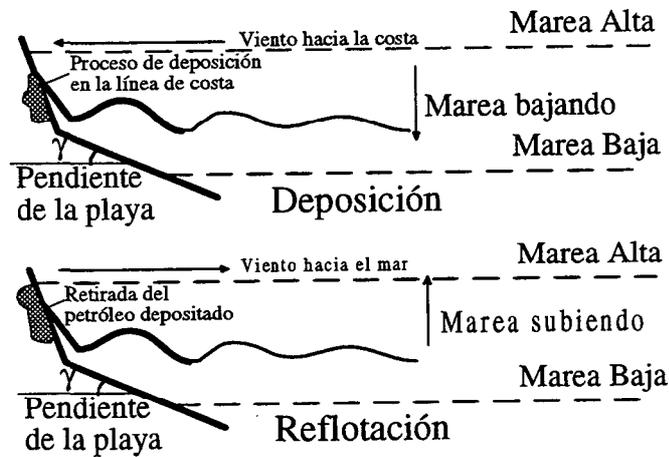


Figura 1.2. Procesos característicos de interacción de la mancha de petróleo con la costa.

ello, los métodos de análisis directos del movimiento de partículas discretas en flujos turbulentos mediante la modelización lagrangiana se han venido utilizando cada vez más (Ozmidov, 1990).

En una modelización de un derrame de petróleo, interesa en primer lugar, la trayectoria que va a tener el petróleo superficial para así poder prevenir las zonas que potencialmente se verían dañadas por el petróleo. La modelización de tipo lagrangiano de la distribución en superficie es muy sencilla de implementar, ya que se utiliza el propio petróleo como marcador y se sigue su trayectoria, que es la misma de las corrientes superficiales de la zona. Sin embargo, no ha sido el hecho en si de utilizar el propio petróleo como marcador el determinante de la introducción de la modelización lagrangiana, sino que arranca de bastante atrás.

Se puede afirmar que el hecho de considerar el petróleo formado por partículas de diferente tamaño se remonta a la evidencia que Forrester (1971) encontró durante el derrame de petróleo *Arrow*, al detectar partículas de petróleo a varias profundidades.

Antecedentes

La causa de ese petróleo subsuperficial se debía a la turbulencia superficial y oceánica generada por oleaje, principalmente. A partir de ahí se fueron realizando estudios acerca de la dispersión de petróleo, motivados por la importancia de la contención del derrame de petróleo (Leibovich 1975, 1976). Esto llevó a que se desarrollasen diferentes aproximaciones lagrangianas combinando simplemente el transporte subsuperficial de partículas con el transporte superficial de pequeñas manchas de petróleo que se mueven con las corrientes y de forma aleatoria con las fluctuaciones de la velocidad. Aquí surge por primera vez el concepto del movimiento de la partícula como combinación de un movimiento determinístico (el de la corriente) y un movimiento aleatorio. Como resultado se estudia el movimiento del petróleo subsuperficial suponiéndolo formado por partículas de diferente tamaño, utilizando modelos probabilísticos y estadísticos dada la naturaleza aleatoria de los procesos que originan las partículas de petróleo (Fallah y Stark, 1976). Posteriormente aparecieron trabajos que se dedicaron a estudiar el movimiento del petróleo subsuperficial, pero no profundizaron en la causa que los produce. En esta línea se realizaron estudios que introdujeron pequeñas aportaciones a lo conocido hasta el momento (Robertson, 1982).

Fue el trabajo de Delvigne y Sweeny (1988), considerado el más completo en este ámbito, el que define el petróleo subsuperficial como formado por partículas de diferente tamaño. Las técnicas para evaluar el transporte del petróleo subsuperficial pasaron de métodos estadísticos (Leibovich 1975, 1976) y probabilísticos (Fallah y Stark, 1976), a la modelización por Camino Aleatorio introducida en este campo por Hunter (1980). Desarrolló un modelo bidimensional promediado en superficie en donde la mancha de petróleo se suponía que estaba formada por partículas, moviendo el petróleo por velocidades determinadas a partir de una malla. Por primera vez en este campo, el paso difusivo venía dado por un *modelo de camino aleatorio*. Posteriormente, Johansen (1982) propuso un modelo bidimensional en vertical que analizaba la variación de la concentración de las partículas con la profundidad,

empleando como método de integración por diferencias finitas para obtener el perfil de concentración de petróleo para cada uno de los rangos de partículas elegidas. En un trabajo de este mismo autor, se empleó una simulación basada en partículas para modelizar la expansión del petróleo debido a fuerzas gravitacionales e interfaciales (Johansen, 1985). En este modelo, Johansen utilizó las ecuaciones unidireccionales de expansión desarrolladas por Fay (1969) para modelizar la extensión lateral de la mancha. La expansión se trató como un proceso de difusión y fue simulada usando un método de camino aleatorio. El coeficiente de difusión se calculó en base a las ecuaciones de Fay.

Aunque existen diversas formas de abordar la modelización lagrangiana, la aplicación del método de camino aleatorio es utilizada mayoritariamente debido a su simplicidad y claridad de los resultados obtenidos (Tompson et al., 1988; Dimou, 1989). La base de este tipo de modelos reside en la consideración de la mancha de petróleo como un conjunto de partículas que se mueven debido a las corrientes oceánicas. La implementación se realiza mediante la superposición de un proceso determinístico y uno aleatorio.

Se produjo una nueva progresión en la modelización de la expansión de una mancha de petróleo con los estudios realizados por Elliot (1986) y Elliot et al. (1986). En estos trabajos se modelizó tridimensionalmente el movimiento de partículas de petróleo de diferente tamaño mediante el camino aleatorio, llegándose a la conclusión de que la expansión estaba bien representada pero que no tenía influencia en los resultados la distribución de partículas que se utilizara para la simulación. Abriendo una nueva línea de investigación, Hunter (1987a, b) comparó la técnica lagrangiana empleada en los modelos de camino aleatorio con los métodos convencionales de diferencia finita (fundamentalmente eulerianos) y llegó a la conclusión de que los lagrangianos son más eficientes en la modelización tridimensional de la expansión de manchas de petróleo cuando se empleaban pocas partículas. A partir de este punto, también se introdujo la modelización de camino aleatorio en los modelos bidimensionales (en superficie),

Antecedentes

utilizando pequeñas manchas de petróleo -generalmente denominadas *spillets*- cuyas dimensiones vienen dadas por las leyes de expansión físico-químicas dadas por Fay (Venkatesh, 1988; Venkatesh et al. 1988).

Desde entonces, el uso de los modelos lagrangianos para este tipo de procesos de contaminación se ha generalizado hasta el punto de llegar a desaparecer en su práctica totalidad la modelización euleriana. La versatilidad de los modelos lagrangianos ha sido avalada por la última generación de modelos aplicados a los derrames de petróleo, que abordan la modelización de ciertos procesos físicos mediante la introducción de partículas o pequeñas manchas con dimensiones predefinidas. La modelización lagrangiana cuenta además con la ventaja de simular de una forma más natural y simple la dinámica de una mancha de petróleo. El transporte de petróleo se describe mediante la ecuación de difusión-advección y se debe fundamentalmente a corrientes, vientos y oleaje. La aproximación lagrangiana distingue dos tipos de implementación e inicialización del modelo: cuando se considera que el petróleo está formado por pequeñas manchas, de tamaño definido o variable con el tiempo dependiendo de una serie de condicionantes, y cuando se considera que el petróleo está formado por un conjunto de partículas, sin que tengan el carácter de manchas. Esta última aproximación es la que menos se utiliza, aunque, como se verá, ha resultado ser determinante para la modelización mediante el camino aleatorio.

A pesar de haberse impuesto el avance en esta forma de modelización, hay pocos modelos en los que los procesos de advección, difusión turbulenta, dispersión mecánica y sedimentación se simule utilizando exclusivamente el camino aleatorio. La mayoría de los que lo utilizan, lo hacen exclusivamente para representar la difusión turbulenta en todas o alguna dirección, mientras que otros incluyen también la dispersión mecánica por oleaje rompiente. Como consecuencia de estos fenómenos, el resultado final es la formación de partículas que se introducen en la columna, simulando el transporte subsuperficial del petróleo por medio del camino aleatorio, dada la sencillez de aplicación. Elliot et al. (1986) emplearon un modelo tridimensional

como el descrito para representar la cizalla en la corriente, pero no se incluyó la dispersión por oleaje rompiente ni se abordó el estudio del efecto de la influencia de la distribución empleada en la modelización. Llegaron a la conclusión de que abordar la modelización tridimensional de estos procesos mediante el uso de partículas no es físicamente realista. En base a este resultado, Al-Rabeh et al. (1989) realizaron la simulación tridimensional considerando manchas de petróleo como las dadas por Fay, pero modificadas según los resultados publicados por Lehr et al. (1984). En este modelo se incluye la modelización de la dispersión mecánica según la propuesta de Mackay et al. (1980). Se basa en que cuando un elemento lagrangiano tiene una probabilidad determinada de dispersarse en la columna de agua, se pierde en la columna, sin más consideraciones acerca de posibles expansiones en superficie o fenómenos tales como la evaporación.

De lo anteriormente expuesto se puede deducir que no existe ningún modelo completo que tenga en cuenta los diferentes aspectos que intervienen en la simulación de la dispersión de una mancha de petróleo. Aún así, hay varios que constituyen los más avanzados hasta el momento y que destacan por alguna característica especial, como son los siguientes:

- Dentro de la modelización bidimensional destacan el modelo *AES*, presentado por el Atmospheric Environment Service, que utiliza la modelización de camino aleatorio en los procesos turbulentos, aunque no en los procesos advectivos (Venkatesh, 1988; Venkatesh et al., 1988). El modelo incluye advección, dispersión mecánica, evaporación y emulsificación. *OSSM*, de NOAA, representa el petróleo como un conjunto de partículas lagrangianas (Galt et al., 1991). Es bidimensional, integrado en profundidad. En ambos modelos sólo se obtiene la extensión de la mancha, ya que lo que se busca es la distribución de petróleo superficial.
- En los modelos tridimensionales, destacan *COZOIL* desarrollado por Reed et al. (1989). Es un modelo tridimensional que simula la evolución de la mancha a partir

Antecedentes

de partículas, aunque en sí emplea pequeñas manchas de petróleo de forma elíptica. Incluye una modelización de la costa con características que varían segmento a segmento. El modelo *WOSM* (Kolluru et al. 1993, 1994), tiene características similares a este último. Presenta la particularidad de modelizar la entrada de petróleo en columna como una función del tamaño de partícula según lo propuesto por Delvigne and Sweeney (1988). Además, en este modelo el transporte subsuperficial y dispersión se resuelve por camino aleatorio. El petróleo se representa por una serie de partículas independientes con su propio tamaño y masa, asignándolas una velocidad terminal en función del tamaño. Permite introducir al usuario el coeficiente de dispersión horizontal. Tanto el perfil vertical de velocidades como el coeficiente de dispersión vertical proceden de un modelo con simulación no lineal de la turbulencia.

- En cuanto a modelos no aplicados a la modelización en el mar o en el océano, aparece el modelo para ríos *ROSS2*: es un modelo bidimensional en dos capas, que incluyen columna de agua y superficie (Yapa y Shen, 1994). En este modelo se liberan pequeñas manchas de petróleo (spillets), empleando para ello un método lagrangiano. La difusión turbulenta horizontal se basa en la aplicación de la modelización por camino aleatorio. El modelo puede simular derrames de petróleo en condiciones de flujo no estacionario. Incluye advección, dispersión mecánica, evaporación, mezcla vertical y deposición en la costa.

Se puede hacer una breve síntesis de lo expuesto hasta el momento: en ninguno de los modelos anteriores se ha considerado ni estudiado la influencia del tamaño de las partículas en la advección, difusión, dispersión y procesos relacionados, excepto el trabajo de Elliot (1986) que no encontró ninguna relación apreciable entre el comportamiento de los modelos y las diferentes distribuciones de partículas empleadas en la modelización. Recordemos que el tratamiento de la masa liberada en los derrames se ha hecho básicamente según dos aproximaciones:

- Modelos lagrangianos con spilletts: son implementaciones sencillas, pues lo que hacen es básicamente liberar manchas elípticas en columna y tratar a cada una de ellas como partículas.
- Modelos lagrangianos bi y tridimensionales con partículas. Cuando se emplea la liberación de partículas para representar la mancha, lo único se conoce es su número, pero ni su tamaño ni su distribución.

De la consideración anterior surge una pregunta: ¿cómo deben ser esas partículas?. En el caso de spilletts se pueden liberar un número prefijado de manchas con forma circular o elíptica y unas dimensiones que vienen dadas o bien por la expansión de Fay (1969) o bien según los resultados de Johansen (1985) . Pero el problema de la liberación de partículas no es tan simple. Si la influencia de los procesos verticales es pequeña el tamaño y la distribución de las partículas no tendrá ninguna relevancia, pero en caso de no ser así, los procesos de expansión y dispersión de la mancha estarán influenciados por los tamaños utilizados y sus distribuciones, con lo cual la validez del modelo va a depender fuertemente de estas características.

En ningún modelo que utilice camino aleatorio se ha analizado la dependencia de los resultados respecto al tamaño y la distribución de las partículas y si esta diferencia es importante a la hora de introducir otros procesos como son la cantidad de petróleo en columna, en sedimentos, etc. A este respecto baste recordar que la única mención acerca de la influencia de las diferentes distribuciones de partículas empleadas para representar la mancha es el debido a Elliot (1986). Las conclusiones que presentó mostraron que, aunque había una dependencia del tamaño, no variaban apreciablemente los resultados obtenidos. Sin embargo, en este trabajo se mostrará que existe una clara dependencia de los resultados respecto a la distribución de partículas utilizada y más concretamente, la dependencia que existe entre la relación de tamaños utilizados y la distribución empleada con la difusión turbulenta vertical. Paralelamente, hay procesos físicos relacionados con la modelización de la expansión

Antecedentes

de las manchas de petróleo que tampoco se ha analizado su dependencia en función del tamaño y distribución de las partículas.

1.3 Objetivos

Por todo ello, el objetivo de este trabajo es el estudio de los procesos físicos que afectan al transporte o movimiento del petróleo en el mar mediante su modelización tridimensional por medio del camino aleatorio. Se pretende clarificar las ventajas e inconvenientes en la aplicación de tal método, así como los aspectos físicos relacionados con su implementación. Para ello, se proponen los siguientes objetivos:

- (1) Analizar la sensibilidad de una modelización lagrangiana mediante camino aleatorio para la simulación del petróleo subsuperficial debido a la dispersión turbulenta, fijando las condiciones de contorno apropiadas.
- (2) Estudiar la dependencia de la expansión horizontal de una mancha de petróleo debido a la dispersión turbulenta con respecto al tamaño y distribución de partículas empleada.
- (3) Aplicar los resultados obtenidos a la modelización tridimensional de un derrame reciente: el del carguero *North Cape*, contrastando los resultados con los valores medidos *in situ*.

1.4 Organización del estudio

Para desarrollar los objetivos propuestos, se ha estructurado la memoria de la siguiente forma:

En el primer capítulo se expone la motivación del problema a tratar y la evolución de la modelización de las manchas de petróleo mediante modelos lagrangianos que aplican la metodología de camino aleatorio desde su inicio hasta la actualidad.

En el capítulo segundo se desarrolla la teoría acerca del transporte de un soluto en general y su modelización utilizando el método del camino aleatorio. Además, se va a exponer la implementación de aspectos generales en este tipo de modelización, como son la elección del intervalo temporal a utilizar y las condiciones de contorno.

En el tercer capítulo se aplica la ecuación de difusión-advección implementada mediante el método mencionado al transporte de petróleo en el mar, por lo que se incluirá en dicha ecuación los términos relacionados con su flotabilidad. Se describirán todas las condiciones particulares del modelo, al ser el petróleo una partícula con flotabilidad positiva.

En el capítulo cuarto se aplicará el modelo planteado en el capítulo anterior en tres etapas. La primera corresponde a una aplicación unidimensional, en donde se estudiará la forma de introducir la dispersión por oleaje rompiente sobre la mancha y la dependencia del mismo respecto a las diferentes distribuciones que se han utilizado para representar el petróleo. La segunda aplicación analizará la dispersión turbulenta por gradiente de velocidad para partículas de petróleo. Se trata de un estudio generalizado y que llevará a conclusiones acerca de dicho proceso físico y su importancia a la hora de modelizar una mancha de petróleo. La tercera aplicación tratará de aspectos generales acerca de la implementación del transporte de una mancha en tres dimensiones, para llegar finalmente a la validación del modelo mediante su comparación con los datos obtenidos de un derrame real de petróleo acontecido en las costas de Rhode Island.

Finalmente, el capítulo quinto recopila las conclusiones obtenidas en este trabajo

Modelización de un derrame de petróleo

y propone futuras líneas de investigación abiertas en el campo de la modelización de procesos de difusión-advección aplicados a las manchas de petróleo.

Capítulo 2. Fundamento teórico

2.1 Introducción

El transporte y difusión de sustancias debido al movimiento turbulento del medio es, por sus características, de primordial importancia en los océanos. El transporte, así como la variación en la concentración de una sustancia que se ha liberado en un punto cualquiera, va a depender no sólo de la difusión propiamente, sino de un gran número de factores. Entre éstos podrían citarse a los químicos, biológicos, físicos y mecánicos. Este último, el transporte mecánico, se puede descomponer en suma de dos procesos: el transporte debido al valor medio del flujo en la zona considerada, denominado *advección* y el transporte causado por la presencia de fluctuaciones aleatorias de carácter caótico en el campo de velocidades, denominado *difusión*.

La modelización del transporte mecánico de una sustancia en el océano presenta además dificultades añadidas, ya que exigiría conocer con precisión previamente un gran número de factores que controlan estos procesos. Por ejemplo, se necesitaría conocer con la máxima exactitud posible y para el mayor número de puntos el campo de velocidades en la zona a modelizar. Aquí surge el problema de la adecuada elección de la escala temporal que se va a utilizar, ya que un valor demasiado alto en el paso temporal filtrará los procesos turbulentos al ser éstos de menor duración que los procesos oceánicos de gran escala. Otra dificultad añadida es la adecuada parametrización de los procesos turbulentos, puesto que dependen del estado dinámico

del océano.

En conclusión, el progreso en la modelización de los fenómenos de transporte advectivo y difusivo pasa necesariamente por estudiar y parametrizar adecuadamente todos estos aspectos. En este capítulo pues, se van a presentar las expresiones y modelizaciones que se han propuestos para describir estos procesos, así como las diferentes parametrizaciones que se han presentado para dar cuenta de los fenómenos turbulentos y la forma de resolver estas ecuaciones mediante la modelización de camino aleatorio. Estos contenidos se van a desarrollar a continuación.

2.2 Ecuación de Difusión-Advección

Como ya se ha mencionado, los procesos responsables para el transporte neto de una sustancia disuelta o en suspensión en un fluido turbulento, son advección y difusión. Advección determina el transporte de soluto disuelto o suspendido multiplicado por la velocidad promediada espacial o temporalmente. La difusión da cuenta del transporte en una dirección dada debido a la diferencia entre la verdadera convección y el promedio temporal en dicha dirección, esto es, resultante de las fluctuaciones locales de la velocidad.

Para desarrollar estos conceptos, consideremos un medio tal que la densidad permanece invariable. La ecuación que describe el transporte de una sustancia con flotabilidad neutra en un flujo de estas características viene dada por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{v} c) + D \nabla^2 c \quad (1)$$

donde las variables se definen como:

$\mathbf{v}(\mathbf{X}, t)$: velocidad del fluido

$c(\mathbf{X}, t)$: concentración promediada del soluto

D : coeficiente de difusión molecular

En lo sucesivo, se va a emplear el sistema de coordenadas ortogonales $\mathbf{X} = (x, y, z)$.

En la ecuación 2.1, el primer término del miembro de la derecha da cuenta de la advección de contaminante debido al flujo, mientras que el segundo representa el transporte por difusión molecular de la sustancia. Debido a que el movimiento es turbulento, el campo de velocidades y concentraciones del soluto sufre fluctuaciones caóticas. Haciendo uso de la teoría de Reynolds se puede escribir tanto la velocidad como la concentración como suma de sus valores medios y fluctuaciones, quedando por tanto:

$$u = u' + \bar{u}$$

$$v = v' + \bar{v}$$

$$w = w' + \bar{w}$$

$$c = c' + \bar{c}$$

Sustituyendo estas parametrizaciones para las componentes de la velocidad y la concentración y teniendo en cuenta las siguientes relaciones aplicadas al promedio de una magnitud η :

$$\overline{\bar{\eta}} = \bar{\eta}$$

$$\overline{\eta'} = 0$$

o al promedio de dos magnitudes η, ζ :

$$\overline{\bar{\eta}\bar{\zeta}} \neq 0$$

$$\overline{\eta'\zeta'} \neq 0$$

$$\overline{\bar{\eta}\zeta'} = 0$$

se encuentra la siguiente expresión para la ecuación de difusión-advección:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = D \nabla^2 \bar{c} - \frac{\partial}{\partial x} \overline{u'c'} - \frac{\partial}{\partial y} \overline{v'c'} - \frac{\partial}{\partial z} \overline{w'c'} \quad (2)$$

Ecuación de Difusión-Advección

Los últimos tres términos del segundo miembro dan cuenta de la naturaleza turbulenta del flujo. Describen la contribución a la variación en la concentración de contaminante debido al transporte inducido por las fluctuaciones de las velocidades.

A diferencia de la ecuación de difusión molecular, esta ecuación no se puede resolver todavía ya que los flujos turbulentos $\overline{(u'c')}$, $\overline{(v'c')}$ y $\overline{(w'c')}$ no se conocen. Para poder hallar su solución, se necesita expresar estas incógnitas a través de la función \bar{c} que estamos buscando. Es natural asumir (por analogía con la expresión para un flujo de contaminantes en el caso de difusión molecular pura) que los flujos turbulentos serán proporcionales a los gradientes medios de concentración del contaminante (Ozmidov, 1990). Las hipótesis de proporcionalidad entre los flujos turbulentos del contaminante y el gradiente de la concentración promedio se puede expresar como

$$\overline{u'_i c'} = -K_{ij} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j}$$

donde u'_i es cualquier componente de la velocidad fluctuante ($i = 1, 2, 3$), c' la correspondiente fluctuación de la concentración ; x_j es cualquiera de las coordenadas cartesianas ($j = 1, 2, 3$) y K_{ij} es un tensor de segundo orden denominado *tensor de los coeficientes de difusión turbulenta*. Ya que el valor de K_{ij} no es constante (a diferencia del coeficiente de difusión molecular), se expresará en general como una función de coordenadas y tiempo.

Sustituyendo la expresión anterior en la ecuación de difusión-advección, obtenemos:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = D \nabla^2 \bar{c} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \right) \quad (3)$$

En la mayoría de los casos, el transporte turbulento de los contaminantes en el océano, será mucho mayor que el molecular (Ozmidov, 1990). Esta es la razón por la que, haciendo un análisis de escala, los términos de difusión molecular se despreciarán en

la ecuación de advección-difusión quedando la ecuación de la forma

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ij} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_j} \right) \quad (4)$$

o en forma compacta,

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\bar{\nabla} \nabla \bar{c} + \nabla (K \nabla \bar{c})$$

que si el fluido es incompresible (se tomará la densidad constante), se puede reescribir finalmente como:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\nabla(\bar{\nabla} \bar{c}) + \nabla(K \nabla \bar{c}) \quad (5)$$

Para continuar el desarrollo, escribamos el tensor K_{ij} como:

$$K = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{13} \\ K_{21} & K_{22} & K_{23} \\ K_{31} & K_{32} & K_{33} \end{bmatrix}$$

Se necesita simplificar las componentes de este tensor para poder resolver la ecuación de difusión-advección. De entrada, una suposición razonable es pensar que este tensor va a ser simétrico, luego $K_{ij} = K_{ji}$. Aun así, se ha pasado de tener nueve términos a tener seis. Si se supone que la turbulencia es isotrópica, todos los términos excepto los de la diagonal se pueden anular. Los flujos turbulentos se pueden escribir en este caso como

$$\begin{aligned} \overline{u'c'} &= -K_X \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \\ \overline{v'c'} &= -K_Y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \\ \overline{w'c'} &= -K_Z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \end{aligned}$$

Ecuación de Difusión-Advección

y la ecuación de difusión advección queda de la forma:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_X \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_Y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_Z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (6)$$

con lo cual podemos expresar esta expresión simplificada de 2.1 como:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} \right) \quad (7)$$

Otra posibilidad para simplificar más el tensor es asumir que para el océano, este tensor es simétrico respecto a la coordenada vertical. Para ello basta con tener en cuenta que el eje vertical es la dirección determinante para la variación de los principales parámetros en el océano. Si a esto añadimos que, para procesos a gran escala, no hay prácticamente diferencia entre las dos direcciones que determinan el plano, tendremos que $K_{11} = K_{22} = K_L$, $K_{33} = K_z$ y $K_{ij} = K_{ji} = 0$ si $i \neq j$. Un tensor de tales características se puede expresar como (Ozmidov, 1990):

$$K_{ij} = K_L \delta_{ij} + (K_z - K_L) e_i e_j \quad (8)$$

donde los valores de K_L (coeficiente horizontal de difusión turbulenta) y K_z (coeficiente vertical de difusión turbulenta) son valores escalares; δ_{ij} es la Delta de Kronecker, que se referenciará indistintamente como δ_{ij} o \mathbb{I} y e_i , e_j son las componentes del vector unitario que da lugar al eje de simetría, generalmente definido a partir de las componentes del vector velocidad y su módulo. Para estos coeficientes, se cumple que $K_X \simeq K_Y \simeq K_L$, y $K_Z \ll K_L$ (Ozmidov, 1990). Los flujos turbulentos, se pueden reescribir en este caso como:

$$\begin{aligned} \overline{u'c'} &= -K_L \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \\ \overline{v'c'} &= -K_L \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \\ \overline{w'c'} &= -K_Z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \end{aligned}$$

y la ecuación de difusión advección con coeficientes de difusión turbulenta constantes queda de la forma:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} = K_L \left(\frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial y^2} \right) + K_Z \left(\frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial z^2} \right)$$

Se puede a su vez reescribir en función de coeficientes de difusión variables de forma análoga a 2.6 quedando finalmente la expresión:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} = -\bar{u}_i \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_L \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_L \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_Z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (9)$$

Una vez planteadas las formas más usuales de la ecuación de difusión-advección de una partícula con flotabilidad neutra, se necesita incluir las condiciones de contorno sobre las superficies que rodean el dominio en el que se trabaja y sus correspondientes condiciones iniciales, que se pueden escribir como:

$$\begin{aligned} c(X, t) &= c_o(X, t) \text{ para } t = 0 \text{ en } \Omega \\ c(X, t) &= \bar{c}(X, t) \text{ para } t > 0 \text{ en } \Gamma_1 \\ c(X, t) &= \bar{q}_n(X, t) \text{ para } t > 0 \text{ en } \Gamma_2 \end{aligned}$$

donde c_o se refiere a la función de concentración del soluto en el instante inicial y que se define en el interior del dominio o zona de estudio (Ω); las otras dos condiciones de contorno se refieren al comportamiento de la función de concentración en los contornos del dominio (Γ_1) y que viene dada por la concentración media en la frontera y con el flujo medio en el exterior de la zona de estudio (Γ_2). Véase al respecto la Figura(2.3).

Una vez definidos los valores en los contornos, se necesitará obtener el campo de los componentes medios de la velocidad $\bar{u}(x, y, z, t)$, $\bar{v}(x, y, z, t)$ y $\bar{w}(x, y, z, t)$. Estos componentes son, generalmente, funciones de coordenadas y tiempo. Finalmente habrá que hacer hipótesis para las formas funcionales y valores de los coeficientes de transporte turbulento K_L y K_Z .

A partir del cálculo directo de estos parámetros en el océano, se encontró que

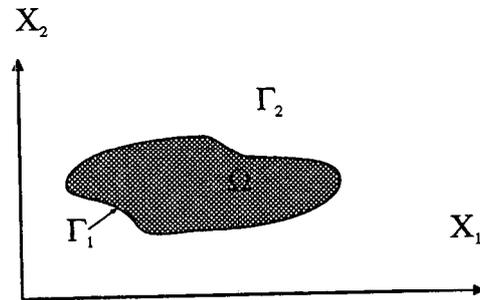


Figura 2.3. Definición del problema de contorno. El sistema que se modeliza aparece sombreado en gris.

la relación entre los coeficientes de transporte horizontales y verticales podía ser del orden de 10^6 (Okubo, 1971). Cuando se trató de explicar esta diferencia, se propuso que las fluctuaciones del contaminante eran el producto de variaciones en la concentración media multiplicadas por un factor que tenía las dimensiones de una longitud. Esta explicación concuerda muy bien con la *Teoría de la Longitud de Mezcla* de Prandtl. Asumiendo esta interpretación, y retomando la independencia entre los coeficientes de difusión horizontales, podemos derivar las siguientes expresiones para el flujo turbulento de contaminantes:

$$\begin{aligned} \overline{ul_x} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} &= -K_X \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \\ \overline{vl_y} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} &= -K_Y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \\ \overline{wl_z} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} &= -K_Z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \end{aligned}$$

De la expresión anterior se deduce fácilmente que (l_x, l_y, l_z) son las proyecciones en los respectivos ejes de la longitud de mezcla. Por tanto, una forma general de

expresar los coeficientes de difusividad será la forma:

$$K_X = l_x \tilde{u}$$

$$K_Y = l_y \tilde{v}$$

$$K_Z = l_z \tilde{w}$$

Los valores $(\tilde{\quad})$ son la raíz cuadrada media de la correspondiente fluctuación de la velocidad, aproximación en la que se basan generalmente los trabajos (Christodolou et al., 1976; Baptista et al., 1984; Youssef, 1993). Esta es la expresión general de los coeficientes de difusión. Sin embargo, la modelización - basándose en las propiedades encontradas para el océano - no hace distinción entre los coeficientes que determinan la difusión en la horizontal, de forma que se va a considerar un mismo coeficiente de difusión para la horizontal, denominado K_L y un coeficiente distinto de difusión en la vertical, que se denominará K_Z . Esto lleva aparejado el definir una componente horizontal de la velocidad, que se denominará v_L y se mantendrá la misma expresión para la componente vertical de la velocidad, w . Introduciendo esta notación, los parámetros anteriores se pueden expresar mediante

$$K_L = l_L \tilde{v}_L$$

$$K_Z = l_z \tilde{w}$$

y en estas condiciones, el tensor de difusión se puede determinar en función de la velocidad y la longitud de mezcla de la forma siguiente:

$$K_{ij} = (l_L \tilde{v}_L) \delta_{ij} + (l_z \tilde{w} - l_L \tilde{v}_L) v_i v_j / V^2 \quad (10)$$

siendo v_i, v_j las componentes del vector velocidad y V^2 su módulo. La forma en la que se implementa el cálculo de cada uno de estos parámetros en la práctica se explicará con detalle en un capítulo posterior.

2.3 Método del camino aleatorio

La modelización del transporte de un soluto, y del petróleo en particular, se puede abordar utilizando diferentes aproximaciones numéricas que se pueden englobar en alguna de las siguientes categorías:

- Método eulerianos
- Métodos lagrangianos
- Métodos eulerianos-lagrangianos

Los métodos eulerianos resuelven la forma euleriana de la ecuación de transporte de un soluto en los nodos de una malla de dimensiones fijas. En consecuencia, se requiere la solución simultánea de operadores hiperbólicos (por ejemplo, $u \frac{\partial c}{\partial x}$) y parabólicos (por ejemplo $K_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$), que se ha demostrado como tarea complicada cuando los primeros dominan sobre los últimos (Baptista et al., 1984).

Los métodos lagrangianos evitan el tratamiento explícito de los operadores hiperbólicos resolviendo la ecuación del transporte en una malla que se mueve con el flujo. Aunque es potencialmente un método muy preciso, esta aproximación da lugar, en diversas situaciones importantes (por ejemplo en fuentes continuas y flujos complejos de retorno) a dificultades prácticas, unidas al desplazamiento de la malla y su deformación.

Los métodos eulerianos-lagrangianos constituyen una aproximación intermedia. La conveniencia de una malla fija se mantiene, pero la ecuación de transporte se trata de una forma lagrangiana, evitando el tratamiento explícito de los operadores hiperbólicos. Lo que se consigue con estos métodos combinados es que se separa la ecuación de transporte de un soluto en dos componentes (pura difusión y pura advección), cada uno de ellos se resuelve por una técnica apropiada. Aquellos modelos en los que se utiliza la aproximación del camino aleatorio para resolver ambas componentes son denominados en las publicaciones internacionales como *modelos de Random Walk*.

Este tipo de modelo es el que se ha empleado para resolver la ecuación de difusión-advección. En este capítulo se describe la modelización del transporte de un soluto utilizando el método del Camino Aleatorio. Una vez que se haya introducido conceptualmente, se mostrará la equivalencia entre la ecuación de advección-difusión, que gobierna el transporte de masa en un campo de flujo, y un modelo de camino aleatorio. Para ampliar mas todos estos conceptos se puede consultar por ejemplo Srinivasan (1971) y Gardiner (1985).

2.3.1 Aspectos conceptuales y origen del camino aleatorio

La base teórica del modelo del camino aleatorio tiene su origen en la mecánica estadística que data de principios de este siglo. El primer estudio viene de la explicación dada por Einstein sobre el movimiento browniano (ver, por ejemplo, Van Kampen (1981)). Gran parte de este trabajo dió lugar a lo que hoy en día se conoce como teoría de las ecuaciones diferenciales estocásticas. Esta teoría tiene cada vez más aplicaciones en cualquier campo de investigación, desde mecánica cuántica y química (Gardiner, 1985) hasta el que se trata en este estudio: transporte de solutos (Ahlstrom, 1975; Kinzelbach, 1988; Uffink 1987, 1988). A continuación se desarrollarán los fundamentos matemáticos del modelo de camino aleatorio.

Consideremos un sistema descrito por una variable de estado $\mathbf{X}(t)$ que evoluciona probabilísticamente con el tiempo. En el caso que se estudia, \mathbf{X} representará la posición en un espacio tridimensional de una partícula. La evolución de la variable \mathbf{X} con el tiempo (es decir, el movimiento de la partícula) está gobernado por un conjunto de fuerzas determinísticas, macroscópicas, y un conjunto de fuerzas aleatorias cuyo promedio temporal es cero. Un sistema descrito de esta forma se puede clasificar como un proceso estocástico. Esta clase de movimiento se puede describir mediante una ecuación de la forma

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = A(\mathbf{X}, t) + \mathbb{B}(\mathbf{X}, t) \cdot \xi(t) \quad (11)$$

que se conoce como *ecuación no lineal de Langevin* (Gardiner, 1985). El vector $A(\mathbf{X}, t)$ es una función conocida del espacio y tiempo que se emplea para representar las fuerzas determinísticas que actúan variando la posición \mathbf{X} de la partícula. El tensor de segundo orden $\mathbb{B}(\mathbf{X}, t)$ es también una función conocida de espacio y tiempo que caracteriza las fuerzas aleatorias. El vector $\xi(t)$ representa la variación de las fuerzas aleatorias. Este vector satisface las siguientes condiciones:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0 \quad (12)$$

$$\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \mathbb{I} \delta(t - t') \quad (13)$$

donde el símbolo $\langle \rangle$ representa el valor esperado o expectación. La ecuación 2.13 significa que para dos tiempos diferentes, $t \neq t'$, $\xi(t)$ y $\xi(t')$ son estadísticamente independientes.

Es necesario integrar la ecuación 2.11 pues, dado que $\xi(t)$ varía entre $-\infty$ y $+\infty$, este modelo todavía no tiene significado real. Integrando pues, se obtiene la siguiente ecuación:

$$\mathbf{X}(t) - \mathbf{X}(0) = \int_0^t \mathbf{A}(\mathbf{X}(s), s) ds + \int_0^t \mathbb{B}(\mathbf{X}(s), s) \xi(s) ds \quad (14)$$

En la expresión anterior se puede identificar una función conocida en la segunda integral del segundo miembro. La función

$$\mathbf{W}(t) = \int_0^t \xi(s) ds \quad (15)$$

representa el llamado proceso Wiener. Una característica importante de este proceso es que no se puede diferenciar, pues debido a la naturaleza aleatoria de $\xi(t)$, los incrementos $d\mathbf{W}(t) = \mathbf{W}(t + dt) - \mathbf{W}(t) = \xi(t) dt$ dan lugar a variaciones bruscas sobre pequeños intervalos dt . El *Apéndice A* de la memoria contiene una descripción

del proceso Wiener y sus principales propiedades y características. Se puede escribir la forma diferencial de la ecuación 2.14 sobre el intervalo dt de la siguiente manera:

$$\mathbf{X}(t + dt) - \mathbf{X}(t) = \mathbf{A}(\mathbf{X}(t), t) dt + \int_t^{t+dt} \mathbb{B}(\mathbf{X}(s), s) \xi(s) ds \quad (16)$$

donde $\mathbf{A} dt$ es el resultado de la integración de la función \mathbf{A} . No se puede hacer lo mismo con la integral del segundo término, debido a los rápidos cambios de $\xi(t)$ durante el intervalo temporal dt como ya se ha mencionado en el párrafo anterior. Es necesario imponer ciertas condiciones para poder evaluar $\mathbb{B}(\mathbf{X}(t), t)$; para ello se aplica la hipótesis de Íto (Gardiner, 1985), que calcula la integral evaluando \mathbb{B} explícitamente en el tiempo t y se aplica la condición expuesta en (2.15), de tal forma que la integral se puede aproximar a

$$\mathbb{B}(\mathbf{X}(t), t) \int_t^{t+dt} \xi(s) ds \equiv \mathbb{B} d\mathbf{W} \quad (17)$$

en donde \mathbb{B} y $d\mathbf{W}$ no están correlacionados.

Adoptando la interpretación de Íto, la variación diferencial de \mathbf{X} en dt se puede escribir como la ecuación diferencial estocástica:

$$d\mathbf{X} = \mathbf{A}(\mathbf{X}(t), t) dt + \mathbb{B}(\mathbf{X}(t), t) d\mathbf{W}(t) \quad (18)$$

donde el término $\mathbf{A} dt$ nos da el desplazamiento determinístico. El desplazamiento aleatorio viene dado por $\mathbb{B} d\mathbf{W}$. El tensor $\mathbb{B}(\mathbf{X}(t), t)$ es una matriz cuadrada cuyos coeficientes indican el grado o magnitud de la variación aleatoria de \mathbf{X} a lo largo del espacio. Aunque es una función del estado aleatorio de \mathbf{X} , su forma funcional es determinística. Los incrementos del aleatorio Wiener se demuestran que tienen de media cero:

$$\langle d\mathbf{W} \rangle = 0 \quad (19)$$

y su media cuadrática es proporcional a dt :

$$\langle d\mathbf{W} d\mathbf{W} \rangle = \mathbb{I} dt \quad (20)$$

Debe recordarse en este punto que se ha asumido en 2.20 que las fluctuaciones microscópicas se manifiestan como $d\mathbf{W}(t)$ sobre una escala temporal macroscópica, y que se dan a escalas temporales mucho menores ($\ll dt$) que $d\mathbf{W}(t)$, por lo que no están correlacionadas en el tiempo. Nótese entonces que $d\mathbf{W}(t)$ es aproximadamente $O(dt^{1/2})$. La interpretación anterior de Íto esencialmente significa que los diferentes $\mathbf{X}(t)$ que se usan para calcular $\mathbb{B}(\mathbf{X}(t))$ en 2.20 son tal que $\mathbb{B}(\mathbf{X}(t), t)$ y $d\mathbf{W}(t)$ no están correlacionados. En forma discretizada, esto significa que $\mathbf{X}(t_{n-1})$ es independiente de $\Delta\mathbf{W}(t_n) = \mathbf{W}(t_n) - \mathbf{W}(t_{n-1})$ de manera que

$$\langle \mathbb{B}(\mathbf{X}(t), t) d\mathbf{W}(t) \rangle = \langle \mathbb{B}(\mathbf{X}(t), t) \rangle \langle d\mathbf{W}(t) \rangle = 0 \quad (21)$$

Consecuentemente, el cambio medio de \mathbf{X} (por ejemplo, el desplazamiento medio de la partícula) usando la hipótesis de Íto es solo debido a la fuerza

$$d\langle \mathbf{X}(t) \rangle = \langle \mathbf{A}(\mathbf{X}(t), t) \rangle dt = \mathbf{A}(\mathbf{X}(t), t) dt \quad (22)$$

Para continuar con el desarrollo, considérese ahora la probabilidad de encontrar el estado del sistema entre \mathbf{X} y $\mathbf{X} + d\mathbf{X}$ en el tiempo t dando su estado inicial \mathbf{X}_0 en el tiempo t_0 , o mejor dicho, la correspondiente función de densidad $f(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}_0, t_0)$. Se necesita encontrar una ecuación para esta función basada en la ecuación 2.18. Para ello, se considera primero una función arbitraria $u(\mathbf{X})$ de la variable de estado \mathbf{X} que no depende explícitamente del tiempo. Se puede obtener una ecuación diferencial estocástica para u haciendo un cambio de variables. La diferencial du la podemos aproximar por medio de un desarrollo de Taylor:

$$du \approx \frac{\partial u}{\partial X_i} dX_i + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial X_i \partial X_j} dX_i dX_j \quad i, j = 1, 2, 3, \dots \quad (23)$$

Teniendo en cuenta el valor de dX dado por la ecuación 2.18:

$$\begin{aligned}
 du &= \frac{\partial u}{\partial X_i} [A_i(\mathbf{X}, t) dt + B_{ik}(\mathbf{X}, t) d\mathbf{W}_k(t)] + \\
 &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial X_i \partial X_j} [B_{ik}(\mathbf{X}, t) B_{jm}(\mathbf{X}, t) d\mathbf{W}_k(t) d\mathbf{W}_m(t) + \\
 &O(dt d\mathbf{W}, dt^2)] \tag{2.24}
 \end{aligned}$$

El último término de la ecuación 2.24 se puede despreciar debido a la naturaleza diferencial de la ecuación y a las propiedades del proceso Wiener que se está considerando a lo largo de este desarrollo (Gardiner, 1985).

Asumiendo, que conocemos el sistema en una serie de tiempos $(t_0, t_1, t_2, \dots, t_n)$ - donde t_n es el tiempo en el que estamos y t_0 es el tiempo inicial - las posiciones de las partículas se describen por la secuencia $(\mathbf{X}_0, \mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_n)$. La probabilidad de encontrar esta secuencia partiendo del estado inicial, se describe por la función de densidad de la probabilidad condicional conjunta:

$$P(\mathbf{X}_n, t_n; \mathbf{X}_{n-1}, t_{n-1}; \dots; \mathbf{X}_1, t_1 | \mathbf{X}_0, t_0)$$

La integración de P sobre el espacio por todas las posibles posiciones intermedias da lugar a la densidad condicional (marginal) de encontrar $\mathbf{X} = \mathbf{X}_n$ en $t = t_n$:

$$f(\mathbf{X}_n, t_n | \mathbf{X}_0, t_0) = \int \int \int \dots \int P d\mathbf{X}_1 d\mathbf{X}_2 d\mathbf{X}_3 \dots d\mathbf{X}_{n-1} \tag{25}$$

Con la hipótesis de que $d\mathbf{W}(t)$ no está correlacionada, el proceso diferencial definido por 2.18 es markoviano (Gardiner, 1985) y las integraciones en 2.25 se pueden simplificar. El valor esperado o media de $u(\mathbf{X}_n)$ en $t = t_n$ dada su posición inicial \mathbf{X}_0

en t_0 es, por definición:

$$\begin{aligned}\langle u(\mathbf{X}_n) \rangle &= \int_{\mathbf{X}_n} u(\mathbf{X}_n) \left[\int \int \int \cdots \int P d\mathbf{X}_1 d\mathbf{X}_2 d\mathbf{X}_3 \cdots d\mathbf{X}_{n-1} \right] d\mathbf{X}_n = \\ &= \int_{\mathbf{X}_n} u(\mathbf{X}_n) f(\mathbf{X}_n, t_n | \mathbf{X}_0, t_0) d\mathbf{X}_n\end{aligned}\quad (2.26)$$

La evolución temporal de $\langle u(\mathbf{X}_n) \rangle$ se describe por un promedio de 2.18. Esto se puede hacer multiplicando 2.18 por $f(\mathbf{X}_n, t_n | \mathbf{X}_0, t_0)$ e integrando el resultado sobre \mathbf{X}_n . Para aplicar con mayor claridad esta expresión, sustituiremos la notación de \mathbf{X}_n simplemente por \mathbf{X} y $f(\mathbf{X}_n, t_n | \mathbf{X}_0, t_0)$ por $f(\mathbf{X}, t)$.

Si el promedio y la evolución temporal del sistema en función de du se intercambian, aplicando 2.26 a 2.24:

$$\begin{aligned}d\langle u \rangle &= \left\langle \frac{\partial u}{\partial \mathbf{X}_i} A_i(\mathbf{X}, t) \right\rangle dt + \left\langle \frac{\partial u}{\partial \mathbf{X}_i} B_{ik}(\mathbf{X}, t) \right\rangle \langle dW_K \rangle + \\ &+ \frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial^2 u}{\partial \mathbf{X}_i \partial \mathbf{X}_j} B_{ij}(\mathbf{X}, t) B_{jm}(\mathbf{X}, t) \right\rangle \langle dW_k dW_m \rangle\end{aligned}\quad (2.27)$$

Tanto $B(\mathbf{X}(t), t)$ y $u(\mathbf{X}(t))$ se pueden considerar independientes de $d\mathbf{W}(t)$ y sus promedios se pueden separar como se ha hecho en 2.27. El segundo término de la derecha se anula teniendo en cuenta la ecuación 2.19, y los términos restantes que quedan en la derecha se integran por partes utilizando 2.20 y la hipótesis de que $u(\mathbf{X})$ tiende 0 a $\mathbf{X} = \pm\infty$. Así, el primer término del miembro derecho de la ecuación 2.26 se convierte en:

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{\partial u}{\partial \mathbf{X}_i} A_i(\mathbf{X}, t) \right\rangle dt &= \left[\int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial \mathbf{X}_i} A_i(\mathbf{X}, t) f(\mathbf{X}, t) d\mathbf{X} \right] dt = \\ &= \left[\int_{\Omega} -u(\mathbf{X}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}_i} [A_i(\mathbf{X}, t) f(\mathbf{X}, t)] d\mathbf{X} \right] dt\end{aligned}\quad (2.28)$$

mientras que el término de la izquierda en 2.17 se convierte en

$$d \left[\int_{\Omega} u(\mathbf{X}), f(\mathbf{X}, t) d\mathbf{X} \right]$$

De esta forma, se puede agrupar cada uno de los términos anteriores en 2.26 sacando factor común a $u(\mathbf{X})$, obteniéndose

$$\int_{\Omega} u(\mathbf{X}) \left[\frac{\partial f(\mathbf{X}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}_i} (A_i f(\mathbf{X}, t)) - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{X}_i \partial \mathbf{X}_j} \left(\frac{1}{2} B_{ik} B_{jk} f(\mathbf{X}, t) \right) \right] d\mathbf{X} = 0 \quad (29)$$

Ya que $u(\mathbf{X})$ es arbitrario, para que la integral anterior se anule los términos entre los corchetes tienen que ser cero, esto es

$$\frac{\partial f(\mathbf{X}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}_i} (A_i f(\mathbf{X}, t)) - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{X}_i \partial \mathbf{X}_j} \left(\frac{1}{2} B_{ik} B_{jk} f(\mathbf{X}, t) \right) = 0 \quad (30)$$

Esta es la ecuación de equilibrio o de conservación para la conservación de la densidad de probabilidad $f(\mathbf{X}, t)$ o *ecuación de Fokker-Planck*. En consecuencia, se ha demostrado cómo partiendo del movimiento de una partícula descrito por la ecuación de Langevin (2.11), si este movimiento cumple las condiciones de un proceso Wiener y el proceso es markoviano, el movimiento de la partícula verifica la ecuación de Fokker-Planck.

2.3.2 Analogía con el transporte de soluto

La ecuación de Fokker-Planck (2.30) satisface la ley de conservación de masa aplicada a la difusión que tendrían unas partículas que se mueven de acuerdo a una ecuación tal como 2.18. De hecho, es formalmente idéntica a las ecuaciones del modelo físico usado para el transporte de soluto tal como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{v} c + \nabla \cdot [\mathbb{K} \cdot \nabla c] \quad (31)$$

De todo lo anterior se deduce que la ecuación 2.18 se puede usar para seguir el movimiento de partículas de soluto. Por partícula se entenderá en lo sucesivo una cantidad infinitesimal de masa, sin dividir, que se puede identificar en un punto continuo \mathbf{X} y que se mueve debido a las distintas velocidades en el fluido. Tales

partículas no ocupan un volumen diferencial y por tanto, van a poder coexistir en puntos del espacio que estén infinitamente próximos.

Volviendo a la ecuación 2.18, se puede discretizar obteniéndose:

$$\Delta \mathbf{X}_n = \mathbf{X}_n - \mathbf{X}_{n-1} = A(\mathbf{X}_{n-1}, t_{n-1})\Delta t + \mathbb{B}(\mathbf{X}_{n-1}, t_{n-1})\Delta W(t_n) \quad (32)$$

donde A , \mathbb{B} y W han sido descritos en la sección previa.

Para mostrar cómo el modelo obtiene las distintas posiciones que van ocupando las partículas de soluto, se va a considerar que la posición de cualquier partícula en el tiempo t_n viene determinada por $\mathbf{X}(t_n) \equiv \mathbf{X}_n$. Para el instante inicial, se considerará primero el movimiento de una partícula que está en \mathbf{X}_0 para el tiempo t_0 . En cualquier instante de tiempo Δt , la partícula se moverá debido a la fuerza macroscópica A , la fluctuación independiente y aleatoria ΔW , y el tensor determinístico \mathbb{B} , relacionándose entre los tres mediante la ecuación anterior. Si la partícula se mueve a través del espacio hasta algún tiempo determinado o prefijado T , la partícula ocupará finalmente la posición (\mathbf{X}, T) . Cada paso pues se ha descompuesto en un desplazamiento determinístico $A\Delta t$ y un desplazamiento independiente, markoviano, $\mathbb{B}\Delta W$. Este proceso aparece reflejado en la Figura (2.4).

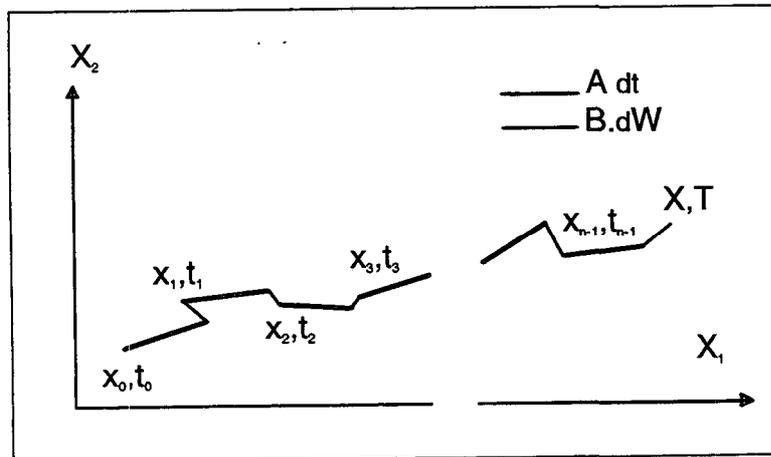


Figura 2.4. Movimiento de una partícula en diferentes pasos hasta la posición \mathbf{X}, T

Si se repite N veces el experimento utilizando la misma condición inicial, la fuerza macroscópica A y el tensor \mathbb{B} , después de cada experimento la partícula ocupará diferentes posiciones en T dependiendo del valor del proceso aleatorio, como se ve en la Figura (2.4). La densidad espacial de estos puntos vendrá dada por la función $f(\mathbf{X}, t)$ que ha de satisfacer la ecuación 2.30. Para determinar su valor, ha de ser calculada para $t = T$ y ha de satisfacer paralelamente dos condiciones de contorno: $f(\infty, t) = 0$, es decir, las partículas no se pueden extender por todo el espacio y además, se impone una condición inicial de fuente puntual, definida por $f(\mathbf{X}, t_0) = N \delta(\mathbf{X} - \mathbf{X}_0)$. Supongamos ahora que N partículas están localizadas en el mismo lugar \mathbf{X}_0 y tiempo t_0 y que cada una de ellas se mueve según 2.32 para cada intervalo temporal Δt en el mismo periodo de tiempo T . Estas partículas representan una cantidad fija de masa de soluto M , de manera que la masa de cada partícula se ha de distribuir dependiendo del número de partículas que se tenga. Con esta suposición, la distribución espacial de todas estas partículas será análoga a la del ejemplo anterior, excepto que se ha de interpretar que todas las partículas estarán al final de un único experimento en vez de considerarlas individualmente al final de muchos (Figura 2.5).

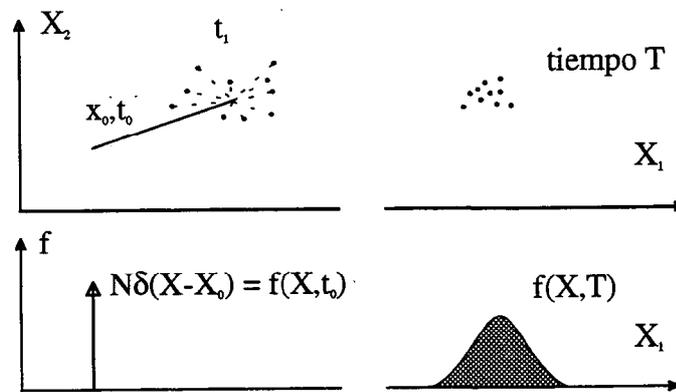


Figura 2.5. Simulación del movimiento de N partículas partiendo de X_0, t_0 hasta un tiempo final T . Se muestra así mismo la función de distribución de las partículas.

Además, el mismo experimento podría realizarse con N partículas distribuidas en

Analogía con el transporte de soluto

el espacio de acuerdo a cualquier otra distribución inicial $f(\mathbf{X}, t_0)$, siendo también la distribución resultante una solución de la ecuación 2.30 con la nueva condición inicial (Figura 2.6).

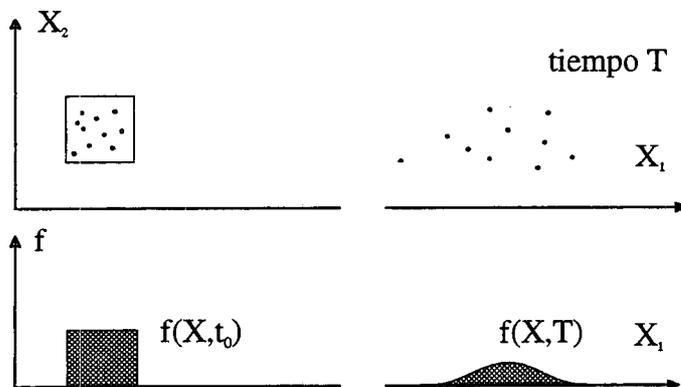


Figura 2.6. Movimiento de N partículas que se distribuyen inicialmente en el espacio según la función $f(\mathbf{X}, t_0)$

Una vez más, la conexión entre la función teórica $f(\mathbf{X}, t)$ y la distribución específica de N partículas estará aproximada y limitada por el número de partículas (o de experimentos individuales) y el intervalo temporal tomado Δt .

Del razonamiento anterior se deduce que dadas N partículas, el número de partículas esperado N_e localizado en un volumen pequeño (infinitesimal) V_s centrado en \mathbf{X} en el tiempo t , es, aproximadamente

$$N_e \approx N f(\mathbf{X}, t) V_s \quad (33)$$

Si cada partícula tiene una masa $m = M/N$, entonces la masa esperada en V_s es

$$M_e = m N_e = M \frac{N_e}{N} \quad (34)$$

Esta cantidad ha de ser igual a la masa total, M_t , que si se usa la aproximación de

tener una distribución continua y se hace uso de la concentración c , viene dada por:

$$M_t = c V_s \quad (35)$$

Igualando ambas masas, la esperada y la teórica, tenemos que

$$c = M f(\mathbf{X}, t) \quad (36)$$

Esta ecuación se emplea para desarrollar la analogía entre la ecuación de Fokker-Plank (2.30) y la ecuación de transporte de soluto 2.31. Teniendo en cuenta que la masa total de soluto M en el dominio en donde se desarrollan las ecuaciones, Ω , se asume que es constante, la ecuación 2.30 se puede multiplicar por $M = m N$ para expresar la ecuación de Fokker-Plank en términos de masa de soluto. Téngase en cuenta además que en la ecuación referida tenemos en el segundo miembro el producto de dos tensores que se puede expresar en función de su operador traspuesto $B_{ik} B_{jk} = \mathbb{B} \mathbb{B}^T$, de forma que se llega a la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \left[\mathbf{A} - \nabla \left(\frac{1}{2} \mathbb{B} \mathbb{B}^T \right) c \right] - \nabla \left[\frac{1}{2} \mathbb{B} \mathbb{B}^T \nabla c \right] = 0 \quad (37)$$

Para completar la analogía entre la ecuación de Fokker-Plank y la ecuación de transporte de masa es necesario elegir adecuadamente los términos $\mathbf{A}(\mathbf{X}, t)$, $\mathbb{B}(\mathbf{X}, t)$ y $\Delta \mathbf{W}(t)$. Es decir, se tiene que encontrar la forma correcta de \mathbf{A} , \mathbb{B} y $\Delta \mathbf{W}$ para la ecuación discretizada 2.32 de tal manera que si un gran número de partículas se mueven de acuerdo a dicha ecuación, la distribución de masa resultante será equivalente a la dada por la ecuación de transporte de soluto 2.31, que representa el modelo físico planteado en este estudio para diferentes casos de transporte de soluto diferenciados entre sí únicamente en la forma del transporte difusivo. Los casos que se plantean son los siguientes:

(1) *Difusión turbulenta constante:*

La ecuación de difusión advección para el caso de coeficientes de difusión con-

stantes toma la forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla (\mathbf{v} c) - K \nabla^2 c = 0 \quad (38)$$

Cuando el coeficiente de difusión turbulenta es constante, el tensor \mathbb{K} se puede escribir como $\mathbb{K} = K \mathbb{I}$, donde \mathbb{I} es el tensor unidad y K es una constante. Si la comparamos con la ecuación 2.37, se pueden establecer las siguientes relaciones entre los términos obtenidos por el método del camino aleatorio y los correspondientes a la anterior ecuación de difusión-advección:

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}_n, t_n) = \mathbf{A}(\mathbf{X}_n, t_n) \quad \text{fuerza macroscópica}$$

$$K \mathbb{I} = \frac{1}{2} \mathbb{B}(\mathbf{X}_n, t_n) \cdot \mathbb{B}^T(\mathbf{X}_n, t_n) = \frac{1}{2} B_{ik} B_{jk}$$

De la última se deduce que \mathbb{B} es un tensor constante dado por:

$$\mathbb{B} = \sqrt{2K} \mathbb{I} \quad \text{tensor para el desplazamiento aleatorio} \quad (39)$$

Para usar la ecuación paso de la forma 2.32 será suficiente usar las anteriores ecuaciones junto con el desplazamiento aleatorio normalizado proporcional a $\Delta t^{1/2}$:

$$\Delta \mathbf{W} = \mathbf{Z}_n \sqrt{\Delta t} \quad \text{desplazamiento aleatorio normalizado}$$

donde \mathbf{Z}_n es un vector de tres números aleatorios independientes en t_n ya que $\Delta \mathbf{W}$ es un vector. Estos deben elegirse a partir de una distribución tal que satisfaga las relaciones:

$$\langle \mathbf{Z} \rangle = 0 \quad (40)$$

$$\langle \mathbf{Z} \mathbf{Z} \rangle = \mathbb{I} \quad (41)$$

análogas a las que se impusieron en 2.19 y 2.20.

Al vector \mathbf{Z}_n sólo se le exige tener las características estadísticas dadas en 2.40 y 2.41, de tal forma que se pueden utilizar varias distribuciones. Lo más común es usar una distribución normal $N(0, 1)$ (Ahlstrom et al., 1977) o una distribución uniforme $U(\pm\sqrt{3})$ determinada en el rango $\pm\sqrt{3}$ (Tompson et al., 1990). De todo lo anterior se deduce que la ecuación de camino aleatorio para emular la solución de 2.38 es:

$$\mathbf{X}(t_n) = \mathbf{X}(t_{n-1}) + \mathbf{v}(\mathbf{X}_{n-1}, t_{n-1}) \Delta t + \mathbf{Z}_n \sqrt{2K\Delta t} \quad (42)$$

Difusión turbulenta variable

Cuando el problema es tal que los coeficientes de difusión turbulenta son variables, la ecuación de difusión-advención que se va a emular a través de 2.32 es:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla (\mathbf{v}c) - \nabla [K \nabla c] = 0 \quad (43)$$

La ecuación de Fokker-Plank será equivalente a esta ecuación si \mathbf{A} y \mathbb{B} se eligen de acuerdo a:

$$\mathbf{v}(\mathbf{X}_n, t_n) = \mathbf{A}(\mathbf{X}_n, t_n) - \nabla \left[\frac{1}{2} \mathbb{B}(\mathbf{X}_n, t_n) \cdot \mathbb{B}^T(\mathbf{X}_n, t_n) \right] \quad (44)$$

$$\mathbb{K}(\mathbf{X}_n, t_n) = \frac{1}{2} \mathbb{B}(\mathbf{X}_n, t_n) \cdot \mathbb{B}^T(\mathbf{X}_n, t_n) \quad (45)$$

En el *Apéndice B* se da el desarrollo para determinar las componentes del tensor \mathbb{B} , en relación a los coeficientes de difusión turbulenta del tensor \mathbb{K} en un medio isotrópico. Usando este resultado junto con 2.44 y el desplazamiento aleatorio 2.39 da lugar a la ecuación discretizada:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}(t_n) = & \mathbf{X}(t_{n-1}) + [\mathbf{v}(\mathbf{X}_{n-1}, t_{n-1}) \Delta t + \nabla \mathbb{K}(\mathbf{X}_{n-1}, t_{n-1})] \Delta t + \\ & + R_{ik} \sqrt{2\mathbb{K}^{*1/2}} \mathbf{Z}_{j,n} \sqrt{\Delta t} \end{aligned} \quad (2.46)$$

Analogía con el transporte de soluto

siendo las matrices $\sqrt{2\mathbb{K}^{*1/2}}$ y R_{ik} respectivamente:

$$\sqrt{2\mathbb{K}^{*1/2}} = \begin{bmatrix} \sqrt{2l_L\tilde{v}_L} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2l_L\tilde{v}_L} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2l_z\tilde{w}} \end{bmatrix}$$

y

$$R_{ik} = \begin{bmatrix} v_1/V & -v_2/\beta & -(v_2^2 + v_3^2 + v_1v_3)/\beta V \\ v_2/V & (v_1 + v_3)/\beta & [v_2(v_1 - v_3)]/\beta V \\ v_3/V & -v_2/\beta & (v_1^2 + v_2^2 + v_1v_3)/\beta V \end{bmatrix}$$

donde

$$\beta = \sqrt{V^2 + 2v_1v_3 + v_2^2} > 0 \text{ para } V > 0$$

y $Z_{j,n}$ tiene la misma definición que en el apartado anterior. El uso de esta ecuación para mover las partículas dará lugar a una distribución de masa de soluto equivalente a la predicha por la ecuación del modelo 2.31. Observese que el paso advectivo será más pequeño cuando el gradiente de \mathbb{K} sea negativo en la dirección de v . Ésto ocurrirá cuando V disminuya en la dirección positiva de v (un punto de estancación por ejemplo) y se comprueba cómo el término del gradiente de la dispersión intenta mantener las partículas lejos de esas áreas.

El término en la ecuación paso 2.46 que representa la divergencia del tensor \mathbb{K} no ha sido incorporado en los modelos iniciales de transporte según el método del camino aleatorio (Ahlstrom et al., 1977; Tompson et al., 1990). Sin embargo, se ha demostrado que es necesaria su inclusión cuando \mathbb{K} varía espacialmente para que la analogía sea correcta, (Ackerer y Kinzelbach, 1985; Uffink, 1987) ya que su ausencia da lugar a una acumulación errónea de masa en zonas de estancamiento. En la práctica el efecto de este término en la mayoría de los flujos es generalmente poco importante debido a que los gradientes de velocidad son pequeños. Debido a esto,

su exclusión a menudo no tiene repercusiones significativas, motivo por el cual no se había analizado hasta el momento con profundidad.

Resumiendo, se puede afirmar que la analogía que se ha empleado simula los desplazamientos del soluto al mover partículas de acuerdo a una ecuación de paso incremental. Las propiedades de estas ecuaciones discretizadas (ecuaciones 2.42 y 2.46) aseguran que las distribuciones de partículas resultantes son equivalentes a las distribuciones continuas descritas por las ecuaciones del modelo (2.31). Esta equivalencia que permite desarrollar esta teoría se debe básicamente a la similitud formal entre estas ecuaciones y la de Fokker-Planck. El siguiente cuadro muestra la equivalencia entre la ecuación diferencial de Íto, la ecuación de Fokker-Planck y la ecuación de transporte de masa en el caso más general:

$$\begin{aligned}
 \text{Ec. Diferencial de Íto} & : d\mathbf{X} = \mathbf{A}(\mathbf{X}(t), t) dt + \mathbb{B}(\mathbf{X}(t), t) d\mathbf{W}(t) \\
 \text{Relación entre ambas} & \Updownarrow : N \rightarrow \infty; \quad \Delta t \rightarrow 0 \\
 \text{Ec. de Fokker-Planck} & : \frac{\partial f(\mathbf{X}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}_i} (A_i f(\mathbf{X}, t)) + \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{X}_i \partial \mathbf{X}_j} \left(\frac{1}{2} B_{ik} B_{jk} f(\mathbf{X}, t) \right) \\
 \text{Relación entre ambas} & \Updownarrow : \mathbf{V} = \mathbf{A} - \nabla \left(\frac{1}{2} \mathbf{B} \mathbf{B}^T \right); \quad K = \frac{1}{2} \mathbf{B} \mathbf{B}^T \\
 \text{Ec. de Transporte} & : \frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \mathbf{v} c + \nabla [\mathbb{K} \cdot \nabla c]
 \end{aligned}$$

Esta analogía directa no se cumple si se incluyen términos adicionales representando cualquier clase de pérdida o ganancia de masa de soluto en las ecuaciones del continuo. La razón está en que las ecuaciones paso (ecuaciones 2.42 y 2.46) no añaden o quitan masa del sistema de forma natural al ser inherentemente conservativas en masa ya que están directamente relacionadas con la ecuación de Fokker-Planck la cual, como ya se ha visto, conserva la probabilidad. En el *Apéndice C* figura la deducción pormenorizada de la ecuación de desplazamiento a partir de la ecuación de Fokker-Planck.

Para concluir la introducción al modelo de camino aleatorio, se describirá en la

próxima sección la implementación del algoritmo de camino aleatorio así como las diversas formas para interpretar los resultados.

2.4 Aspectos computacionales generales

En esta sección se trata los aspectos generales a tener en cuenta a la hora de simular el movimiento de un soluto, representado por un gran número de partículas a través de un dominio. Para calcular la posición de un partícula en un tiempo determinado por medio de las ecuaciones de paso (2.42 o 2.46), se necesita conocer la velocidad, el tensor de difusión, su gradiente espacial (para el segundo caso) y el intervalo temporal.

La velocidad y la difusividad no necesitan de ningún tipo de implementación ya que vienen dadas en cada una de las células del dominio computacional, Ω , en donde se han desarrollado las ecuaciones del camino aleatorio. Únicamente para el caso de la ecuación de difusión-advección en donde las difusividades son variables, se utiliza un esquema de interpolación para encontrar la variación espacial de dicho parámetro, siendo el más general aquel en donde los componentes del gradiente se definen en función de los términos de difusión de la células vecinas mediante el método de las diferencias centradas, esto es,

$$\frac{\partial K_{11}(i, j)}{\partial X_1} = \frac{K_{11}(i+1, j) - K_{11}(i-1, j)}{\Delta X_1(i+1, j) + \Delta X_1(i-1, j)}$$

en donde los componentes del gradiente del coeficiente de difusión para la dirección X_1 de la célula (i, j) se define en términos de los coeficientes de difusión de las células vecinas $(i-1, j)$ y $(i+1, j)$.

La elección del intervalo temporal, sin embargo, resulta más difícil ya que generalmente se trabaja con velocidades variables tanto en el espacio como en el tiempo. Esto afecta al movimiento de las partículas, ya que, como se ha visto, las partículas se mueven en el espacio de acuerdo a una fuerza macroscópica y una fuerza aleatoria, siendo una o ambas función de la velocidad y, por lo tanto, de la

posición. Si se utiliza un intervalo temporal muy largo, los errores que se obtienen son muy significativos, distorsionando, de esta forma, los resultados. Estos efectos se verán más claramente considerando dos casos: desplazamientos en un flujo con velocidades variables en el espacio pero no en el tiempo y desplazamientos en un flujo con velocidades variables en el tiempo, ambos aplicados al movimiento de una partícula. Los resultados obtenidos se aplicarán a la generalidad del movimiento de una nube de partículas.

1 Movimiento de una partícula en un flujo estacionario: La ecuación de camino aleatorio que simula el movimiento de soluto, nos permite diferenciar entre el desplazamiento advectivo y el desplazamiento dispersivo, pudiendo estudiar de esta forma los efectos sobre cada uno de los desplazamientos de la elección del intervalo temporal.

Desplazamientos advectivos en un flujo estacionario: En el caso de advección pura, una partícula de soluto seguirá una línea de corriente. Si se utilizan intervalos temporales finitos en un campo de velocidades estacionario definido en todos los puntos del dominio, se obtendrán pequeños errores por sobreestimación del desplazamiento (*overshoot*) y serán debidos básicamente a la naturaleza discreta del intervalo temporal (Figura 2.7). Para evitarlos, la solución estaría en utilizar un intervalo temporal Δt infinitamente pequeño o un método numérico de integración adecuado (Tompson et al., 1988).

Pero en nuestro caso, ya que se está usando un dominio discretizado, las velocidades tienen un valor definido en cada una de las células de la malla. Lógicamente, los errores de overshoot serán similares (Figura 2.8), y por lo tanto, se puede tratar de aplicar las mismas soluciones que en el caso anterior en donde la velocidad estaba definida en cada uno de los puntos del flujo: trabajar con un intervalo temporal Δt infinitamente pequeño o usar métodos de integración del tipo

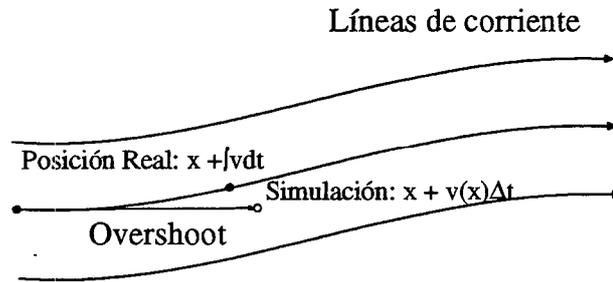


Figura 2.7. Sobreestimación en la advección debido a un incremento finito en el tiempo para un campo de velocidades definido.

Runge-Kutta. La segunda opción presenta el inconveniente de implicar el cálculo de diversas derivadas de la velocidad calculadas a partir del campo discreto de velocidad utilizado. Por eso, y debido a que las velocidades que se han obtenido provienen de soluciones numéricas, si se introducen nuevas derivadas daría sin lugar a dudas errores de mayor magnitud.

Debido a esto, el estudio se centrará en el uso de un intervalo temporal pequeño. Hay que tener en cuenta que existe un punto a partir del cual, la disminución del intervalo temporal no supondría ningún tipo de mejora. Este aspecto se determina introduciendo el llamado *número de Courant*, definido para cada célula de la malla por

$$C_c = \frac{V\Delta t}{\Delta X}$$

esto es, el cociente entre un desplazamiento advectivo durante el intervalo temporal Δt y la dimensión de la célula, dentro de la cual, la velocidad V es constante. Cuando el número de Courant es mayor que la unidad en cualquier célula, $C_c > 1$, se obtendrán errores de overshoot (Figura 2.8). Si se hace este número menor que

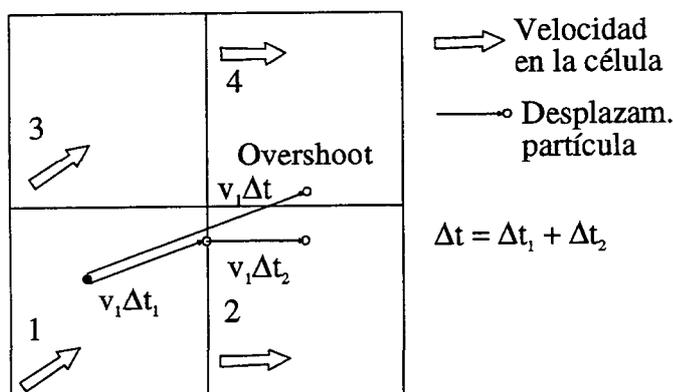


Figura 2.8. Sobreestimación en la celdilla de cálculo.

la unidad, $C_c < 1$, disminuiríamos la probabilidad de que este tipo de errores se produzcan. Es importante señalar que los errores de overshoot mostrados en la Figura 2.7 se darán también dentro de una célula de la malla, con la desventaja de que no existe manera de evitarlo. La razón está en que dentro de la celdilla se considera que la velocidad es constante al tomar un campo de velocidades discretizado.

El intervalo temporal óptimo para mover una partícula por advección será uno que sea fijo e independiente de la posición de la partícula, o uno que sea variable tal que la partícula se mueva siempre desde el borde de una célula al borde de otra. En el primer caso, debido a que la partícula puede estar localizada en cualquier lugar dentro de la célula, no parece correcto elegir un $C_c \simeq 1$ para evitar overshoot en otra célula. Escogiendo Δt tan pequeño de tal forma que el número de Courant sea $C_c < 0.1$ en todas las células (Tompson et al., 1988), se asegurará un error de overshoot no mayor de $0.1\Delta x$. Esta aproximación tiene como contrapartida el dar lugar a muchos cálculos para mover la partícula a través de una célula. La segunda aproximación sería simplemente calcular el tiempo que necesita una partícula para alcanzar el borde de la célula (en la dirección del vector velocidad) y mover la partícula en el borde justo dentro de la próxima célula (Figura 2.8).

Entonces, el proceso se repetiría usando la velocidad de la célula vecina. Esto minimizaría los errores y tiempo de cálculo para el problema advectivo, pero hace Δt sea independiente de la localización. En ambas aproximaciones C_c será siempre ≤ 1 .

Desplazamientos aleatorios en un flujo estacionario: En los casos donde el tensor de dispersión \mathbb{K} sea función del campo de velocidad, se deben hacer consideraciones similares a las descritas anteriormente. Durante un desplazamiento, la velocidad puede variar y consecuentemente afectar el tamaño de un desplazamiento aleatorio. Será útil estudiar la magnitud esperada de este desplazamiento d_i en un punto dado del campo de flujo. Hemos visto que $d_i = R_{ik} \sqrt{2\mathbb{K}^{*1/2}} \mathbf{Z}_{j,n} \sqrt{\Delta t}$ y su media cuadrática se puede obtener de la matriz $\langle d_i d_j \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle d_i d_j \rangle &= \langle R_{ik} \mathbf{Z}_k R_{jm} \mathbf{Z}_m 2\mathbb{K}^* \Delta t \rangle = R_{ik} R_{jm} 2\mathbb{K}^* \Delta t \langle \mathbf{Z}_k \mathbf{Z}_m \rangle = \\ &= R_{ik} R_{jk} 2\mathbb{K}^* \Delta t = 2\mathbb{K}^* \Delta t \end{aligned}$$

Usando su forma diagonalizada (Apéndice B), un típico componente de esta matriz es $2l_L v_L \Delta t$, de manera que un típico desplazamiento aleatorio es $\sigma_d = \sqrt{2l_L v_L \Delta t}$. Esto significa que los problemas de overshoot en un paso dispersivo estará dominado por aquellos del paso advectivo, y que la mejor aproximación será la que se aplicó para el caso advectivo.

2 Movimiento un grupo de partículas en un flujo variable con el tiempo:

Si las velocidades varían considerablemente durante un intervalo temporal Δt se puede producir un error de overshoot. Supongamos que el campo de velocidades varía para cada intervalo temporal ΔT_f . El intervalo temporal óptimo para mover una partícula Δt_{opt} se puede calcular restringiendo el número de célula de Courant C_c de forma que $C_c < 1$. Si $\Delta t_{opt} \leq \Delta T_f$ entonces no existe error de overshoot temporal mientras que si $\Delta t_{opt} > \Delta T_f$, lógicamente se darán errores de overshoot temporal.

La idea principal que se obtiene de la discusión anterior es que para minimizar

los errores de sobreestimación cuando la velocidad es variable respecto al espacio y tiempo, se tiene que conseguir movimientos de paso suficientemente pequeños. Se ha visto que en la mayoría de las condiciones, la contribución mayoritaria al movimiento de la partícula durante un intervalo temporal viene dada por el desplazamiento advectivo puro $v\Delta t$, por lo que, controlando la magnitud de este paso a través de una buena elección de Δt , se controlará los demás desplazamientos de forma similar. Se puede optar por elegir un valor fijo muy pequeño del intervalo temporal Δt para todos los desplazamientos en todas las células, o bien se puede elegir un intervalo temporal variable basado en que una partícula la movemos de un borde de célula a otro. Este último método ya se ha comentado que resulta más eficiente para una partícula que para un sistema de muchas partículas. Sin embargo, el modelo incluye el movimiento de un gran número de partículas a través del dominio Ω (Figura 2.6), por lo que se necesita reconsiderar la solución adoptada antes cuando se estudiaba el movimiento de una única partícula. Consideremos brevemente dos esquemas de elección de intervalo temporal para tratar el movimiento de N partículas:

Primer método

Dadas N partículas distribuidas en el dominio computacional Ω en el tiempo t_0 , este método simplemente incluye la elección de un intervalo temporal Δt fijo, moviendo las N partículas secuencialmente a sus nuevas posiciones usando las ecuaciones de paso (2.42) o (2.46). El mismo intervalo temporal se usa para el desplazamiento de todas las partículas de tal forma que la distribución de masa de soluto se conoce en cada intervalo temporal (Figura 2.9). Para evitar problemas de overshoot, el intervalo temporal se debe elegir con respecto a la mayor velocidad V_{\max} que exista en la malla en el dominio Ω_c , y con respecto a la longitud de célula de la malla más pequeña, Δx , de tal forma que se obtendrá un número de Courant máximo, $C_{c,\max}$. Si malla es tridimensional, se realiza este cálculo para cada una de las dimensiones. Asegurándose de que este número sea menor que 0.1, el error de sobreestimación será pequeño para todas las partículas.

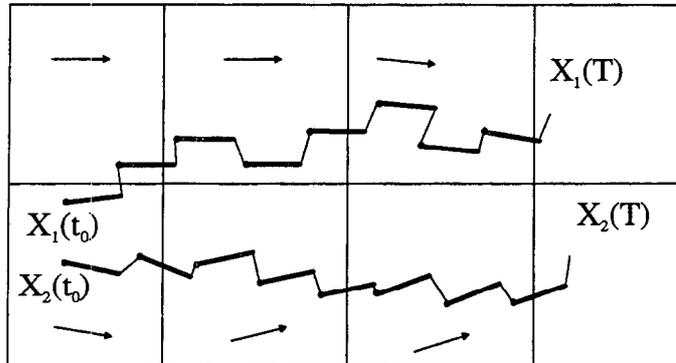


Figura 2.9. Movimiento de dos partículas usando el primer método. El trazo grueso determina el desplazamiento advectional, el trazo fino representa el desplazamiento aleatorio. Finalmente las flechas indican la velocidad en cada célula.

Segundo método

El método descrito arriba en el que todas las partículas se mueven juntas con el mismo intervalo temporal dando lugar a una distribución del soluto en cada instante es el más usual. El método que se verá aquí utiliza la ventaja de la naturaleza intrínseca de la aproximación del método lagrangiano que se está usando, base del camino aleatorio. Dadas las mismas N partículas distribuidas en el dominio Ω en t_0 , esta técnica consiste en mover cada partícula durante varios pasos hasta que el tiempo $t = T_1$, donde $T_1 = n\Delta t$. Por ejemplo, la partícula 1 se mueve desde su posición X_1^0 en el tiempo t_0 durante varios intervalos temporales con desplazamientos variables hasta la posición X_1^1 en el tiempo T_1 . Entonces, la partícula 2 se mueve desde (X_2^0, t_0) hasta (X_2^1, T_1) y así para todas las demás (Figura 2.10). Una vez que todas las partículas se han movido hasta alcanzar su posición en T_1 , se mueven por el mismo método hasta otro intervalo T_2 . La diferencia respecto al método anterior es que las distribuciones de las partículas se pueden obtener en tiempos preseleccionados T_1, T_2, \dots

La ventaja de este método es que los intervalos temporales usados para cada partícula serán diferentes y pueden ser elegidos y ajustados de acuerdo a las

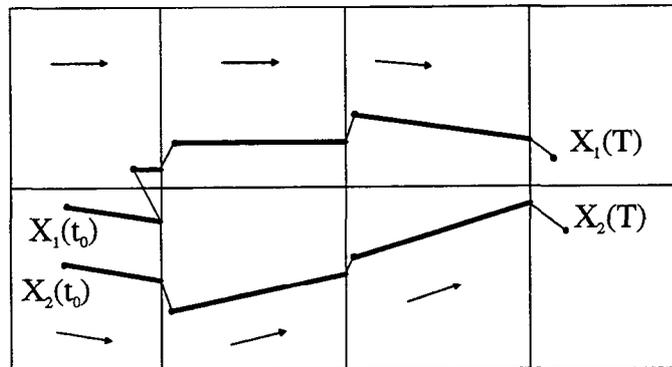


Figura 2.10. Movimiento de dos partículas según el segundo método propuesto. Los desplazamientos dentro de cada celda son de longitud variable, moviéndose siempre con el flujo marcado en cada celdilla. Los símbolos se deben interpretar igual que en la figura precedente.

condiciones locales de flujo. Por ejemplo, el intervalo temporal para una partícula dada i en una célula cualquiera de la malla en el tiempo t_0 se puede calcular de tal forma que la partícula se mueve justo dentro de la próxima célula por pura advección y entonces se desplaza por mecanismos dispersivos, como muestra la Figura 2.10.

2.4.1 Número de partículas

La masa de soluto se dividirá en N partículas, libres de moverse independientemente con el tiempo a través del dominio computacional Ω , de acuerdo con las ecuaciones paso 2.42 o 2.46, de tal forma que se puede ver cómo una pluma de soluto se mueve con el tiempo.

Se plantea la pregunta de cuál sería el número óptimo de partículas para hacer la modelización. En principio, cuantas más partículas se utilicen para una cantidad dada de soluto, menor será la masa de cada partícula y, por tanto, más se aproximará a una partícula de fluido. En consecuencia, la tendencia sería utilizar un gran número de partículas a la vez. Sin embargo la elección no es tan simple, ya que no hay que

Condiciones iniciales: representación de fuentes

olvidar que los resultados de dos o más simulaciones idénticas se pueden superponer, al ser independientes los movimientos de cada una de las partículas. Es la razón por la que el movimiento simultáneo de N partículas puede resultar equivalente a N experimentos combinados para una partícula.

2.5 Condiciones auxiliares

Las condiciones auxiliares que se aplican a las ecuaciones que gobiernan el proceso físico y que se refieren a la distribución inicial de soluto y su flujo a través de los contornos, necesitan así mismo ser implementadas en los modelos de camino aleatorio para poder representar correctamente el proceso físico.

Uno de los problemas que se plantean al utilizar el método del camino aleatorio hace referencia a la necesidad de conservar la masa dentro del dominio en donde las ecuaciones se verifican. Para poder simular salida o entrada de masa dentro del dominio, se desarrollan las simulaciones en un dominio computacional Ω_c que es parte de un dominio mayor Ω en donde las ecuaciones de camino aleatorio se desarrollan, y donde la masa total de soluto M permanece constante (conservándose de esta forma la probabilidad f). De esta forma, la masa total en Ω_c se puede variar, permitiendo que fluya hacia fuera o hacia dentro a través de cualquier contorno de manera libre o de forma controlada (véase respecto a los dominios la Figura 2.3). Los contornos de Ω_c pueden ser hipotéticos o bien representar estructuras físicas reales. A continuación se describe la forma de representar las condiciones auxiliares mencionadas (condiciones iniciales y de contorno) para los modelos de camino aleatorio.

2.5.1 Condiciones iniciales: representación de fuentes

Las condiciones iniciales para la concentración $c(X, t_0)$ para X en Ω_c , el dominio restringido, se refieren a las distribuciones iniciales de partículas dentro de Ω_c , lo que generalmente se denomina una fuente. La representación de fuentes constituye una

limitación severa para los modelos eulerianos debido a que no pueden resolver los campos de concentración cuya extensión espacial es pequeña comparada con la de discretización de la malla. Los modelos de camino aleatorio no presentan este tipo de errores, ya que basta simplemente con introducir partículas en el dominio de cálculo.

Las fuentes admiten diferentes clasificaciones en función de su liberación temporal y espacial. Con respecto a la liberación del soluto en el espacio, existen dos tipos básicos: fuentes puntuales y fuentes espacialmente distribuidas. En el primer caso, la fuente consiste en la asignación de todas las partículas a un punto X_0 en t_0 . En el segundo caso, las partículas se liberan en un volumen que puede ser unidimensional, bidimensional o tridimensional. Para representarlas, se asigna una cantidad de soluto, representado por N partículas, a un volumen V (Figura 2.11). Las partículas se pueden distribuir aleatoriamente, o siguiendo cierta distribución.

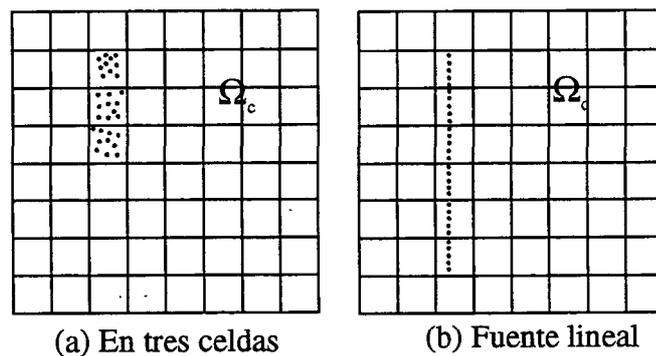


Figura 2.11. Distribución de 30 partículas. (a) Aleatoriamente en tres celdillas. (b) Como fuente lineal de partículas.

Con respecto al comportamiento temporal de dichas fuentes, éstas se pueden clasificar en instantáneas o continuas. En el caso de una fuente instantánea, las partículas son liberadas de una vez y es la única entrada de soluto en forma de partículas durante toda la simulación. Por contra, en el caso de fuente continua, se libera una cantidad de soluto en forma de partículas cada cierto tiempo (determinando

Contorno $\partial\Omega_1$ o de Dirichlet

por tanto la intensidad de la fuente). Hay que tener en cuenta que debido a que la ecuación de difusión-advección no tiene fuentes ni sumideros en el dominio de integración (2.6, 2.9), el soluto liberado en un cierto instante se mueve de forma independiente al soluto que se libera en pasos posteriores. La ventaja de la modelización de este tipo es que las trayectorias de cada una de las partículas son independientes unas de las otras, por lo que al final, se puede sumar el trayecto de cada una de ellas. Debido a ello las fuentes continuas se pueden representar por la suma de diferentes distribuciones de partículas obtenidas de fuentes instantáneas.

2.5.2 Condiciones de contorno

Las condiciones de contorno se refieren a la especificación de la concentración $c(X, t)$ o el flujo normal $\bar{q}\bar{n}$ para el punto X en $\partial\Omega_c$, dentro del dominio Ω_c . Generalmente son una combinación de condiciones Dirichlet (concentración específica $c(X, t)$) en $\partial\Omega_c$ y condiciones de contorno Neumann o de flujo normal (flujo específico $q\bar{n}$, siendo \bar{n} un vector unitario normal a $\partial\Omega_c$ y q un flujo de masa). El flujo de masa generalmente es cero (representando un contorno de flujo cero) o algún flujo hacia dentro positivo.

Por conveniencia en aplicar estas condiciones en términos de distribuciones de partículas, las células (o parte de ellas) del borde del dominio de cálculo Ω_c se considera como contorno, y las partículas se distribuyen para simular tanto concentraciones fijas como condiciones de flujo. Dependiendo del comportamiento en el contorno, podemos clasificar éste en cuatro categorías (Figura 2.12).

A las células o espacio del contorno asociado a una concentración c específica (o a una determinada distribución de partículas) se denota por $\partial\Omega_1$. El contorno en donde el flujo de entrada es no nulo se designa por $\partial\Omega_2$. El contorno en donde el flujo de masa a través de él es nulo, se denomina $\partial\Omega_3$ y finalmente, cuando exista flujo de salida se denominará $\partial\Omega_4$. En consecuencia, el contorno del dominio Ω_c será la suma de cada uno de los contornos, que se denotará matemáticamente como $\partial\Omega_c = \sum \partial\Omega_i$.

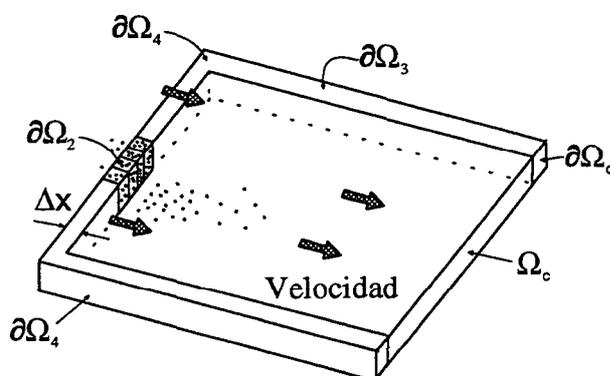


Figura 2.12. Diferentes dominios de cálculo y condiciones de contorno

2.5.2.1 Contorno $\partial\Omega_1$ o de Dirichlet

Consiste en asignar a un cierto volumen fijo que pertenezca a $\partial\Omega_1$ una concentración determinada, representada por una distribución aleatoria o específica de partículas. De esta forma, se puede asociar una concentración asignada c_0 a cada uno de estos volúmenes, y por lo tanto al contorno total $\partial\Omega_1$. Después de un tiempo, las partículas que se han introducido de esta forma en la simulación se han movido, de tal forma, que algunas estarán en el dominio computacional Ω_c , otras permanecerán en el contorno $\partial\Omega_1$ y otras pueden haber salido del dominio computacional (Figura 2.12). Al final de este intervalo temporal, y antes del próximo, todas las partículas que no están dentro de Ω_c se eliminan y se reinstaura las condiciones de contorno de nuevo. Esto es, todas las partículas que están fuera de Ω_c y $\partial\Omega_c$ se eliminan. En el caso de $\partial\Omega_1$, las partículas que permanecen en ella, también se eliminan y se introduce una nueva distribución de partículas en ellas. Esto sirve para mantener el número medio de partículas o concentración en $\partial\Omega_1$ durante la modelización. Según los dos métodos descritos para elegir el intervalo temporal, el uso del primer método parece más apropiado, siempre que Δt se elija mucho menor que el tiempo total de simulación, de tal forma que la disminución de la concentración en el contorno entre el comienzo de la simulación y

Contorno $\partial\Omega_3$ o de flujo cero

los sucesivos pasos - así como su efecto sobre la solución - sea mínima. Si se utiliza el segundo método para la elección del intervalo temporal, se tendría que renovar la concentración de soluto en los contornos después de un período grande de tiempo, influyendo por tanto en la solución. En consecuencia, la condición $\partial\Omega_1$ se debería utilizar junto con el primer método de elección de intervalo temporal.

2.5.2.2 Contorno $\partial\Omega_2$ o de flujo de entrada

Esta es la forma adecuada de implementar las fuentes continuas. Este tipo de condición de contorno es similar a la anterior y consiste en especificar la cantidad de masa que se quiere que entre (o número de partículas) o que fluya dentro del sistema a través de cierta área del contorno durante un intervalo temporal. De esta forma, para cada intervalo temporal, la masa dentro de estas celdillas de contorno se renovará. Paralelamente se tiene que especificar la velocidad, de tal forma que se asegure que toda la masa entre en el dominio de estudio. Por ejemplo, si se quiere que entre una cantidad $M_c = qA\Delta t$ donde A es el área de una célula determinada que pertenece a $\partial\Omega_2$, entonces, el número de partículas será $N_c = qA\Delta t/m$ donde m es la masa de una partícula. La mejor forma de introducir estas partículas en el dominio, será distribuir las uniformemente y aleatoriamente en la célula, haciendo que la componente normal de la velocidad V_n en A las mueva hacia dentro durante el intervalo temporal Δt . Se ignora de esta forma, cualquier otro componente del vector velocidad, términos de dispersión y gradientes. En la implementación se asigna a V_n el valor de $\Delta X/\Delta t$ donde ΔX es la longitud de la célula, garantizando de esta forma que todas las partículas entrarán en el dominio después del intervalo Δt .

2.5.2.3 Contorno $\partial\Omega_3$ o de flujo cero

Por definición, esta condición de contorno significa que la masa no puede atravesar los límites establecidos. Tales contornos serán aquellos en donde la velocidad normal V_n sea cero. Las partículas cerca de tales contornos se moverán simplemente de forma difusiva. Cualquier partícula que se adentre en este tipo de celdas se moverá de nuevo

hacia el dominio como en una reflexión tal y como se muestra en la Figura 2.13. Estos contornos se denominan lógicamente reflectantes ([53]).

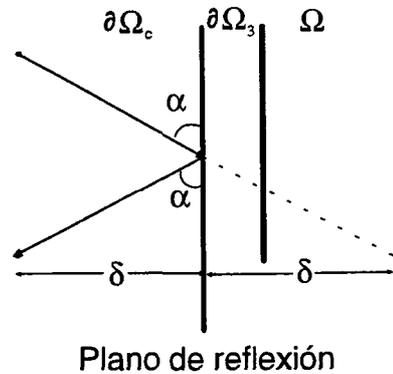


Figura 2.13. Condición de contorno de flujo nulo, o condición $\partial\Omega_3$

2.5.2.4 Contorno $\partial\Omega_4$ o de flujo de salida

Las células que lo conforma se denominan células de flujo libre. Las partículas que entran en estas células (o las atraviesan de tal forma que salen de Ω_c) durante un intervalo temporal, se eliminarán de posteriores simulaciones. Las partículas simplemente se salen del dominio de interés. Este tipo de contornos, se denominan absorbentes (Gardiner, 1985). Esta condición se tendría que aplicar en los contornos de Ω , en donde se especificó que la probabilidad f era cero, lo que significa que no hay posibilidad de que una partícula se encuentre en esa posición.

2.6 Tratamiento de datos y sensibilidad de un modelo de camino aleatorio

Para operar con estos modelos es necesario en general convertir distribuciones de partículas a concentraciones o fracciones de masa. Una cantidad fija de masa de

soluto M se representa por N partículas dentro del dominio Ω . Parte o toda esta masa entra en el dominio de cálculo, Ω_c . La masa de cada una de las partículas viene dada por:

$$m = \frac{M}{N}$$

y que, por lo tanto, dependerá de la elección de N , de tal forma que la masa de la partícula será más pequeña cuanto más grande sea N (para una masa fija de soluto M). Para desarrollar esta idea, considérese una región de muestreo arbitraria Ω_s de forma fija, volumen V_s y orientación tal que está centrada en un punto \mathbf{X} en Ω (Figura 2.14). A partir del volumen de muestreo se pueden definir las siguientes variables:

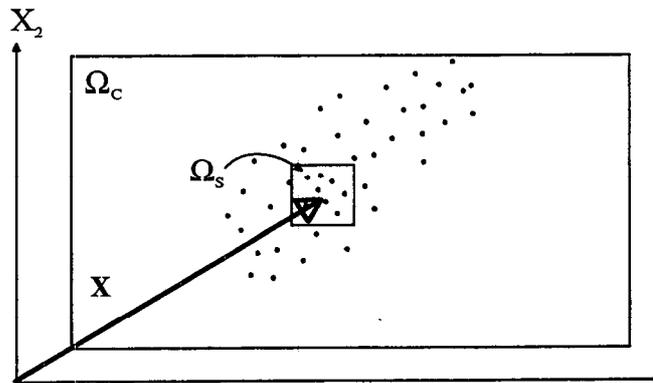


Figura 2.14. Posición del volumen de muestra Ω_s en el dominio de cálculo Ω_c . (Simplificado a dos dimensiones)

- $N_s(\mathbf{X}, t)$ = número total de partículas en Ω_s
- $MN_s = mN_s(\mathbf{X}, t)$ = masa total dentro de Ω_s
- $c(\mathbf{X}, t)$ = concentración media de soluto en (\mathbf{X}, t) dada por

$$c(\mathbf{X}, t) = \frac{MN_s(\mathbf{X}, t)}{NV_s} \quad (47)$$

- $\omega(\mathbf{X}, t)$ = fracción promedio de masa en (X, t) dada en función de la densidad ρ por

$$\omega(X, t) = \frac{c(X, t)}{\rho}$$

- $n(X, t)$ = fracción de las N partículas en Ω_s en el tiempo t y que se escribe como

$$n(x, t) = \frac{N_s(X, t)}{N}$$

Cuanto mayor es N , y por lo tanto más pequeña es la masa de cada partícula, es más fácil representar la distribución de masa de soluto a través del dominio y es más sencillo identificar fracciones más pequeñas de masa en áreas locales específicas. El volumen de muestreo Ω_s usado para definir concentraciones promedio o fracciones de masa, puede ser de cualquier tamaño o forma, siempre y cuando se use y se oriente de la misma forma para todas las evaluaciones. Teóricamente, se puede mover por el dominio de cálculo Ω_c para obtener medidas de concentración o masa sobre un continuum de puntos para una determinada mancha de soluto en un tiempo determinado en el tiempo t . Cualitativamente hablando, cuanto mayor sea Ω_s , mayor será el número de partículas que se encuentran dentro, y así la concentración variará más suavemente. Si Ω_s es demasiado grande, toda la masa estará dentro de este volumen de prueba y su distribución espacial no tendrá ningún sentido. Por otro lado, si Ω_s es demasiado pequeño, la capacidad de extraer información acerca de la distribución de masa a partir del número de partículas, se perderá.

Debido a que N es necesariamente un número finito, se van a obtener concentraciones con ruidos tales como los que se muestran en la Figura 2.15, al aproximar una distribución continua por una discreta. Para cuantificar este ruido se define un error normal estandar ε (Ahlstrom et al., 1977).

Considerese los movimientos de una partícula y una variable aleatoria Z que toma el valor de 1.0 si la partícula cae en una pequeña región de muestreo Ω_s de volumen V_s centrado en \mathbf{X} en el tiempo t y cero de otra forma. Si el volumen de muestreo, V_s ,

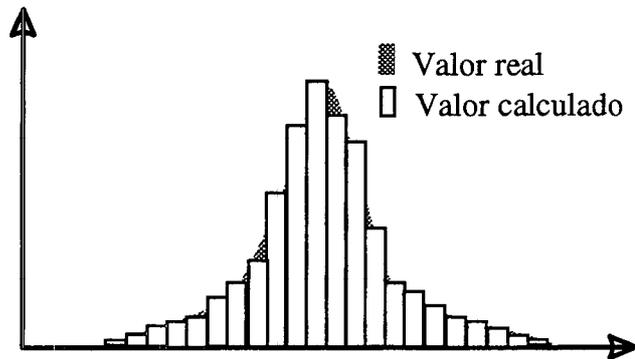


Figura 2.15. Ruido debido a la simulación de una distribución de concentración concreta. El área sombreada en gris representa la distribución real, la blanca es la suma de polígonos que representa la distribución.

es mucho más pequeño que el volumen de la región Ω_c , el valor esperado de Z en (\mathbf{X}, t) es simplemente :

$$E[Z] = f(\mathbf{X}, t)V_s \quad (48)$$

y su varianza será

$$\sigma_Z^2 = f(\mathbf{X}, t)V_s(1 - f(\mathbf{X}, t)V_s) \quad (49)$$

Si hay N partículas en Ω_c , el valor esperado $E[N_s]$ de partículas que se encuentran en V_s en cualquier punto \mathbf{X} en el tiempo t está dado a partir de 2.33:

$$E[N_s] = Nf(X, t)V_s \quad (50)$$

con varianza $\sigma_{N_s}^2$:

$$\sigma_{N_s}^2 = N f(X, t)V_s(1 - f(X, t)V_s) \quad (51)$$

Si V_s es pequeño, entonces $f V_s$ es un valor pequeño también y su cuadrado se puede despreciar en la ecuación anterior para dar finalmente:

$$\sigma_{N_s}^2 \approx N f(X, t) V_s \quad (52)$$

Con una cantidad fija M , la concentración en la célula C_s se puede definir usando la definición de concentración del soluto en el volumen de muestreo (ecuación 2.47) cuya media y varianza en (X, t) se convierte en:

$$E [c_s] = E [MN_s/NV_s] = \frac{M}{NV_s} E [N_s] = M f(X, t) \quad (53)$$

$$\sigma_c^2 = \left[\frac{M}{NV_s} \right]^2 \sigma_{N_s}^2 \approx M^2 \frac{f(X, t)}{NV_s} = E [c_s] \frac{M}{NV_s} \quad (54)$$

Nótese que la concentración esperada en X y t es independiente del número de partículas, N , y del tamaño V_s del volumen usado para formularlo, con tal de que sea pequeño. La varianza, por otro lado, es dependiente de la media. La integración de $E(c_s)$ sobre Ω da lugar a la masa total:

$$\int_{\Omega} E(c_s) dX = M \int_{\Omega} f(X, t) dX = M \quad (55)$$

La varianza σ_c^2 sin embargo, depende de N y V_s además de X y t . Una medida más útil de la variabilidad es el cuadrado del error total obtenido de la integración de $\sigma_c^2(X, t)$ sobre X :

$$\varepsilon^2 = \frac{M^2}{NV_s} \int_{\Omega} f(X, t) dX = \frac{M^2}{NV_s} \quad (56)$$

de aquí se deduce que el error normal estandar es simplemente:

$$\varepsilon = \frac{M}{\sqrt{NV_s}} \quad (57)$$

Tratamiento de datos y sensibilidad de un modelo de camino aleatorio

Este resultado es esencialmente una medida de todo el ruido aleatorio ilustrado en la Figura 2.15 y muestra que se reducirá en un factor de dos cuando se incremente un factor de cuatro del número de partículas N o alternativamente un incremento en un factor de cuatro del volumen de la región de muestreo Ω_s , a partir del cual se estiman las concentraciones. Como ya se mencionó antes, al haber ya fijado el tamaño de Ω_s en el dominio Ω_c , solo se podrá mejorar este modelo incrementando el número de partículas usadas para representar M o mediante el uso de algún filtro post-proceso que suavice la distribución de partículas obtenidas. Las estimaciones de la concentración asociadas con los centros de las celdas será contaminada a su vez por este ruido aleatorio y se puede determinar mediante:

$$z(\mathbf{X}, t) = c(\mathbf{X}, t) + s(\mathbf{X}, t)$$

donde $z(\mathbf{X}, t)$ es la estimación medida, $c(\mathbf{X}, t)$ es el real esperado y $s(\mathbf{X}, t)$ es el componente de ruido con media cero y varianza dada por la ecuación 2.56. En el capítulo siguiente se verá la aplicación de las ecuaciones de paso 2.42 o 2.46 a la modelización del transporte de petróleo en el mar cuando consideremos que la mancha está formada por partículas de diferente tamaño y diferente distribución.

Capítulo 3. Aplicación de un modelo de camino aleatorio a un derrame de petróleo: Generalidades

3.1 Introducción

En el capítulo precedente se ha tratado el proceso de advección-difusión para un soluto en general, pero, dado que se aborda el problema de la modelización de derrames de petróleo, existen una serie de condicionantes propios que hay que contemplar para su correcta modelización. La diferencia fundamental reside en que, al tener el petróleo menor densidad que el agua, tiene flotabilidad positiva. En consecuencia, su comportamiento respecto al movimiento vertical se verá afectado por este hecho y deberá lógicamente ser tenido en cuenta.

El movimiento y alteración que sufre el petróleo que se derrama en el mar están gobernados por procesos físico-químicos interrelacionados que dependen de las propias características del petróleo, condiciones hidrodinámicas y medioambientales (Mackay y McAuliffe, 1988). Un derrame de petróleo en el mar consiste fundamentalmente en una mancha superficial, existiendo también petróleo en forma de partículas en suspensión dentro de la columna de agua. Existe un continuo intercambio entre la

Procesos físicos que afectan a un derrame de petróleo

superficie del mar, donde se encuentra fundamentalmente el petróleo y el petróleo en suspensión. El transporte y la alteración del petróleo están gobernados por los procesos físico-químicos citados en el Capítulo 1. Las ecuaciones que los describen y parametrizan se pueden encontrar en diversas publicaciones (p.e. Spaulding, 1988; Mackay y McAuliffe, 1988; Delvigne y Sweeny, 1988; Turrel, 1994). Este trabajo está enfocado hacia el análisis de los procesos físicos que afectan al transporte o movimiento del petróleo en el mar relacionados con las condiciones hidrodinámicas, sin entrar en otros de carácter físico-químico o biológico.

Por lo tanto, se comenzará exponiendo los procesos físicos de carácter hidrodinámico que afectan al movimiento y expansión de una mancha de petróleo, mostrando tanto las ecuaciones que los rigen como la implementación que se ha empleado el modelo. Posteriormente, se comenzará por analizar la sensibilidad de una modelización lagrangiana mediante camino aleatorio para la simulación del petróleo subsuperficial debido a la dispersión turbulenta, fijando las condiciones de contorno apropiadas. Una vez que se haya determinado esto, se procederá al estudio de la dependencia de la expansión horizontal de una mancha de petróleo debido a la dispersión turbulenta con respecto al tamaño y distribución de partículas empleada. Finalmente, se concluirá con la aplicación de los resultados obtenidos a la modelización tridimensional de un derrame reciente: el del carguero *North Cape* acaecido en las costas de Rhode Island (EE.UU.) en enero de 1996. El modelo obtenido se validará contrastando los resultados obtenidos de la simulación con los valores medidos *in situ*.

3.2 Procesos físicos que afectan a un derrame de petróleo

El transporte del petróleo se realiza fundamentalmente a través de tres mecanismos: las corrientes, viento y oleaje. Respecto al primer mecanismo, la turbulencia oceánica

va a transportar el petróleo de forma difusiva, mientras que el campo de velocidades medias dará lugar a un transporte advectivo de petróleo. Ambos procesos, tal y como se vió en el Capítulo 2, se describen mediante la ecuación de difusión-advención.

El segundo mecanismo da cuenta de la acción de arrastre del viento sobre la mancha, que como se verá, da lugar a la expansión de la misma. Su descripción o inclusión no supone ninguna modificación de las ecuaciones de difusión-advención, ya que su contribución está implícita a la hora de calcular el campo de velocidades.

El tercero de los mecanismos que interesan particularmente es la llamada dispersión mecánica por oleaje rompiente, que consiste simplemente en la introducción de petróleo en la columna de agua en forma de partículas. Todos estos procesos se describen en detalle a continuación.

3.2.1 Advección y difusión turbulenta

La advección es un proceso físico que incluye el transporte superficial y subsuperficial del petróleo constituyéndose en el principal mecanismo que gobierna la localización de petróleo después del derrame. La estructura de las corrientes oceánicas es tridimensional y compleja debido a la interacción entre viento, oleaje y corrientes y a la generación de energía turbulenta cinética por cizalla y oleaje rompiente. La advección de petróleo en suspensión se debe al movimiento de las partículas de petróleo que han entrado en la columna debido a procesos de dispersión mecánica principalmente y no va a estar directamente afectado por el viento.

La mayoría de los modelos de derrames de petróleo usan una técnica de superposición lineal simplificada para aproximar el movimiento de la mancha, en donde se emplea una suma vectorial de los transportes inducidos por el flujo medio, mareas, viento y oleaje y dispersión turbulenta. Los modelos hidrodinámicos generan inicialmente la información acerca del flujo medio y las corrientes. Posteriormente, las corrientes inducidas por el viento y oleaje se ponen juntas y se representan por un factor de arrastre empírico y un ángulo de desviación dependiente del viento local y

Advección y difusión turbulenta

su dirección (Stolzenbach et al. 1977 ; Huang and Monastero, 1982). La velocidad de arrastre está comprendida entre el 2.5% y el 4.4% de la velocidad del viento, con un valor medio de 3 – 3.5%. Los ángulos de deflexión varían entre 0° y 25° a la derecha (izquierda) de la dirección del viento para el hemisferio norte (sur) con un valor medio aproximado de 15°. El transporte turbulento difusivo se calcula normalmente por un procedimiento de camino aleatorio con un coeficiente de difusión horizontal suministrado por el usuario, típicamente en el rango de 1 – 100 m^2/s . Elliot (1986) modelizó la difusión por gradiente de velocidad teniendo en cuenta tanto gradientes verticales como laterales. Esto dió lugar a que la mancha de petróleo se alargara en la dirección del viento y oleaje. El mismo efecto se puede simular en un modelo tridimensional teniendo en cuenta la difusión vertical y la flotabilidad de partículas de petróleo que están dispersas en la columna de agua.

En una típica aplicación, el transporte del petróleo se consigue sumando vectorialmente las contribuciones de cada componente descrito anteriormente. Estas componentes vectoriales dan lugar al transporte de petróleo, y se integran numéricamente en el tiempo para determinar la nueva localización de la mancha. El intervalo temporal se debe elegir de tal forma que una parcela de petróleo no pase a través de varias células de la malla en un solo intervalo temporal, según se expuso en el capítulo precedente.

Durante la última década, se han realizado diferentes estudios acerca de las dinámica de arrastre del petróleo con el objetivo de mejorar la capacidad de predicción del movimiento del petróleo. Las investigaciones tienden a desarrollar modelos numéricos/teóricos de la interacción de las corrientes inducidas por el viento y oleaje en la zona cercana a la superficie. Jenkins (1985) inició el desarrollo de tales modelos para agua profunda y se ha incrementado progresivamente su sofisticación, incluyendo las descripciones mejoradas de la viscosidad turbulenta vertical (no uniforme) y representaciones más sofisticadas del campo de oleaje. Youseff y Spaulding (1993) han extendido recientemente esta aproximación básica para la descripción de la turbulencia inducida por el oleaje en la superficie del mar.

Paralelamente, han extendido su modelo para estudiar los efectos de las aguas poco profundas en el arrastre (Youseff y Spaulding, 1993). Estos modelos de interacción oleaje-corriente generalmente muestran que el factor de arrastre y el ángulo decrecen con velocidades altas del viento, dando valores generalmente consistentes con la aproximación empírica. Éstos muestran también que el ángulo de arrastre varía drásticamente sobre los metros superiores de la columna de agua, particularmente con velocidades de viento bajas. Las diferencias más importantes entre los diversos modelos son la magnitud y estructura de la viscosidad turbulenta vertical para la cual las observaciones *in situ* están bastante limitada.

3.2.2 Expansión horizontal

Cuando el petróleo se derrama en el mar, está sometido a una serie de mecanismos que dan lugar a su expansión sobre áreas horizontales cada vez más extensas. La expansión horizontal de la mancha de petróleo se debe a varios procesos, siendo el debido a las fuerzas mecánicas tales como gravedad, inercia, viscosidad y tensión superficial los que dominan en los primeros estados del derrame.

Sin embargo, la expansión se debe básicamente a la difusión turbulenta horizontal, al arrastre del viento sobre la mancha como se mencionó en el apartado anterior, y al efecto combinado de la difusión turbulenta en una dirección y los gradientes de velocidad con respecto a esa misma dirección. Este último efecto de la hidrodinámica se le denomina *expansión por gradiente de velocidad o dispersión turbulenta* y sus efectos más notables en la mancha son su mayor elongación en la dirección de las corrientes, así como una mayor acumulación de petróleo en la parte delantera de la mancha (Elliot 1986; Elliot et al, 1986). Este proceso se simula de forma natural por medio de los modelos de camino aleatorio, sin necesidad de incluir un algoritmo particular, al contrario de lo que ocurre con los modelos eulerianos que necesitan incluir una formulación adicional a la del transporte-advención para cuantificar el proceso (Christodolou et al., 1976). Como se deduce de lo anterior, la expansión

Expansión horizontal

es un fenómeno complejo, pues se rige básicamente por el estado del océano. La mayoría de los estudios que describen este proceso, han dado lugar a fórmulas que no se aproximan sino por encima a las manchas reales (Lehr, 1996). Por ello, durante los pasados años se han intentado modelizar de forma más realista la expansión del petróleo considerando los procesos físicos que la originan.

Los primeros modelos acerca de la expansión en superficie de una mancha de petróleo se basaban únicamente en sus propiedades físico-químicas. Daban como resultado la idealización de la geometría de la mancha al considerarlas circulares para poder hacer las ecuaciones tratables (Blokker, 1964; Fay, 1969). Para ello se basaron en la expansión de un producto insoluble químicamente flotando en aguas calmas. Distinguieron diferentes etapas. La primera tiene lugar tan pronto como el petróleo entra en el agua; debido a la acción de la gravedad se expande lateralmente. Una vez que la capa de petróleo se hace lo suficientemente delgada, las fuerzas de viscosidad y tensión superficial dominan el proceso de expansión. En esta etapa, las propiedades del petróleo varían notablemente, ya que, tanto la viscosidad como la densidad, se incrementan debido a la evaporación y disolución del petróleo. En consecuencia, en un momento dado, la tensión superficial dominará la expansión (Fay, 1969). A partir de este momento, y debido a la variación de las propiedades del petróleo en el agua, la tensión superficial puede invertir su signo, no dominando más tiempo el proceso de expansión, y dando paso a la acción de fuerzas mecánicas asociadas con el movimiento de la masa de agua (Ozmidov, 1990).

Fay (1969) distinguió tres fases en la expansión de una mancha de petróleo debido a las propiedades físico-químicas: gravedad-inercial, gravedad-viscosidad y tensión superficial-viscosidad. De acuerdo con Fay (1969), el área de la mancha, supuesta circular, A_t , debida a la expansión por gravedad-viscosidad se puede formular de la siguiente manera:

$$A_t = \pi k_2^2 \left(\frac{V_o^2 g \Delta}{\sqrt{\nu_w}} \right)^{1/3} t^{1/2}$$

donde t es tiempo, g es la aceleración debida a la gravedad, Δ es la diferencia en densidad relativa, V_0 es el volumen inicial de la mancha, v_w es la viscosidad del agua, y k_2 es una constante empírica que varía de acuerdo con el autor consultado (Stolzenbach et al. 1977).

Existen otros trabajos acerca de la expansión del petróleo por propiedades físico-químicas como los debidos a Jeffery (1973) que, sin embargo, no distingue la separación de la expansión en tres fases. Quizá el más completo se debe a Mackay et al. (1980), que propusieron una aproximación consistente en dos manchas basándose en la teoría de Fay y en las observaciones de campo acerca de la transformación de la mancha de petróleo. En la formulación de Mackay, una mancha de petróleo gruesa ocupa una área pequeña, que a su vez alimenta a una mancha más delgada que ocupa un área mucho mayor, pero que cada vez va conteniendo menor cantidad de petróleo. La aproximación ha sido bien aceptada para presentar una visión realista de los procesos físicos. Sin embargo, la formulación es empírica y los valores de los coeficientes no son tan conocidos como los de la expansión dada por Fay, por lo que no se utiliza mucho.

Johansen (1985) usó una aproximación de tipo lagrangiana para modelizar la expansión del petróleo debido a las fuerzas gravitacionales e interfaciales. En este modelo, Johansen usó las ecuaciones unidireccionales de expansión de Fay para modelizar la extensión lateral de la mancha. La expansión se trató como un proceso de difusión y se simuló utilizando un método de camino aleatorio. El coeficiente de difusión se calculó a partir de las ecuaciones de Fay.

Algunos autores como Lehr et al. (1984b) consideraron que generalmente sólo la segunda fase -la expansión gravedad-viscosidad- es relevante. La primera fase sólo dura pocos minutos excepto para los derrames de gran volumen, y la última fase tienen lugar después de que la mancha ha sido bastante alterada o dividida en varias manchas más pequeñas, y su duración se estima inferior a 10^3 s (Ozmidov, 1990). La estimación de la duración de las tres fases completas es de menos de una hora (Elliot, 1986).

Expansión horizontal

La formulación dada por Fay subestima el área de la mancha, como se comprobó durante una serie de derrames experimentales en el Golfo Pérsico (Lehr et al., 1984a) aunque también se ha comprobado que a veces la sobreestima, tal y como se observó en los experimentos llevados a cabo en Canadá para validar dicha formulación (Ross y Dickens, 1987). Por ello, algunos autores propusieron una serie de modificaciones al modelo de Fay. Estas propuestas se pueden ver en Dodge et al. (1983), Lehr et al, (1984b), y Ross and Energetic Engineering (1985), en donde utilizaban la formulación de Fay combinada con un factor de deriva del viento para predecir el tamaño y la localización de una mancha de petróleo. Sin embargo, ninguna de estas aproximaciones predice con precisión el área de la mancha para largos períodos de tiempo porque no tienen en cuenta los factores medioambientales como el estado de la atmósfera o del océano. Además, siguen idealizando la forma de la mancha y no tienen en cuenta los detalles de la liberación inicial del petróleo. Recientemente, El-Tahan y Venkatesh (1994) establecieron que la fórmula original de Fay no se ajustaba a las diferencias en la viscosidad del petróleo derramado, un hecho obvio que se da en las manchas reales. Para corregirlo, introdujeron el concepto de gradiente de velocidad, que se relaciona de forma inversa con la viscosidad del petróleo y que representa la resistencia vertical por gradiente en la mancha del petróleo.

En la práctica, una mancha de petróleo superficial se expandirá por varios mecanismos: el primero debido a la turbulencia horizontal y las corrientes con gradiente presentes en las capas superficiales del océano, en segundo lugar a la expansión debida al viento y, por último, debido a la circulación Langmuir (Lehr, 1996). Los esfuerzos más recientes, por lo tanto, se centran en analizar el sistema dinámico de petróleo-agua, considerando para ello el movimiento tridimensional del petróleo junto con las propiedades del petróleo y la dinámica oceánica.

La expansión del petróleo debida a la turbulencia en la horizontal se basa en que cuando una sustancia pasiva se libera en la superficie oceánica, comienza a dispersarse debido a la turbulencia. Presumiblemente, este mismo fenómeno afectará

a la dispersión de petróleo, sustancia con flotabilidad positiva. La modelización de este proceso considerando al petróleo como un contaminante pasivo da lugar a estimaciones erróneas acerca del área de la mancha (Lehr, 1996).

Históricamente, los trabajos basados en el proceso de expansión por turbulencia se iniciaron con Murray (1972), que demostró que la expansión de una pluma de petróleo procedente de la rotura de una tubería estaba dominado por efectos turbulentos y que los efectos de la tensión superficial se podían ignorar. La caracterización de dicho proceso necesita de una apropiada elección del coeficiente de difusión horizontal turbulenta (Ahlstrom, 1975). En general, la elección del coeficiente de difusión turbulenta se hace basándose en que el proceso es fickiano, esto es, que la mezcla a pequeña escala debida a las fluctuaciones turbulentas de la velocidad es análogo -pero mucho más intenso- a la difusión molecular. Sin embargo, con respecto a la difusión turbulenta horizontal del petróleo, Elliot y Hurford (1989) consideraron que no era fickiano y, con objeto de explicar los resultados empíricos que obtuvieron, introdujeron una parametrización del coeficiente de difusión turbulenta dado por

$$K_x = 0.033t^{0.16}$$

Es posible incorporar la expansión de Fay con expansión difusiva tratando la primera como un proceso semidifusivo y haciendo que la varianza del proceso difusivo, que es la correspondiente a una distribución normal, esté dado por el radio de la mancha la mancha del petróleo predicha por la fórmula estándar de Fay. Esto da lugar a un *coeficiente de pseudodifusión*, descrito como:

$$K_{fay} = \frac{k_2^2}{16} \left(\frac{\Delta g V_o^2}{\sqrt{v_w}} \right) t^{1/2}$$

Sin embargo, aunque estos dos procesos se combinan de esta forma, no modelizan realmente lo que ocurre en un incidente real de derrame de petróleo ya que los efectos directos de oleaje, viento y corrientes no se tienen en cuenta (Lehr, 1996).

Expansión horizontal

Uno de los mecanismos que dan lugar a la expansión horizontal del petróleo en superficie es el debido al esfuerzo tangencial del viento sobre la mancha y el agua superficial. Mediante la observación de las manchas durante los últimos años, se ha podido determinar que el petróleo se mueve aproximadamente con una velocidad media igual al 3% de la velocidad del viento medido a 10 metros por encima de la superficie (Ozmidov, 1990; Lehr, 1996). A grosso modo, aproximadamente dos tercios de este movimiento representa la deriva de Stokes de las olas superficiales, y la tercera parte restante, representa el movimiento de la mancha a la par con el movimiento de la superficie del agua .

Estos tres procesos de expansión, el debido a las propiedades físico-químicas del petróleo, el generado por la turbulencia oceánica horizontal y el causado por el viento, los situamos en superficie. Sin embargo, no quedaría descrita la expansión del petróleo correctamente si no se introduce la tercera dimensión (componente vertical) ya que el petróleo se introduce en la columna de agua por mecanismos de dispersión mecánica debida al oleaje (Delvigne y Sweeny, 1988). Por ello, los modelos de los últimos años han ido incorporando la tercera dimensión para poder dar cuenta de los fenómenos descritos (Spaulding, 1988; Al-Rabeh et al., 1989).

Las partículas de petróleo están sujetas a este flujo del agua además de la difusión vertical, horizontal y las fuerzas de flotabilidad. Elliot (1986) realizó una serie de derrames de petróleo y rodamina para comparar los resultados con los del modelo que utilizó para su predicción en el que consideró el petróleo formado por partículas de diferente tamaño que se movían por corrientes y turbulencia. El modelo incluía gradientes laterales y verticales asociados con las mareas, demostrando que la elongación y orientación de las manchas predichas por el modelo estaban próximas a las observaciones de las manchas reales. Esto sugirió que los gradientes verticales en la capa superficial del océano fueron dominantes en determinar la expansión de la mancha después de su liberación, proceso que se conoce como dispersión turbulenta o por gradiente de velocidad (Fischer et al., 1979).

Elliot et al. (1986) establecieron que ésta era la razón por la que muchas manchas

adquirían una forma de cometa, en donde la parte donde existe más petróleo se concentra en la cabeza de la mancha, mientras que la cola está formada por una capa de petróleo mucho más delgada. Las partículas mayores vuelven a superficie rápidamente mientras que las más pequeñas permanecen por debajo de la superficie por periodos mayores de tiempo, quedándose retrasadas en la cola de la mancha en movimiento.

Por último, se ha observado durante los derrames de petróleo que después de un periodo grande de tiempo, cuando el petróleo lleva mucho tiempo en el agua, la mancha está formada por bandas estrechas alineadas aproximadamente con la dirección del viento. Esto es debido principalmente a las células de Langmuir bajo la superficie, en las que existen unas zonas de divergencia y convergencia hacia la superficie (Csanady, 1994). El petróleo se acumula en superficie en las zonas de convergencia, mientras que se acelera hacia abajo en las de divergencia. El resultado final son que esas bandas estrechas de petróleo aunque están expandidas sobre áreas mayores, sólo cubren de forma efectiva un pequeño porcentaje de agua superficial. Otros modelos (Farmer y Li, 1994), han incluido además los efectos dispersivos del petróleo a partir de la circulación Langmuir.

3.2.3 Dispersión mecánica y mezcla en la vertical

El proceso por el cual el oleaje rompiente divide la superficie de la capa de petróleo en partículas y las propulsa al interior de la columna de agua, se denomina *dispersión mecánica o natural*. Una vez las partículas están en la columna de agua, serán advectadas y difundidas a través de la masa de agua por corrientes y turbulencia oceánica. Aunque la mayoría de las partículas de petróleo suben a superficie de nuevo y se reagrupan formando nuevas manchas, algunas de las más pequeñas se difunden en la columna de agua incorporándose permanentemente en la misma (Aravamudan et al., 1981; Jansen, 1983; Delvigne y Sweeny, 1988).

El conocimiento de la existencia de petróleo subsuperficial en forma de partículas

Dispersión mecánica y mezcla en la vertical

fue comunicado por vez primera por Forrester (1971) después del derrame del petrolero *Arrow*, al encontrar partículas de petróleo debajo de la mancha superficial algunas de ellas en profundidades superiores a 20 m . La evidencia de la existencia de un mecanismo de intrusión en la columna de agua de las partículas generadas a partir de la mancha superficial debido al oleaje que rompe sobre ella, fue dada por Thorpe (1984) al detectar burbujas producidas por el oleaje en la columna de agua.

Otros derrames de petróleo en los que también se registraron pérdidas del petróleo superficial por el oleaje rompiente son (la mayoría referenciados en Farmer y Li, 1994: *US/UN Potomac* (Peterson, 1978), *Kurdistan* (Core, 1980), *Katina* (Rijkswaterstaat, 1982), *IXTOC-1* (Payne y Philips, 1985), *Thuntank 5* (Osir, 1987), *Braer* (Turrel, 1995) y *North Cape* (Spaulding et al. 1996). De entre ellos, el más característico fue el del petrolero *Braer*, que encalló en enero de 1994 en las costas de las Islas Shetland, Gran Bretaña. En este derrame se comunicaron pérdidas de petróleo superficial superiores al 60% del petróleo que se liberó de los tanques del barco. De este porcentaje, el 15% fue encontrado en los sedimentos y el 44% restante ha quedado perdido en la columna de agua en forma de partículas de tamaño muy pequeño (Turrel, 1994).

La dispersión mecánica es uno de los procesos que eliminan petróleo de la superficie, junto con la evaporación y disolución. La generación de partículas no es un proceso de fragmentación, esto es, la composición de las partículas dispersas es la misma que la del petróleo superficial, aunque variará a lo largo del tiempo al estar sujeto a una mayor disolución y biodegradación. Por otro lado, la distribución según tamaño de las partículas formadas por dispersión mecánica va a afectar significativamente la alteración del petróleo, ya que, en primer lugar, la estabilidad de la dispersión (reflotación de las partículas mayores) depende de dicha distribución y, en segundo lugar, la disolución y biodegradación, así como la interacción de las partículas con la materia en suspensión y con el fondo, dependen en parte del rango de tamaños de partículas que se hayan formado (ASCE, 1996).

El oleaje rompiente, como se ha dicho, es el mecanismo principal de dispersión mecánica, debido a que genera áreas de elevada energía turbulenta. Esta última es el parámetro principal que determina la dispersión del petróleo con respecto a la formación de las partículas de petróleo y sus tamaños, así como a su estabilidad en la columna de agua. La rotura de petróleo en partículas pequeñas se debe a remolinos turbulentos de pequeña escala con alta energía, ya que son los que pueden generar gradiente de cizalla lo suficientemente grandes como para romper una mancha de petróleo. La entrada inicial de las partículas en la columna se debe a remolinos de escalas mayores, mientras que los remolinos de gran escala son los más eficientes en la posterior difusión de las partículas (Ozmidov, 1990).

La dispersión mecánica por oleaje rompiente es un proceso difícil de modelizar y los primeros estudios se basaron en la relación entre el espectro de energía turbulenta y las partículas de petróleo, en donde consideraron la viscosidad del petróleo y la tensión interfacial agua-petróleo como parámetros determinantes. Muchos de los modelos de manchas de petróleo describen la dispersión del petróleo por expresiones basadas en datos empíricos y otros estiman las proporciones de dispersión en términos de un porcentaje de petróleo por día como función del estado del mar o velocidad del viento (ASCE, 1996). Las formulaciones teóricas de Aravamudan et al. (1981) dieron como resultado un rango de tamaños inconsistentes con los datos empíricos. Mackay et al. (1980) desarrollaron un algoritmo de dispersión basado en la velocidad del viento, viscosidad del petróleo, tensión interfacial petróleo-agua, y espesor de la mancha, dando resultados razonables en algunas circunstancias; pueden, así mismo, diferenciar entre dispersión de manchas gruesas de las delgadas a través del término de espesor que se incluye en su formulación (ASCE, 1996).

La energía turbulenta de disipación de una ola rompiendo es el parámetro central en los algoritmos empíricos de dispersión mecánica propuestos por Delvigne y Sweney (1988) o Delvigne y Lamber(1994). Las medidas en el laboratorio se realizaron para relacionar la disipación de energía de una ola rompiendo con la proporción de dispersión y la distribución de las partículas según tamaño formadas. La ecuación

Dispersión mecánica y mezcla en la vertical

derivada relaciona la proporción de dispersión por unidad de área para cada intervalo de tamaño de partícula con la energía de disipación del área unitaria superficial, el tipo de petróleo y la fracción de área del mar cubierta por petróleo. Tanto las medidas de laboratorio como en el mar, indican la relativa insensibilidad de la distribución de partículas según tamaños al tipo de petróleo y a la dinámica del fluido, mientras que la proporción de dispersión (número de partículas) y la extensión de la distribución de tamaños con respecto a los intervalos mayores sí son sensibles a dichos parámetros.

Los experimentos de menor y mayor escala (Bowemeester y Wallace, 1986 ; Delvigne y Sweeney 1988), indicaron que los rangos de las partículas formadas por dispersión van desde a 1 a 1000 μ . El comportamiento de las partículas formadas en áreas de energía turbulenta alta depende de la profundidad de intrusión inicial y la posterior difusión por el flujo, incluyendo los procesos de vuelta a superficie. Las relaciones empíricas para la distribución inicial en condiciones de oleaje rompiente se dan en Delvigne y Sweeney (1988). Casi todos los estudios experimentales y teóricos consideran al oleaje rompiente como la fuente de la rotura del petróleo superficial. Aún así, existe cierta evidencia experimental de que hay dispersión mecánica en condiciones en las que no hay oleaje rompiente u otras áreas de alta energía turbulenta, en donde la continua compresión y relajación de una capa de petróleo podría dar lugar a la formación de partículas (ASCE, 1996).

Las partículas de petróleo están sujetas a la advección y a los procesos de difusión. Estos se describen por modelos de difusión-advección (ej. Elliot 1986; Spaulding et al. 1994). Las dimensiones de la mancha superficial dependen fuertemente de los gradientes de velocidad en la vertical (cizalla) junto con la formación de partículas y su vuelta a superficie (ej. Kolluru et al.,1994). La energía que mantiene las partículas de petróleo en la columna de agua es debida principalmente al oleaje; como resultado, la energía turbulenta está confinada a la superficie oceánica en aguas profundas.

Los trabajos sobre dispersión mecánica del petróleo superficial tratan de encontrar la relación entre el oleaje reinante y la cantidad de petróleo que entra en la columna de agua, así como la distribución según tamaño de las partículas y la profundidad que este

petróleo alcanza en la columna de agua. Para una completa revisión sobre este tema es referencia obligada el trabajo de Delvigne y Sweeney (1988) y Delvigne (1991), ya que utilizaron los resultados y desarrollos de todos los trabajos tanto experimentales como teóricos realizados hasta esa fecha con respecto al proceso de dispersión mecánica. Su estudio, realizado bajo diversas condiciones de turbulencia y oleaje rompiente, es el más completo realizado hasta ahora, consiguiendo la relación entre la cantidad de petróleo disperso con relación a parámetros tales como temperatura, espesor de la mancha de petróleo y tipo de petróleo, y que dieron lugar también al cálculo de una distribución de partículas según tamaño que se forman a partir de la rotura de la mancha superficial. Los resultados a los que llegaron se pueden resumir en los siguientes puntos:

- La distribución de partículas de petróleo según el tamaño es independiente de todas las variables, como temperatura y espesor de la mancha, y se obtiene siempre una relación del tipo

$$N_d(d) \sim d^{-2.3} \quad (58)$$

donde N_d es el número de partículas en una unidad de intervalo de tamaño Δd alrededor de d , esto es, el intervalo $(d - \frac{1}{2}\Delta d, d + \frac{1}{2}\Delta d)$ siendo d el diámetro de la partícula.

- La cantidad de petróleo disperso por el oleaje viene dada por

$$Q(d) = C(0) D_{ba}^{0.5} d^{0.7} \Delta d \quad (59)$$

donde $Q(d)$ es la masa que entra en la columna en forma de partículas cuyos tamaños están en el rango $(d - \frac{1}{2}\Delta d, d + \frac{1}{2}\Delta d)$, por unidad de superficie y por ola que rompe; D_{ba} es la energía disipada por la ola que rompe por unidad de superficie y $C(0)$ es una constante de proporcionalidad que depende del tipo de petróleo.

Dispersión mecánica y mezcla en la vertical

- Las partículas serán llevadas al interior de la columna hasta una profundidad relacionada con la turbulencia generada por el oleaje rompiente, la mayoría de los estudios la sitúan entre una o dos alturas de ola (Naess 1980, 1982; Johansen, 1982; Delvigne y Sweeny, 1988). Se puede expresar como

$$z_i = c h_b \quad (60)$$

donde z_i es la profundidad alcanzada por las partículas, c es el factor de proporcionalidad, que se asume que es igual a 1.5 , y h_b es la altura de la ola que rompe y que es igual a la mitad de la altura de ola significativa (Johansen, 1982).

Durante el naufragio del petrolero *Braer* en las costas de las islas Shetland, en 1994, algunas características acerca de la dispersión mecánica quedaron al descubierto al no tenerse en cuenta en la modelización matemática que se utilizó para predecir el movimiento de la mancha. Así, Thorpe (1995), manejó la hipótesis de que la turbulencia debido al oleaje rompiente era superior a la estimada en los modelos de predicción. Esta afirmación está basada en un trabajo realizado por Agrawal et al. (1992), en el que se indica que la turbulencia aumenta en superficie hasta una profundidad dt dada por

$$dt = 10^5 u_*^2 / g \quad (61)$$

donde u_* es la velocidad de arrastre en el agua y g es la aceleración debida a la gravedad. Thorpe (1995) encuentra que el valor del coeficiente de difusividad turbulenta puede aumentar hasta 1.5 el valor que se estima a partir de la llamada 'Ley de la pared':

$$\varepsilon_z = \kappa u_* z \quad (62)$$

donde κ es la constante de Von Karman y z es la profundidad.

Otro aspecto que recoge Thorpe y que está avalado por sus trabajos sobre la

formación de burbujas por oleaje tipo spilling rompiendo, es que la profundidad a la que son llevadas las partículas, será similar a la que son llevadas las burbujas, y que sitúa, para vientos superiores a 6 m/s en $z_i = 4 H_s$, donde H_s es la altura de ola significativa. Otra información de importancia que resulta de sus estudios está relacionada con el tiempo que tardan las partículas en alcanzar dicha profundidad y que Thorpe sitúa como pocas decenas de un periodo de ola, tiempo que es mucho más corto que el que se utilizó en la modelización del movimiento del petróleo derramado en el naufragio del Braer (Turrel, 1994). Todos estos resultados a los que llega Thorpe se recogen en apartados posteriores para estudiar en qué condiciones afectarían.

3.3 Ecuaciones que rigen los procesos descritos

Este apartado desarrolla la formulación referente a la modelización del transporte de un soluto en flujos turbulentos al caso del seguimiento del movimiento de una mancha de petróleo. El petróleo, como cualquier sustancia, se va a mover de acuerdo a la ecuación de difusión-advección:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}c) + \nabla \mathbf{J} = 0$$

en donde ahora c representa la concentración de petróleo.

Si descomponemos la anterior ecuación en cada una de las componentes, obtenemos:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} = \nabla \mathbf{J}$$

donde u, v y w son los componentes de la velocidad del flujo, \mathbf{v} , en cada una de las direcciones, y \mathbf{J} va a representar el flujo no advectivo debido a las turbulencias del campo de velocidades. Normalmente la velocidad horizontal del soluto es considerada

Ecuaciones que rigen los procesos descritos

igual a la velocidad del agua, esto es, $u_c = u$ y $v_c = v$. Sin embargo, a no ser que el material sea pasivo, esto no se cumple para la componente vertical. La advección en la vertical viene dada por las velocidades del flujo vertical, que generalmente son despreciables frente a las componentes horizontales. Para el petróleo, debido a que tiene flotabilidad positiva - tendiendo pues a subir a superficie por lo tanto - existe pues un flujo advectivo vertical no despreciable dado por

$$w_t \frac{\partial c}{\partial z} \quad (63)$$

donde w_t es la velocidad terminal del petróleo. La ecuación de difusión-advección, con esta modificación para la componente vertical z , queda finalmente como

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w_t \frac{\partial c}{\partial z} = \nabla \cdot \mathbf{J} \quad (64)$$

Esta es la ecuación que se tiene que resolver mediante su simulación por un camino aleatorio. Las ecuaciones apropiadas del camino aleatorio para emular la solución de la ecuación de advección-difusión son

$$\mathbf{X}(t_n) = \mathbf{X}(t_{n-1}) + \mathbf{v}(\mathbf{X}_{n-1}, t_{n-1}) \Delta t + \frac{\partial K}{\partial x_i} \Delta t + \mathbf{Z}_n \sqrt{2 K \Delta t} \quad (65)$$

En el caso de utilizar coeficientes de difusión vertical turbulenta constantes, el término que nos da la variación espacial de dicho coeficiente, se haría cero, y se simplificaría la expresión quedando finalmente la que ecuación 2.42 obtenida en el Capítulo 2:

$$\mathbf{X}(t_n) = \mathbf{X}(t_{n-1}) + \mathbf{v}(\mathbf{X}_{n-1}, t_{n-1}) \Delta t + \mathbf{Z}_n \sqrt{2K \Delta t} \quad (66)$$

Recordemos que en la expresión anterior, \mathbf{Z}_n es un vector formado por números aleatorios con las siguientes propiedades:

$$\overline{\mathbf{Z}} = 0$$

$$\overline{ZZ} = 1 \quad (67)$$

Para obtener Z_n sólo es necesario tener las cualidades estadísticas dadas en las ecuaciones precedentes. Se puede usar una distribución normal $N(0, 1)$ (Ahlstrom et al., 1977) o una distribución uniforme simple $U(\pm\sqrt{3})$ (Ellegaard et al., 1991) extendida sobre el rango $\pm\sqrt{3}$.

Por último, en el caso de que los coeficientes de difusión no sean constantes y se diferencien los horizontales del coeficiente de difusión turbulenta vertical, tendremos que la ecuación será

$$\begin{aligned} \mathbf{X}(t_n) = & \mathbf{X}(t_{n-1}) + [\mathbf{v}(\mathbf{X}_{n-1}, t_{n-1}) \Delta t + \nabla \mathbb{K}(\mathbf{X}_{n-1}, t_{n-1})] \Delta t + \\ & + R_{ik} \sqrt{2\mathbb{K}^{*1/2}} \mathbf{Z}_{j,n} \sqrt{\Delta t} \end{aligned} \quad (3.68)$$

análoga a la expresión 2.46.

3.4 Implementación

La implementación consiste en determinar el algoritmo adecuado para resolver cada uno de los términos propuestos. A continuación se detalla cuál es el empleado en el modelo que aquí se presenta.

3.4.1 Campo de velocidades

En este estudio, las corrientes medias, mareales e inducidas por el viento se predicen simultáneamente usando un modelo hidrodinámico. Las ventajas de esta aproximación son que la interacción entre los diversos componentes del flujo están correctamente representados y que las leyes de conservación de la materia se verifican adecuadamente. Estos modelos tienen la capacidad de predecir la estructura temporal y espacial del campo de flujo y verifican las condiciones habituales exigidas en la simulación del movimiento de fluidos. Estos modelos tienen la facultad de representar

Velocidad terminal

con precisión la estructura espacial y temporal del campo de flujo. Sin embargo, existen una serie de inconvenientes para la modelización del derrame, ya que por ejemplo, no pueden representar adecuadamente los fuertes gradientes cerca de la superficie del mar (ASCE, 1996). La combinación de las deficiencias así como la gran cantidad de datos que se necesitan para inicializar y alimentar estos modelos relegan su uso a la elaboración de planes de emergencia, simplificando las predicciones cuando no hay tiempo para realizar tales cálculos.

3.4.1.1 Velocidad terminal

Dentro del campo de velocidades, resulta de fundamental importancia la adecuada parametrización de la componente vertical de la velocidad. Recordemos de nuevo que el petróleo presenta una particularidad respecto a un soluto en general, y es su flotabilidad positiva, de forma que se modifica la velocidad vertical. Para una partícula moviéndose con velocidad terminal estacionaria w_t en un campo gravitacional, la fuerza de arrastre, F_D , equilibra la diferencia entre peso del volumen desalojado y el empuje:

$$F_D = g\Delta\rho\frac{\pi}{6}d^3 \quad (69)$$

donde d es el diámetro de la partícula. Necesitamos determinar la expresión correcta de F_D . Para un flujo de Stokes ($Re \leq 1$), la fuerza de arrastre toma la forma

$$F_D = 6\pi\eta w_t r \quad (70)$$

Igualando las dos expresiones para F_D , tenemos que

$$w_t = \frac{4}{3}\pi r^3 g(\rho_o - \rho_w)\eta^{-1} \quad (71)$$

donde ρ_o , ρ_w son las densidades del petróleo y del agua, respectivamente.

Para $Re > 1$, la fuerza de arrastre depende del llamado coeficiente de arrastre, C_D ,

que a su vez depende de Re según las relaciones:

$$C_D = \frac{4 \Delta \rho g d}{3 \rho W_t^2} = \frac{4 \rho \Delta \rho g d^3}{3 \mu^2 Re_t^2} \quad (72)$$

donde Re_t es el número de Reynolds a esa velocidad terminal. La fuerza de arrastre es

$$F_D = 0.5 C_D \rho \pi r^2 W_t^2 \quad (73)$$

Para números de Reynolds comprendidos entre $750 < Re < 3.5 \times 10^5$, el coeficiente de arrastre toma el valor

$$C_D = 0.445$$

de manera que para este rango,

$$W_t = 1.73 \left[gd \frac{\Delta \rho}{\rho} \right]^{1/2} \quad (74)$$

y de aquí:

$$Re_t = 1.73 N_D^{1/2} \quad (750 < Re < 3.5 \times 10^5) \quad (75)$$

de donde:

$$N_D = C_D Re_t^2 = \frac{4 \rho \Delta \rho g d^3}{3 \mu^2} \quad (76)$$

N_D es llamado el **mejor número**.

Para otros rangos diferentes de Reynolds, o cuando se necesitan predicciones mas precisas, no son convenientes las relaciones entre el coeficiente de arrastre, C_D , y el número de Reynolds, Re , para determinar la velocidad terminal. El motivo es que se necesitaría un procedimiento interactivo. Es mejor expresar el número de Reynolds como función de N_D , que es independiente de la velocidad terminal. Las

Coefficientes de difusión horizontal

correlaciones para el número de Reynolds expresado en función de N_D se presentan en la tabla siguiente

Rango	Correlación
(A) $N_D \leq 73; Re \leq 2.37$	$Re = N_D/24 - 1.7569 \times 10^{-4} N_D^2 + 6.9252 \times 10^{-7} N_D^3 - 2.3027 \times 10^{-10} N_D^4$
(B) $73 < N_D \leq 580;$ $2.37 \leq Re \leq 12.2$	$\log Re = -1.7095 + 1.33438 \log N_D - 0.11591 (\log N_D)^2$
(C) $580 < N_D \leq 1.55 \times 10^7;$ $12.2 < Re \leq 6.35 \times 10^3$	$\log Re = -1.81391 + 1.34671 \log N_D - 0.12427 (\log N_D)^2 + 0.006344 (\log N_D)^3$
(D) $1.55 \times 10^7 < N_D \leq 5 \times 10^{10};$ $6.35 \times 10^3 < Re \leq 3 \times 10^5$	$\log Re = 5.33283 + 1.21728 \log N_D - 0.19007 (\log N_D)^2 - 0.007005 (\log N_D)^3$

Utilizando el diámetro de la partícula como dato de entrada en el programa, el cálculo de la velocidad terminal se realiza en función de las relaciones dadas en la tabla anterior.

3.4.2 Coeficientes de difusión

En la modelización que se ha llevado a cabo, se consideran coeficientes de difusión horizontales y verticales. Existen varias formas de aproximar cada uno de ellos. Como ya se expuso en el Capítulo 2, se pueden diferenciar los coeficientes verticales de los horizontales debido a su orden de magnitud, e implementarlos por separado. Se desarrollan a continuación.

3.4.2.1 Coeficientes de difusión horizontal

La introducción del concepto de difusividad turbulenta está basada en la hipótesis de que la mezcla a pequeña escala debida a las fluctuaciones turbulentas de la velocidad es análoga, aunque mucho más intensa, a la difusión molecular. En la aplicación de este concepto a los modelos de procesos de difusión en el océano, el coeficiente se usa generalmente para incorporar cualquier mezcla de gran escala que no está explícitamente incluida en los términos advectivos. Para estimar el valor

de este coeficiente para un problema en particular, es fundamental la intensidad de la turbulencia obtenida bien mediante medidas directas, bien procedente de las desviaciones estadísticas de las fluctuaciones de la velocidad o bien a partir del suministro o disipación de energía turbulenta, y la longitud de escala sobre la cual este proceso de mezcla tiene lugar.

Una forma general de expresar la difusividad turbulenta es, según se especificó en el Capítulo 2:

$$K_x = \tilde{u}l_x \quad (77)$$

donde \tilde{u} es la desviación estadística de las fluctuaciones turbulentas de la velocidad y l_x es la escala de longitud horizontal. Esta expresión de la difusividad turbulenta tiene la ventaja de incorporar conocimiento específico acerca de la intensidad de la turbulencia en las áreas de estudio. Puede ser más útil cuando el efecto de que la intensidad de mezcla varía dependiendo de las condiciones meteorológicas.

Para estos cálculos, se necesita escoger la longitud de escala apropiada para la malla que se esté utilizando. El concepto de longitud de escala de la turbulencia no está precisamente definido con claridad y está generalmente cuantificado indirectamente a través de medidas de otras cantidades turbulentas. Diversos autores llevaron a cabo medidas principalmente en flujos en la capa de mezcla y demostraron que, lejos del contorno, la longitud de escala tiende a un valor asintótico de 0.08 a 0.10 de la profundidad del canal; esto es un orden de magnitud más pequeño que el tamaño del remolino turbulento que se puede formar en el flujo. Se ha llegado a conclusiones similares en flujos turbulentos libres.

Extendiendo lo anterior a las aguas costeras, donde el campo de flujo se conoce en ciertos puntos de la malla, se puede decir que la mezcla horizontal interna dentro de las células de la malla se pueden representar usando una longitud de escala un orden de magnitud menor que el tamaño típico de la malla. De hecho, se han llevado a cabo algunas investigaciones con respecto al llamado coeficiente turbulento de escala sub-

Coefficientes de difusión horizontal

mallas. Esto se introduce en los diferentes esquemas para tener en cuenta el intercambio turbulento debido a remolinos más pequeños que el tamaño característico de la malla de integración. La longitud de escala usada para la evaluación de tales coeficientes de viscosidad turbulenta sub-malla se escribe como

$$l_x = c\Delta$$

donde Δ es un intervalo de la malla y c es una constante numérica, con un valor que varía desde 0.20 para turbulencia isotrópica a 0.10 en flujos con gradiente de velocidad (Christodoulou et al., 1976). Sin embargo, existen ciertas restricciones cuando se trata de modelización, ya que se ha demostrado que no es posible reproducir remolinos horizontales de diámetro menor que cinco veces el tamaño de la malla. En este caso, se debe incorporar un factor 5 en la ecuación anterior.

Con respecto a la dependencia del coeficiente de difusión turbulenta en relación a las fluctuaciones de la velocidad, se puede estimar un orden de magnitud usando valores tales como el 10% de la velocidad local. Otra alternativa es hacer uso de la hipótesis de la longitud de mezcla

$$\tilde{u} \propto \frac{\Delta u}{\Delta l_x} l_x$$

donde $\Delta u/\Delta l_x$ es el gradiente de la velocidad en una distancia l_x .

En un flujo bidimensional, el cociente anterior se expresa en términos de las derivadas de ambas componentes de la velocidad, y el coeficiente de difusión horizontal respecto al eje X se expresa como:

$$K_x = l_x^2 \sqrt{\phi}$$

donde ϕ es

$$\phi = 2 \left[\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right]^2 + 2 \left[\frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right] + \left[\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right] \quad (78)$$

La ecuación (3.78) permite un cálculo directo del coeficiente de difusión turbulento en términos del tamaño de la malla y los valores de las velocidades medias en los puntos nodales. Ésta ha sido la expresión elegida para implementar en el algoritmo los coeficientes de difusión horizontal.

Otra forma posible de expresar \tilde{u} es

$$\tilde{u} \propto \sqrt{e}$$

donde e es la energía turbulenta cinética. Sin embargo, se necesitan ecuaciones adicionales para el transporte y distribución de esta energía, lo que desaconseja su uso en la práctica.

Algunos autores utilizan el modelo de Okubo (1971) para relacionar el coeficiente de difusión horizontal turbulenta con la longitud de escala de la malla utilizada. Esto puede dar lugar, si las mallas son muy largas, que los coeficientes sean muy grandes (máximo de 100 m²/s). Okubo (1971) obtuvo una gran cantidad de datos de difusión en el océano; propuso como mejor ajuste a todos ellos la relación

$$K_x = 0.01 l^{1.15}, \quad 10^3 < l < 10^8 \text{ cm}$$

donde l es la longitud de escala de la malla, otra posible alternativa al cálculo de los coeficientes horizontales. También esta expresión se empleará en este trabajo.

3.4.2.2 Coeficientes de difusión vertical

Una vez que el petróleo se introduce en la columna de agua en forma de partículas, está sujeto a un movimiento dado por su propia flotabilidad -que tenderá a llevar a las partículas de vuelta a la superficie- y un movimiento aleatorio debido a la turbulencia en la vertical. La importancia del movimiento del petróleo subsuperficial está reflejada en el hecho de que en la modelización del movimiento de un derrame de petróleo se haya introducido la dimensión vertical (Al-Rabeh et al., 1989). Además, tal y como señala Ozmidov (1990), su correcta implementación es fundamental para

Coefficientes de difusión vertical

poder simular el movimiento global del petróleo.

El movimiento vertical queda definido por las ecuaciones vistas en el Capítulo 2 que reflejaban cómo el petróleo se mueve según un proceso determinístico y uno aleatorio. El paso determinístico viene dado por su velocidad terminal, mientras que el aleatorio viene en función de la turbulencia, parametrizada por el coeficiente de difusión turbulenta vertical. De hecho, uno de los mayores problemas en la modelización de la ecuación de advección-difusión es la determinación del coeficiente de difusión vertical. Aquí se dan varias aproximaciones para su cálculo.

Una forma de expresar la difusividad vertical turbulenta es, en términos de las características representativas de la turbulencia vertical (Christodoulou et al., 1976; Dimou y Adams, 1989)

$$K_z = \tilde{w} l_z \quad (79)$$

donde \tilde{w} es la desviación estándar de las fluctuaciones verticales de la velocidad y l_z es la escala de la longitud vertical, que es del orden de 0.08 a 0.1 de la profundidad de la capa para sistemas estratificados o de la profundidad total, h , si estamos en océano abierto poco profundo (Allen, 1982; Van Dam, 1994). Las fluctuaciones de la velocidad en la vertical son generalmente más pequeñas que las horizontales, pudiendo poner que $\tilde{w}/\tilde{u} \simeq 0.5$. donde \tilde{u} es la desviación estándar de las fluctuaciones horizontales de la velocidad y que, generalmente, se considera que es el 10% de la velocidad media \bar{u} para flujos con gradiente de velocidad en la vertical, como son los casos aquí se analizan. Se obtiene finalmente que:

$$K_z = 0.05 \bar{u} 0.08 h = 4.10^{-3} \bar{u} h \quad (80)$$

En esta fórmula, el efecto del viento se toma en cuenta implícitamente, esto es, a través de su contribución a la velocidad horizontal. Hay que tener en cuenta que el oleaje puede afectar significativamente a la difusión vertical cerca de la superficie (Allen, 1982; Van Dam, 1994).

Se puede relacionar la difusión turbulenta vertical con el campo de velocidades. Para un perfil logaritmico de velocidades, como los que se dan en canales abiertos, el coeficiente de difusión turbulenta vertical es (Christodolou et al., 1976):

$$K_z = \kappa u_* H \eta(1 - \eta) \quad (81)$$

donde κ es la constante de Von-Karman, u_* es la velocidad de arrastre en la pared, h es la profundidad total y η es la distancia desde la pared.

Para la región alejada de la pared, los mismos autores propone un valor constante dado por

$$K_z = 0.067 u_* h \quad (82)$$

que es, precisamente, el valor promedio de la distribución parabólica dada en la ecuación anterior, y que se puede considerar una buena aproximación.

Si el perfil es logarítmico, se puede relacionar la anterior ecuación con la velocidad media a través de la velocidad de arrastre. Si $u_* = 0.06 \bar{u}$, entonces la ecuación anterior queda

$$K_z = 4 \times 10^{-3} \bar{u} h \quad (83)$$

Para estados de mar de bajo a moderado, se puede utilizar la formulación empírica dada por (Ichiye, 1967)

$$K_{z,s} = 0.028 \frac{H_w^2}{T_w} \quad (84)$$

donde $K_{z,s}$ es el valor del coeficiente de difusión vertical en la superficie, H_w es la altura de la ola significativa y T_w su periodo. El oleaje moderado se puede considerar como un factor que justifica una distribución uniforme del coeficiente de difusión en

Coefficientes de difusión vertical

la capa superior. El valor del coeficiente propuesto por Ichiye es

$$K_z = K_{z,s} e^{-2\kappa z} \quad (85)$$

donde κ es el número de onda ($2\pi/L$, siendo L es la longitud de onda) de la ola significativa. Se puede relacionar esta ecuación con la velocidad del viento utilizando las relaciones obtenidas por Longuet-Higgins (1969) para un mar completamente desarrollado, $H = 1/4(W^2/g)$, $T = 2\pi W/g$ donde W es la velocidad del viento y g es la aceleración de la gravedad, lo que daría lugar a la siguiente formulación para $K_{z,s}$

$$K_{z,s} = 2.75 \times 10^{-3} \frac{W^3}{g}$$

Otra formulación dada por Ekman (Leibovich, 1975) relacionando el coeficiente con el viento está dado por:

$$K_z = 4.3 \times 10^{-4} W^2 \quad (86)$$

Davis y Jones (1996) relacionaron el coeficiente de difusividad vertical turbulenta con el campo de flujo usando una expresión del tipo

$$\varepsilon_z = \alpha(\chi, \phi, t) \Psi(\sigma) \quad (87)$$

donde α es una constante que varía con la posición horizontal (χ es la latitud y ϕ es la longitud) y el tiempo y $\Psi(\sigma)$ es un perfil fijo con $\sigma = (z + \zeta)/(h + \zeta)$ que es la coordenada vertical normalizada, donde h es la profundidad, y ζ es la sobreelevación del nivel del mar.

Con respecto al perfil de σ , Davis y Jones utilizan un perfil constante, o un perfil en donde, en el caso de flujo generado por el viento, se incrementa la turbulencia asociada con el oleaje rompiendo en superficie. El coeficiente decrece cerca del fondo sobre una altura $h_1 = \beta h$ siendo β un coeficiente del orden de 0.1 a 0.2.

A partir de un modelo de energía turbulenta y basado en observaciones hechas en las costas de Irlanda, Davis y Jones presentan una parametrización simple de la magnitud α de la forma:

$$\alpha = k_2(\bar{u}^2 + \bar{v}^2)h \quad (88)$$

donde k_2 es del orden de 2.5×10^{-3} y h es la profundidad del agua.

Una vez desarrolladas las expresiones que se han empleado en la implementación del modelo, se va a desarrollar en el próximo capítulo las características fijadas para la integración numérica del problema.

3.4.3 Condiciones iniciales

La representación de fuentes se pueden simular fácilmente en un modelo de camino aleatorio simplemente introduciendo partículas en el área de estudio (Dimou y Adams, 1993).

Como se ha explicado en capítulos precedentes, las fuentes se diferencian según un comportamiento temporal o espacial. Con respecto al comportamiento temporal, una fuente instantánea consiste en la liberación de una cantidad determinada de petróleo en un instante determinado, siguiendo su trayectoria a lo largo del tiempo. En cambio, una fuente continua consiste en la liberación de una cantidad de petróleo -que puede ser constante o variable-, cada intervalo de tiempo elegido de forma arbitraria (determinándose la intensidad de la fuente). Una fuente continua siempre se puede aproximar a una fuente instantánea cuando la intensidad de la fuente es muy grande. Los resultados que se obtienen con el uso de una u otra fuente son completamente diferentes.

Para el caso más simple, en donde el campo de velocidades es uniforme y estacionario, tendremos, que en el caso de una mancha de petróleo liberado a partir de una fuente instantánea se tiene en el tiempo $t = T$ la distribución de un mancha

Condiciones de contorno

que ha recorrido un camino medio dado por

$$S_{ins} = VT \quad (89)$$

Por contra, el uso de una fuente continua significa que cada tiempo Δt_l se libera una cantidad de petróleo determinado. Cada una de estas manchas, recorrerá un espacio de

$$s_i = V(T - i \Delta t_l) \quad i = 1, \dots, n \quad (90)$$

donde n es el número de manchas que se liberan. El espacio total recorrido por el conjunto de estas manchas será:

$$S_{con} = \sum_{i=0}^n s_i = \sum_{i=0}^n V(T - i \Delta t_l)$$

por lo que s_i , es el espacio recorrido por la mancha de petróleo i liberada en $t = i \Delta t_l$ se aproxima a s a medida que $\Delta t_l \rightarrow 0$, esto es, la intensidad de la fuente se aproxima a la instantánea.

Con respecto al comportamiento espacial; las fuentes pueden ser puntuales, que consisten en la liberación en un punto de un número determinado de partículas, o espacialmente distribuidas, que consisten en la colocación de las partículas en una línea (fuente lineal), en un plano o en un volumen, ya sea de forma aleatoria o siguiendo una distribución determinada (generalmente se elige la distribución gaussiana según Dimou et al., 1991). Las fuentes pueden ser instantáneas o continuas, independientemente de como se coloquen inicialmente en el espacio.

3.4.4 Condiciones de contorno

La implementación de las condiciones de contorno se refieren al comportamiento del petróleo en dichos contornos. En el capítulo teórico se vieron una serie de aspectos generales al respecto. Generalmente, las condiciones que se van a utilizar pueden ser

algunas de las descritas o simplemente una combinación de varias, principalmente la de Dirichlet y Neumann

3.4.4.1 Superficie

La mayoría de los modelos de camino aleatorio utilizan una condición de contorno reflectante en superficie, esto es, la partícula cuando llega a la superficie vuelve a la columna hasta una profundidad igual al espacio que hubiera recorrido si hubiera podido atravesar la superficie. Sin embargo, el tratamiento de condiciones reflectantes en superficie para partículas con flotabilidad positiva (como el petróleo) no representa el proceso real que sufre la partícula, ya que cuando la partícula sube a superficie, las condiciones para su vuelta a la columna de agua tienen que ser tales que la turbulencia sea superior a la fuerza debida a la flotabilidad. Además, la reagrupación de las partículas para formar una nueva mancha se vería disminuida en el caso de condición reflectante en superficie. Por ello, en esta aproximación, se aplica una nueva condición de contorno en superficie que llamaremos **semiabsorbente** y que consiste en que la partícula una vez que ha alcanzado la superficie puede volver a la columna de agua por dos mecanismos de intrusión: por dispersión mecánica debida al oleaje y/o por turbulencia oceánica o quedarse en superficie si no la afecta ninguno de dichos mecanismos.

3.4.4.2 Fondo

La condición en el fondo es una condición reflectante o de flujo cero ($\partial\Omega_3$) de tal forma que cuando la partícula tiene una trayectoria tal que tiende a cruzar el fondo, saldrá reflejada de nuevo hacia el dominio (columna de agua) moviéndose una distancia igual a la que hubiera tenido al atravesar el fondo (Véase al respecto la figura de condición reflectante en el capítulo precedente). El uso de la condición reflectante no representa el proceso de adsorción de las partículas a los sedimentos, que en la mayoría de los casos puede ser desestimado.

3.4.4.3 Océano abierto

El dominio en donde se calculan el campo de velocidades está rodeado de las células que constituyen el contorno abierto. Las partículas que lleguen a estas células o las atraviesen durante un intervalo temporal, se eliminarán de los posteriores cálculos. A este tipo de contorno se le denomina contorno de flujo normal ($\partial\Omega_4$).

3.4.4.4 Costa

La interacción petróleo-costa es uno de los procesos mas complicados de implementar, ya que va a depender de múltiples factores referidos, por un lado, al tipo de costa y de petróleo, y por otro, a las interacciones entre el petróleo y los sedimentos costeros. Las posibilidades que se incluyen aquí son una combinación de dos condiciones de contorno: condición Dirichlet ($\partial\Omega_1$) y condición de flujo cero ($\partial\Omega_3$). Se combinan de tal forma que cuando la partícula llegue a la costa, si su trayectoria es tal que tiende a atravesarla, no sale reflejada, sino que se deposita hasta que las corrientes advectivas y difusivas sean tales que se transporte a otra localización. De esta forma se consigue que las partículas de petróleo se comporten como partículas sedimentarias, ya que éstas están sujetas a las misma dinámica de deposición. Sin embargo, esta implementación no tiene en cuenta la interacción con los sedimentos de la costa, ni otros procesos que se dan en esta zona, como es su potencial incorporación a los sedimentos costeros, la penetración del petróleo en los sedimentos y la refluotación (véase al respecto la Figura 1.2).

3.4.5 Distribución de partículas

La distribución que Forrester (1971) encontró bajo la mancha del derrame que siguió al naufragio del *Arrow*, era tal que existía la misma cantidad de masa dentro de cada intervalo de tamaño utilizado. Posteriormente, Delvigne y Sweeney (1988) encontraron a partir de experimentos en laboratorio que el petróleo disperso seguía una distribución dependiente del tamaño de tipo logarítmico. Aunque la distribución

propuesta por Delvigne y Sweeney tiene una mayor base experimental, para una serie de comparaciones se utilizarán ambas distribuciones, junto con otra que llamamos Uniforme, que se caracteriza porque existe la misma cantidad de partículas para cada uno de los tamaños que se utilicen.

Los tamaños de partículas que se van a utilizar van desde 100μ a 1100μ , que coincide con el rango empleado en la mayoría de las modelizaciones (Elliot et al., 1986, 1992). La siguiente tabla recoge los cinco intervalos de tamaño definidos, su rango y el color que se le ha asignado para caracterizarlos en las gráficas que se muestran en la memoria.

Intervalo de Tamaño	Diámetro (10^{-6} m)	Color
1	100-200	
2	200-300	
3	300-500	
4	500-800	
5	900-1100	

Intervalos de tamaño para las partículas que se emplean en la simulaciones.

A continuación se describen cada una de las distribuciones.

3.4.5.1 Distribución Uniforme

Si se utiliza un único tamaño de partículas, la masa total de petróleo, M , se divide por el número de partículas que utilizamos, N . Si se utilizan diferentes tamaños de partículas, la aproximación es ligeramente diferente. La distribución uniforme consiste en utilizar el mismo número de partículas, N , para cada intervalo de tamaño, i , por lo que la masa total será la suma de las masas que ocupan las partículas para cada uno de los intervalos de tamaño utilizados, M_i ,

$$M = \sum_{i=1}^{ni} M_i \quad (91)$$

Distribución Forrester (1971)

donde n_i es el número total de intervalos de tamaño utilizado y M_i es

$$M_i = m_i N \quad i = 1, 2, \dots, n_i \quad (92)$$

Teniendo en cuenta que m_i es la masa de una partícula perteneciente al intervalo de tamaño i , dada por

$$m_i = \rho_o v_i \quad i = 1, 2, \dots, n_i \quad (93)$$

donde v_i es el volumen de las partículas dentro del intervalo de tamaño i , dado por el volumen de una esfera, la masa total de petróleo representado por N partículas de tamaño i , es

$$M_i = m_i N = \rho_o v_i N \quad (94)$$

y la masa total se puede poner finalmente como,

$$M = \sum_{i=1}^{n_i} M_i = \rho_o N \sum_{i=1}^{n_i} v_i \quad (95)$$

3.4.5.2 Distribución Forrester (1971)

En esta distribución la masa es la misma para cada intervalo de tamaño. En este caso, tendremos que

$$M_i = m_i N_i \quad i = 1, 2, \dots, n_i \quad (96)$$

donde M_i es la masa para cada uno de los intervalos de tamaño. La masa total de petróleo es pues, la suma de la masa ocupada por cada uno de los intervalos de tamaño:

$$M = \sum_{i=1}^{n_i} M_i \quad (97)$$

teniendo en cuenta que $M_1 = M_2 = \dots = M_{n_i} = m$, entonces, la masa total de petróleo que estamos simulando será:

$$M = n_i m \quad (98)$$

3.4.5.3 Distribución Delvigne y Sweeny (1988)

La distribución dada por Delvigne y Sweeny sigue una relación exponencial entre el número de partículas y el diámetro de las partículas:

$$N_d \sim d^{-2.30} \quad (99)$$

donde N_d es el número de partículas en un intervalo unidad determinado por $(d - 1/2 \Delta d, d + 1/2 \Delta d)$, siendo d es el diámetro de la partícula. La Figura 3.16 muestra el intervalo de tamaño y el número de partículas.

3.4.6 Número de partículas

La analogía que entre el proceso de difusión-advección de soluto con la aproximación de camino aleatorio consiste en representar una masa conocida de soluto M con un número finito de N partículas, número elegido de forma arbitraria. En este sentido, debido a la naturaleza finita de N , los resultados referentes al cálculo de la concentración pueden dar lugar a un ruido alrededor de la solución real según se expuso en el Capítulo 2. Para cuantificar este ruido, se utiliza el error normal estándar, ε , definido por Tompson y Gelhar (1990) como

$$\varepsilon = \frac{M}{\sqrt{Nl_s}} \quad (100)$$

El ruido, ε , se reduce por un factor de dos para un incremento en un factor de cuatro del número de partículas N .

Aunque los mismos autores recomiendan así mismo el uso de 10^4 o 10^5 partículas,

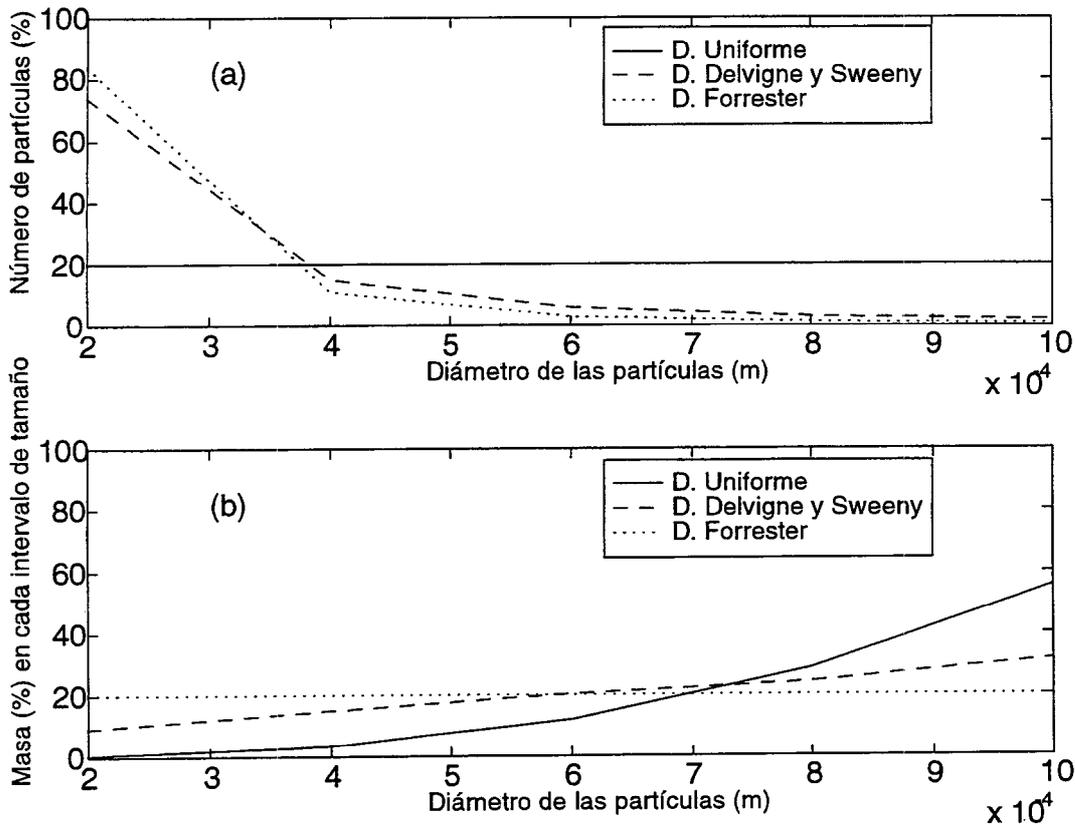


Figura 3.16. (a) Número de partículas según tamaño y (b) masa de petróleo que ocupan las partículas de cada intervalo de tamaño para cada distribución de partícula utilizado.

en este estudio se utilizan 8000 partículas al comprobarse que se obtiene una buena aproximación a la solución analítica (Grisolía-Santos, 1994)

3.4.7 Dispersión mecánica

En esta modelización se va a representar la dispersión mecánica por oleaje utilizando la metodología aplicada por Delvigne (1991), en la cual se calcula la cantidad de petróleo que se dispersa en la columna de agua en base al estado del mar (ec. 3.76). Para aplicar dicha formulación al estudio, hay que tener en cuenta que se ha representado la mancha de petróleo por partículas de diferente tamaño, por lo que la ecuación 3.59 debe expresarse en función de la cantidad de masa que se desprendería

de la mancha según el intervalo de tamaño

$$Q_r(d) = C(0) D_{ba}^{0.5} S_{cov} F_{wc} d_o^{0.7} \Delta d \quad (101)$$

donde $Q_r(d)$ es la proporción de entrada de partículas de petróleo de tamaño d ($d - \Delta d, d + \Delta d$) por unidad de superficie ($kg/m^2 s$); S_{cov} es la fracción de superficie del mar cubierta por petróleo ($0 \leq S_{cov} \leq 1$); F_{wc} es la fracción normalizada de superficie del mar en la que están rompiendo las olas por unidad de tiempo (s^{-1}) cuyo cálculo se hace basándose en la relación para olas rompientes tipo *spilling* en agua profunda

$$F_{wc} = C_b \frac{(U_w - U_{wi})}{T_w} \quad (102)$$

donde T_w es el periodo de ola, U_w es la velocidad del viento, U_{wi} es la velocidad del viento a la cual las olas empiezan a romperse ($\approx 5 m/s$) y C_b es una constante ($\approx 0.032 s/m$).

Con respecto a la energía de disipación por unidad de superficie para una ola que rompe, D_{ba} , se utiliza la siguiente relación (Delvigne y Sweeney, 1988):

$$D_{ba} \approx 0.0034 \rho_w g H_{rms}^2 \quad (103)$$

donde H_{rms}^2 es la altura de ola significativa en el campo de olas, ρ_w es la densidad del agua y g es la aceleración debida a la gravedad.

La constante de proporcionalidad $C(0)$ se define por

$$C(0) = 4450 \left(\frac{\mu}{\rho_o} \right) \quad (104)$$

donde μ es la viscosidad del petróleo (cP) y ρ_o es la densidad del petróleo (g/cm^3).

A partir de las ecuaciones anteriores, se deduce que se dispersará mayor cantidad de petróleo a medida que aumenta el tamaño de las partículas pero no sucederá lo mismo con su número, obviamente.

Las unidades de Q_d son $kg/m^2.s$, por lo que la cantidad de petróleo que se dispersa

Dispersión mecánica

de una mancha superficial de petróleo de superficie A (m^2) en un intervalo de tiempo dt , $M_e(kg)$ viene dado por

$$M_e = A dt \int_{d_{\min}}^{d_{\max}} Q_d \partial d \quad (105)$$

La condición lógica que se debe cumplir en este proceso es que la masa total de petróleo que se introduce en la columna por intervalo temporal, M_e , no puede ser mayor que la masa de petróleo en superficie, M_s , esto es, $M_e \leq M_s$.

En la aproximación que se está utilizando, la cantidad total de petróleo está representada por una distribución de partículas determinada, por lo que la formulación anterior se tiene que modificar para poder tratar la dispersión. La cantidad de petróleo que se dispersa para las partículas de tamaño d , $M_e(d)$, se puede expresar como:

$$M_e(d) = A_t(d) dt Q_d \quad (106)$$

En este caso, $A_t(d)$ se representa por

$$A(d) = nps(d) A_d \quad (107)$$

donde A_d es el área que ocupa una partícula de tamaño d , esto es, $A_d = \pi r_d^2$ (m^2), donde r_d es el radio de dichas partículas y nps es el número de partículas de tamaño d en superficie. El número total de partículas que están en la superficie y que serán introducidas en la columna de agua es

$$N_e(d) = \frac{M_e(d)}{m_d} \quad (108)$$

donde m_d (Kg) es la masa de las partículas de tamaño d .

Capítulo 4. Aplicación de un modelo de camino aleatorio al derrame de petróleo producido por el *North Cape*

4.1 Introducción

En enero de 1996, durante una tormenta, el carguero *North Cape* naufragó en la zona próxima a la costa del sur de Rhode Island (Estados Unidos), liberando aproximadamente 828.000 galones de petróleo fuel. La mayoría del petróleo se mezcló en la columna debido al fuerte oleaje, dando lugar a una elevada concentración en la columna de agua de componentes tóxicos en la zona costera. Para simular este derrame y su evolución, se ha hecho uso de las siguientes condiciones:

Campo de velocidades

En el presente estudio, se utiliza el modelo COASTMAP (Spaulding et al., 1995; Spaulding et al., 1996). Se trata de un modelo hidrodinámico desarrollado para la zona de estudio por ASA (Applied Science Associates). Es un modelo tridimensional de circulación (no estacionario) que usa un sistema de coordenadas esféricas para sistemas costeros y estuarios, en donde las ecuaciones tridimensionales de conservación de masa y momento se resuelven en dicho sistema de coordenadas. Las variables

Introducción

dependientes e independientes se transforman a partir del dominio físico (coordenadas esféricas) al dominio de cálculo (coordenadas curvilíneas, Figura 4.17).

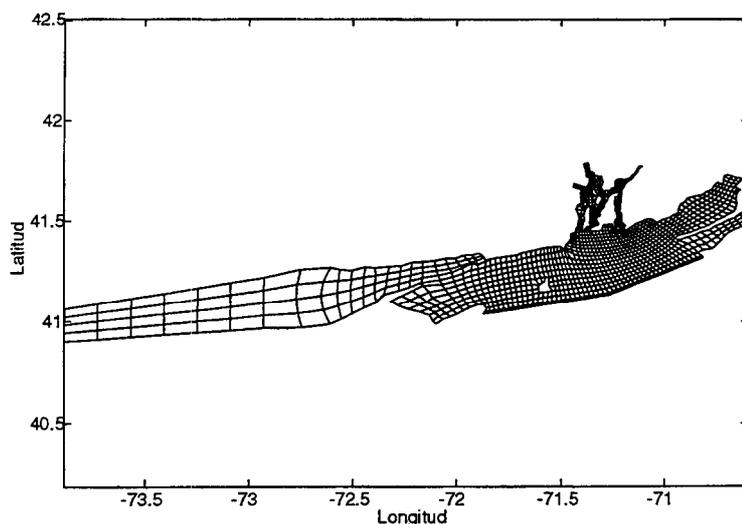


Figura 4.17. Malla de la costa de Rhode Island (EEUU) en donde se produjo el derrame de petróleo *North Cape* en enero de 1996.

El modelo emplea una metodología de división de la solución. En el modo exterior (promediado verticalmente), las elevaciones en la superficie del agua se resuelven usando un algoritmo semiempírico para facilitar la restricción del intervalo temporal, normalmente impuestas por las ondas gravitacionales en aguas poco profundas. En el modo interior (estructura vertical), el flujo se predice por un método explícito excepto que el término de difusión vertical es resuelto implícitamente. Tanto los modos exterior e interior se calculan usando el mismo intervalo temporal. Los cálculos fueron realizados sobre una malla espacial irregular, adaptada a las condiciones de la zona. El tiempo se discretiza usando un esquema de tres niveles. Las viscosidades verticales turbulentas se pueden especificar o bien obtener a partir de un modelo de energía turbulenta cinética unidimensional. Dicho modelo y los términos de disipación se resuelven implícitamente permitiendo mayores intervalos temporales. La condición

de contorno en el fondo se especifica usando una ley de pared de tipo cuadrático. El modelo se ha probado en un gran número de aplicaciones en áreas costeras complejas (Anderson et al. 1993; Spaulding et al, 1995, 1996). La aplicación del modelo para predecir el movimiento de petróleo siguiendo boyas, en tiempo real, a partir de dos derrames experimentales en la Bahía de Narragansett fue presentada por Spaulding et al. (1995,1996). Se realizaron diferentes pruebas de sensibilidad para mostrar la influencia en las trayectorias descritas a causa de las variaciones en parámetros del modelo (factor/ángulo de arrastre, coeficientes de dispersión) y la elección de los diferentes flujos hidrodinámicos sobre las trayectorias predichas.

Coefficientes de difusión

Con respecto a la obtención de los coeficientes de difusión, el coeficiente de difusión vertical y horizontal se tomaron como $10m^2/s$ y $0.01m^2/s$ en la dirección vertical. Estos son valores razonables basándonos en Okubo (1971).

Elección del intervalo temporal

En las simulaciones que se presentan aquí, el intervalo temporal se elige de tal forma que el número de Courant no sea mayor de uno (Cap. 2). Para que además se pueda utilizar el mismo intervalo temporal para todas las partículas, se determina la mayor velocidad del campo de velocidades dado en el dominio, y la longitud de célula menor, de forma que en función de estas dos, se puede ajustar el paso temporal. Se repite el mismo paso cada hora, ya que las velocidades varían en ese intervalo. Este espacio temporal corresponde al método 1 que se vió en el Capítulo 2, de tal forma, que se sigue a cada una de las partículas durante un periodo de tiempo T , obteniendo los resultados acerca de la distribución de las partículas en dicho tiempo.

A continuación se va a estudiar el comportamiento del modelo que se ha desarrollado en este trabajo con respecto a los procesos físicos descritos anteriormente, de tal forma que mediante su aplicación unidimensional se mostrará la influencia de

Introducción

la dispersión mecánica por oleaje rompiente sobre la introducción de petróleo en la columna como mecanismo dominante sobre la turbulencia oceánica. Se mostrará así mismo la validez del modelo cuando se impone una condición en superficie denominada *semiabsorbente*. Para ello se compararán los resultados obtenidos en la simulación con un modelo teórico probabilístico de una barrera de contención.

En la aplicación bidimensional del modelo de camino aleatorio, supuesta la condición de un campo de velocidad estacionario, se estudiará la influencia de la distribución de partículas y los rangos de tamaño en la expansión horizontal de una mancha, introduciendo un coeficiente de dispersión turbulenta en función del tiempo de mezcla definido para cada una de las distribuciones.

Por último, se llevará a cabo la aplicación del modelo tridimensional al derrame de petróleo *North Cape*, estudiando la validez del modelo y la influencia de fuentes temporales y espaciales en los resultados así como la distribución de partículas utilizadas.

Parte I

Aplicación unidimensional: estudio de la dispersión mecánica por oleaje rompiente.

4.2 Introducción

El petróleo en la superficie del mar está expuesto al viento y al oleaje, que van a provocar su ruptura en partículas de diferente tamaño y su introducción en la columna de agua. Esta dispersión vertical de petróleo por turbulencia oceánica es uno de los mayores problemas en la contaminación oceánica por petróleo por varias razones. Una de las mas importantes está relacionada con las operaciones de contención y eliminación física del petróleo superficial por medio de barreras -que limitan la mancha de hidrocarburos- y los llamados desnatadores, aparatos que eliminan mecánicamente el petróleo de la superficie del agua. Estas técnicas de limitación y control de las manchas de petróleo son las que se usan con mayor frecuencia en el control de la contaminación oceánica por petróleo. El éxito de estos aparatos está directamente relacionado con la acumulación de petróleo en superficie, por lo que la dispersión del petróleo por turbulencia oceánica que da lugar a una disminución del petróleo superficial, implicaría una menor eficiencia de los aparatos de contención y eliminación y, por lo tanto, constituye uno de los datos necesarios para decidir el uso de estos medios de control (Leibovich, 1975; OTI, 1993).

Introducción

El transporte del petróleo que se ha introducido en la columna viene dado por la combinación de un movimiento vertical resultante de su flotabilidad -que tiende a llevar a las partículas a la superficie- junto con un movimiento caótico debido a la turbulencia oceánica, combinado con el transporte horizontal por corrientes oceánicas. El resultado es que el petróleo que se ha dispersado de la superficie en forma de partículas, puede pasar por debajo de la barrera debido a las corrientes horizontales y reagruparse en superficie formando nuevas manchas en lugares alejados de sitio en donde se ha desplazado toda la maquinaria de contención y limitación del petróleo. Este tipo de contaminación, que se presta en ocasiones a ser denominada contaminación fantasma ya que aparece en lugares insospechados, es uno de los mayores problemas que se encuentran a la hora de predecir los efectos contaminantes de un derrame de petróleo en el mar. Así, durante los días que siguieron al naufragio del petrolero *Braer*, en las islas Shetland en enero de 1994, el petróleo subsuperficial que fué dispersado e introducido en la columna de agua por el oleaje, apareció en lugares que no habían sido previstos en base a los modelos que se utilizaron durante dicho evento, siendo imposible, por tanto, su recogida y eliminación física (Proctor et al., 1994; Turrel, 1994; ESGOSS, 1994). Por otro lado, se ha puesto en entredicho la conveniencia del uso de dispersantes artificiales que incrementan la dispersión del petróleo, ya que aunque lo eliminan de la superficie, pueden ocasionar efectos negativos sobre la biología. El efecto es particularmente grave cuando la dispersión horizontal, asociada generalmente con la vertical en flujos con gradiente de velocidad, puede inhibirse, incrementándose esta gravedad en aguas poco profundas (Leibovich, 1975; OTI, 1993).

Debido a la importancia del movimiento vertical del petróleo en la predicción del movimiento global de la mancha de petróleo, el principal objetivo de este análisis consiste en la simulación de los procesos verticales de dispersión de petróleo superficial como primer paso para la modelización tridimensional de la dinámica de una mancha de petróleo. El trabajo va a consistir en un estudio de la dispersión mecánica por oleaje rompiente y su posterior movimiento en la columna de agua, procesos que

sufre el petróleo en la vertical. Para ello se modelizará este proceso matemáticamente mediante la metodología de camino aleatorio.

4.3 Método y aplicaciones

En esta sección se aplica la modelización de la dispersión mecánica por oleaje rompiente a un caso teórico. La dispersión mecánica dará lugar a partículas de diferente tamaño que se moverán en la vertical. El supuesto del que se parte es que la mancha está delimitada por una barrera de contención. Los resultados se contrastarán con los datos que proporcionó el derrame del *North Cape*, que se produjo en las costas norteamericanas en enero de 1996. En los siguientes apartados, se tratará de las condiciones que van a ser comunes para ambas aplicaciones.

4.3.1 Procesos de entrada de petróleo en la columna de agua

El proceso de entrada de petróleo en forma de partículas en la columna de agua se debe a la dispersión mecánica, pero también la turbulencia oceánica puede empujar estas partículas ya formadas a partir de la mancha a la columna de agua (Leibovich, 1975). En general, se van a comparar ambas aproximaciones: aquella en la que la entrada de petróleo se debe únicamente a la dispersión mecánica y aquella en la que se combinan ambos mecanismos de entrada: el debido a la turbulencia oceánica y el de dispersión mecánica. De esta forma, se estudia la influencia de la turbulencia como proceso de entrada de petróleo en la columna de agua para diferentes condiciones.

Por otro lado, la propia turbulencia creada por el oleaje que rompe sobre la mancha, va a propulsar a las partículas hasta una profundidad, z_i , que en nuestro modelo escribimos como

$$z_i = R]_0^1 1.5 H_b \quad (109)$$

donde $R]_0^1$ es un número aleatorio entre 0 y 1 y H_b es la altura del oleaje rompiente, la mitad de la altura de ola significativa, H_s (Johansen 1982, 1992). De esta forma, la entrada de las partículas en la columna se hace de forma aleatoria.

4.3.2 Fuente inicial

La fuente inicial que se va a utilizar es del tipo instantáneo puntual, que consiste en la liberación en un punto de un número determinado de partículas. Esta distribución inicial de partículas puede ser aleatoria o seguir una distribución determinada (Dimou et al. (1991)). En los casos que vamos a tratar las partículas se van a colocar de forma aleatoria en superficie, esto es, entre $z = 0$ y $z = 0.1$ m. La distribución, así como el número de partículas a introducir, concuerdan con las que se han especificado en secciones previas.

4.3.3 Coeficiente de difusión vertical

Para el estudio que se va a realizar, el coeficiente de difusión vertical se considera constante e igual a 0.01 m²/s. Sólo se considerará variable para estudiar el efecto que tiene el incremento de la turbulencia en la superficie en la dispersión del petróleo. Se pretende de esta forma, centrar el estudio en el movimiento global del petróleo en la vertical, minimizando los efectos que la variación de este coeficiente tendría en el movimiento del petróleo. Para hacer esta simplificación, se tendrá en cuenta que la variación de la turbulencia oceánica en la vertical afectará principalmente a la expansión horizontal de la mancha, fundamentalmente en aquellos flujos con gradiente vertical de velocidad (Ozmidov, 1990).

4.4 Aplicación a un caso teórico: Barreras de contención

Las barreras de contención se usan para delimitar la mancha superficial de petróleo, y son fundamentales en el control de derrames de petróleo. Un modelo conceptual elemental es una barrera plana colocada verticalmente en el agua. Este tipo de barreras están sujetas a una serie de fallos a la hora de retener el petróleo. Uno de ellos se debe a la pérdida de petróleo superficial debido a la dispersión oceánica, la cual da lugar a que parte del petróleo se pierda en la columna. La dispersión vertical, ya sea debida al oleaje rompiente o por turbulencia oceánica, constituye uno de los principales temas de estudio en la contaminación por petróleo. En primer lugar, la dispersión de petróleo en forma de partículas muy pequeñas es un proceso de limpieza natural y que generalmente se obtiene añadiendo un dispersante; la segunda razón se debe a que el éxito en la eliminación física del petróleo en superficie por medio de los llamados desnatadores depende de dicha dispersión. Es, por lo tanto, necesario para poder utilizar ambos métodos combinados (contención y eliminación física) que el petróleo se concentre en la superficie, por lo que la mezcla vertical turbulenta de petróleo será un obstáculo para la eliminación mecánica de una mancha de petróleo. Así, la información relacionada con esta mezcla vertical es un dato necesario para poder decidir si continuar o terminar con las operaciones de limpieza en el mar (Leibovich 1975, 1976; OTI 1993).

En este apartado, se desarrolla un modelo teórico simple de mezcla turbulenta de petróleo. El resultado es una distribución probable con la profundidad de una partícula de petróleo de tamaño determinado para diferentes condiciones medioambientales. Se conseguirá haciendo hipótesis acerca de la turbulencia, de tal forma que el modelo se relacione cuantitativamente con la velocidad del viento como la única condición medioambiental impuesta al modelo. Se discutirá la practicidad de utilizar la barrera de contención en la mancha en base a los resultados del modelo.

4.4.1 Modelo teórico

Se libera una partícula de petróleo con velocidad cero a una profundidad h bajo la superficie (que se define en $z = 0$). La partícula se mueve con una velocidad constante relativa al agua que la rodea. Esta velocidad se iguala a la velocidad terminal de una partícula de petróleo a través de aguas calmas y se denota por $-W_t$. La velocidad del agua a través de la cual la partícula de petróleo asciende, es un proceso aleatorio $w'(t)$ con media cero. Así, la posición de una partícula de petróleo se describe mediante

$$\frac{dz}{dt} = w' - W_t, \quad z \rightarrow 0 \quad (110)$$

con $z(0) = h$. Si ponemos la siguiente relación sin imponer la restricción de que z sea positiva

$$Z = z + W_t t - h \quad (111)$$

la solución a la ecuación 1 es

$$Z = \int_0^t w' dt \quad (112)$$

La turbulencia oceánica se supone estacionaria. Consecuentemente, se puede demostrar que Z es una función gaussiana (Leibovich, 1975). La distribución de probabilidad de Z está por lo tanto descrita por su varianza y su expresión es:

$$\begin{aligned} \overline{Z^2} &= 2t \int_0^t \left(1 - \frac{\tau}{t}\right) \overline{w'(t+\tau) w'(\tau)} d\tau \\ &= 2t K_z(t) \end{aligned} \quad (4.113)$$

La barra indica que es un promedio temporal. La función $K_z(t)$ definida arriba se aproxima a un valor definido igual a $\overline{w'^2}$ veces la escala integral de la turbulencia para valores largos de tiempo.

Ya que Z es gaussiana, la densidad de probabilidad de z es

$$f(z, t) = [4\pi t K_z(t)]^{-1/2} \exp [-(z + W_t t - h)^2 / 4t D_z(t)] \quad (114)$$

Este resultado no discrimina entre valores positivos o negativos de z . Eliminamos los valores negativos de z mediante la siguiente densidad condicional

$$f(z, t; z \geq 0) = \frac{f(z, t)}{\int_0^t f(z, t) dz} \quad (115)$$

donde el denominador será la función de error complementaria (Leibovich, 1975) y que en el límite del tiempo, cuando $t \rightarrow \infty$, $K_z(t) \rightarrow K_z(\infty)$ y por tanto,

$$f_\infty(z) = \lim_{t \rightarrow \infty} f(z, t; z \geq 0) = \frac{W_t}{2 K_z(\infty)} \exp [-W_t z / 2 K_z(\infty)] \quad (116)$$

La densidad de probabilidad límite dada en la ecuación anterior es independiente de la profundidad a la cual se ha liberado la partícula, h , y depende sólo del parámetro ν , definido como:

$$\nu = \frac{W_t}{2 K_z(\infty)} \quad (117)$$

La función será por tanto,

Estimación de $K_z(\infty)$

$$\begin{aligned} f_{\infty}(z) &= \{ \nu e^{-\nu z}, z \geq 0 \\ &= 0, z < 0 \end{aligned} \quad (4.118)$$

4.4.2 Estimación de $K_z(\infty)$

El valor del coeficiente de difusión vertical turbulenta se calcula en base a las ecuaciones dadas por Ichiye (1967)

$$K_z = K_{z,s} e^{-2\kappa z} \quad (119)$$

donde κ es la constante de Von Karman, z es la profundidad y $K_{z,s}$ es el valor del coeficiente de difusión vertical en la superficie descrito por

$$K_{z,s} = 0.028 \frac{H_w^2}{T_w} \quad (120)$$

donde H_w es la altura de la ola significativa y T_w su periodo.

Recordemos que, dado que por las características del movimiento que se analiza, interesa el valor en los primeros metros, por lo que se va a utilizar sólo el valor de $K_{z,s}$. Según se ha visto en la introducción general de este capítulo, teniendo en cuenta las relaciones de Longuet-Higgins (1969) para un mar completamente desarrollado, llegamos a la expresión

$$K_{z,s} = 2.75 \times 10^{-3} \frac{W^3}{g}$$

con g como aceleración debida a la gravedad. La tabla siguiente muestra la relación de los valores obtenidos de $K_{z,s}$ para las diferentes velocidades del viento utilizadas.

W (m/s)	5	10	15	20	25	30
$K_{z,s}$ (m ² /s)	3.6×10^{-3}	2.8×10^{-2}	9.5×10^{-2}	0.23	0.44	0.76

4.4.3 Límite operacional para el control de un derrame

Tanto las barreras de contención de una mancha de petróleo como los desnatadores funcionan sólo hasta cierta profundidad, llamada *profundidad de captura*, por debajo de la cual no se puede recoger o contener el petróleo. La especificación de la misma depende del diseño de las barreras. La mayoría de los desnatadores funcionan sobre sólo los primeros centímetros de la superficie del agua.

Para estimar las consecuencias de la dispersión vertical sobre este tipo de operaciones, fijamos un criterio de efectividad basado únicamente en la profundidad de captura, aunque pueden existir otros factores delimitantes. La máxima profundidad de captura de la barrera de contención más eficiente es de 1.5 m (Leibovich 1975, 1976; OTI, 1993) siempre y cuando esta barrera se mantenga totalmente vertical y extendida y en perfecta armonía con el movimiento del agua. El criterio de efectividad con el que se trabajará es que el 50% del petróleo esté por encima de la profundidad de captura de los desnatadores. Esta profundidad se fija generalmente en 1 m.

La probabilidad de que una partícula con velocidades terminal y para un valor del viento dado esté dentro de un metro de la superficie del agua es

$$P\{z \leq 1 m\} = \int_0^1 f_{\infty}(z) dz = 1 - e^{-\Gamma} \quad (121)$$

donde

$$\Gamma = v_{\max} \times 1 m \quad (122)$$

4.4.4 Casos de estudio

Se van a liberar un total de 8000 partículas para cada intervalo de tamaño a una profundidad h y se van a seguir durante tres días para poder comparar los resultados numéricos con los teóricos. Esto se hace con seis condiciones medioambientales diferentes, que como se dijo anteriormente, vienen dadas únicamente por la velocidad del viento. Los resultados numéricos se utilizan para calcular para cada intervalo la probabilidad numérica de que una partícula perteneciente a ese intervalo de tamaño esté en un metro de profundidad. Las simulaciones cumplen tres supuestos diferentes:

- a) La dispersión viene dada simplemente por la turbulencia oceánica.
- b) La dispersión está representada por la acción conjunta de la turbulencia oceánica y la dispersión mecánica debida al oleaje rompiente según Delvigne y Sweeny (1988)
- c) La dispersión está dada únicamente por la dispersión mecánica debido al oleaje.

4.4.5 Resultados y discusión

Los resultados teóricos muestran cómo la probabilidad de que una partícula esté a un metro de profundidad disminuye a medida que aumenta la velocidad del viento y la turbulencia oceánica. Con respecto al tamaño de las partículas, la probabilidad disminuye a medida que disminuye el tamaño (Figura 4.18).

Los resultados obtenidos a partir de la simulación de la dispersión dada únicamente por la turbulencia oceánica se aproximan a los teóricos (Figura 4.19).

Las probabilidades obtenidas a partir de simular la entrada de petróleo en la columna a partir de la dispersión mecánica por oleaje rompiente junto con la turbulencia oceánica (Figura 4.20) aunque se aproximan a los teóricos, obviamente las probabilidades son menores para todos los tamaños debido a la influencia de la dispersión mecánica por oleaje rompiente.

Sin embargo, las probabilidades obtenidas únicamente con la dispersión mecánica como proceso de entrada de petróleo en la columna (Figura 4.21) no son realistas. Como se observa, para las velocidades del viento inferiores a 15 m/s , las

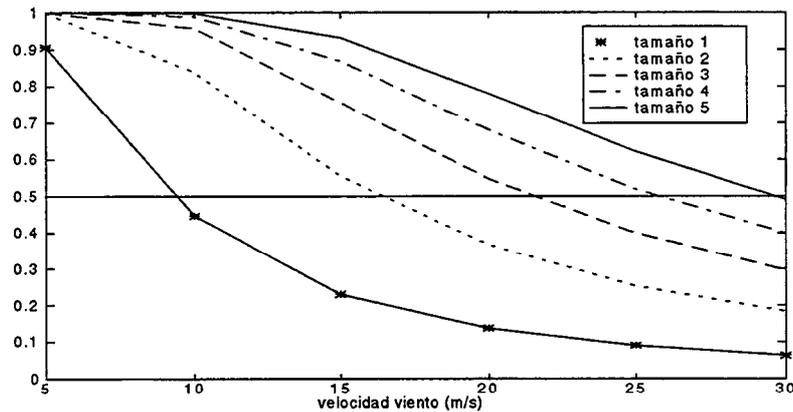


Figura 4.18. Probabilidad de que una partícula de petróleo esté en el metro superior de la superficie oceánica para diferentes tamaños de partículas.

probabilidades tienden a disminuir, pero aumentan para velocidades del viento iguales o superiores a 15 m/s independientemente del tamaño de la partícula. Esto se puede explicar en base a que el oleaje actúa sólo sobre el petróleo que está en superficie ($0 \leq z \leq 0.1 \text{ m}$), y como muestra la Figura 4.22, la profundidad media de las partículas para cada uno de los intervalos de tamaño utilizado es mayor del límite superior de la profundidad sobre la que actúa el oleaje, que se ha delimitado en dicha gráfica por una línea recta. Al aumentar la velocidad del viento, aumenta así mismo la turbulencia en la columna, parametrizada por el coeficiente vertical de difusión, y, consecuentemente, las partículas permanecen en la columna en donde el oleaje no las puede afectar.

La distribución inicial de partículas según tamaño es fundamental en la evolución

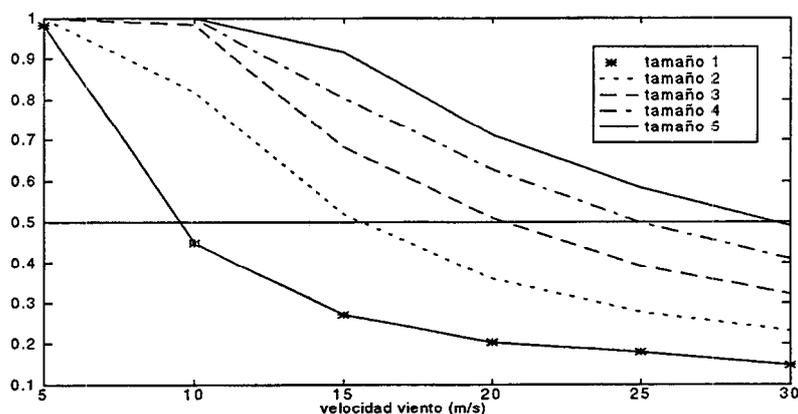


Figura 4.19. Probabilidad de que una partícula esté en el metro superior de la superficie oceánica en función de la velocidad del viento. La dispersión de la mancha superficial de petróleo viene dada únicamente por la turbulencia oceánica como proceso de entrada de petróleo en la columna.

del petróleo en superficie (Leibovich 1975, 1976; Johansen, 1982; Elliot et al., 1986; Elliot, 1991; Johansen, 1992). Esto se refleja en las Figuras 4.23, 4.24 y 4.25 en donde se ha representado la masa que permanece en superficie para las diferentes condiciones medioambientales utilizadas, que son función de la velocidad del viento. A medida que la velocidad del viento aumenta, la proporción de masa en superficie disminuye para cada una de las distribuciones utilizadas, lo que corresponde con la disminución que se da para las partículas independientemente del tamaño. La variación entre la masa superficial con respecto a la distribución de partículas según tamaño refleja la variación del número de partículas en cada intervalo de tamaño usado; así, la distribución que tiene un mayor número de partículas del tamaño menor

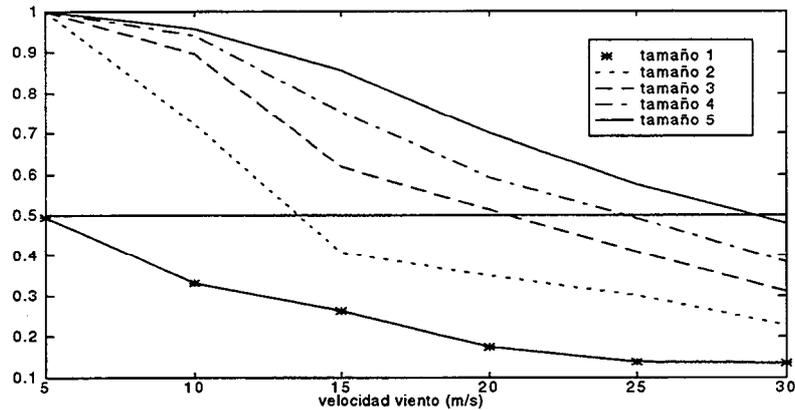


Figura 4.20. Probabilidad de que una partícula esté en el primer metro de la superficie oceánica en función de su tamaño y de la velocidad del viento. La dispersión se debe tanto al oleaje como a la turbulencia oceánica.

(llamado intervalo de tamaño 1), y por lo tanto mayor masa de petróleo formada por dichas partículas, es la que mayor masa tendrá en la columna (Distribución Forrester), mientras que la distribución con menor número de partículas o masa menor de petróleo en partículas pertenecientes al intervalo de tamaño 1, dispersará una menor cantidad de masa.

Con esta aplicación de un modelo de camino aleatorio a un ejemplo simple, se ha intentado demostrar la importancia del proceso de entrada de petróleo en la columna, que va a disminuir la eficacia en la contención y recogida de petróleo superficial. Además, teniendo en cuenta que las condiciones que se han aplicado para la simulación de estos procesos son estacionarias, la mejor representación del

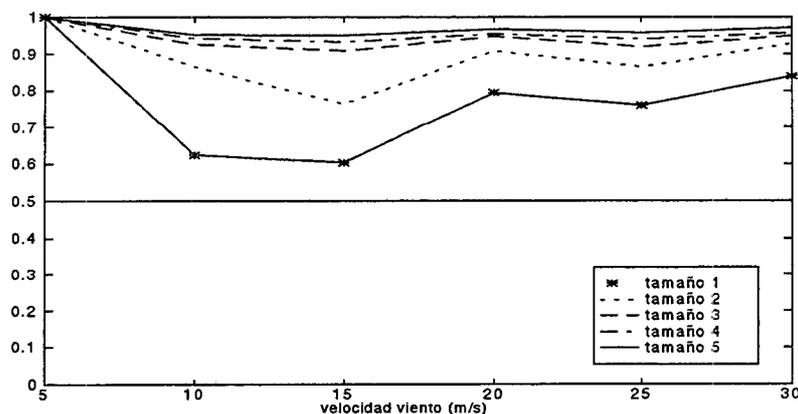


Figura 4.21. Probabilidad de que una partícula esté en el primer metro de la superficie oceánica en función de su tamaño y de la velocidad del viento, cuando la dispersión se debe únicamente a la debida al oleaje que rompe sobre la mancha.

proceso de entrada de petróleo en la columna es aquella en el que se debe a una combinación de ambos factores: el debido a la turbulencia oceánica y la entrada de petróleo dada por la dispersión mecánica por oleaje. Así mismo, se ha reflejado la influencia de la distribución de partículas según tamaño en la eliminación de petróleo de la superficie, en donde el petróleo formado mayoritariamente por las partículas de menor tamaño, se dispersará más en la superficie.

4.5 Aplicación a un caso real: Derrame de

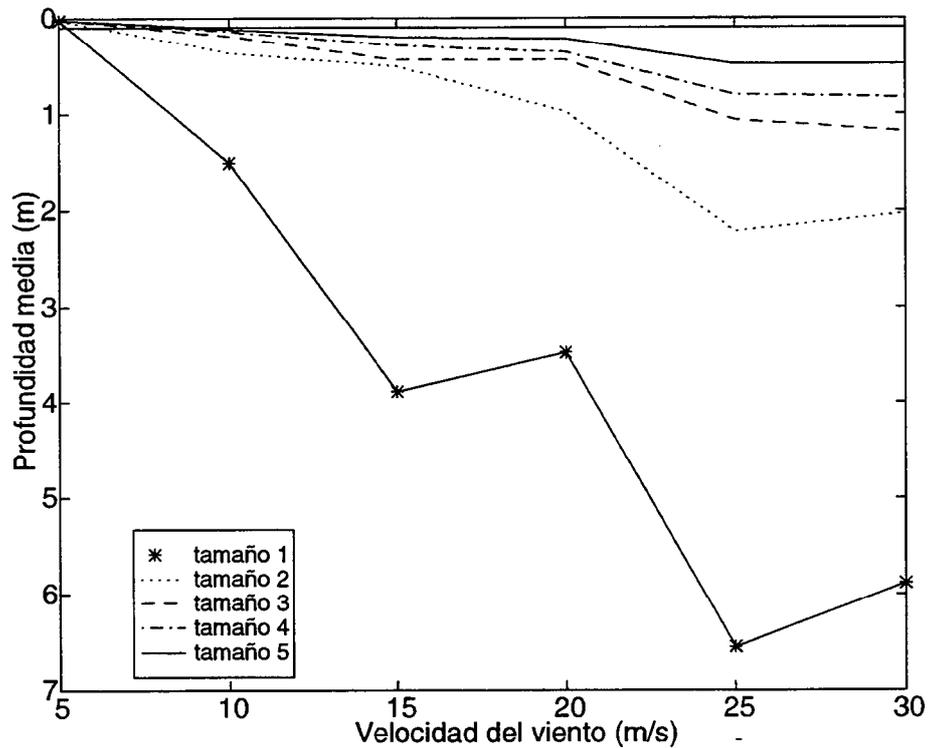


Figura 4.22. Profundidad media de las partículas para cada uno de los intervalos de tamaño y velocidad de viento utilizada en el caso en el que la dispersión de petróleo superficial viene dado únicamente por el oleaje.

petróleo *North Cape*

En enero de 1996, el mercante *North Cape* que llevaba como carga 828.000 galones de petróleo, naufragó a pocas millas de la costa de Narragansett, Estados Unidos. Los vientos durante los primeros días fueron superiores a 10 m/s, con fuerte oleaje asociado. Aunque el petróleo que se derramó era de alta volatilidad, las condiciones de tormenta reinantes durante el acontecimiento determinaron que se produjera una gran dispersión por oleaje. El petróleo se liberó aproximadamente durante los dos primeros días (Spaulding et al., 1996).

Como se mencionó con anterioridad, los datos hidrodinámicos reales correspondientes a la zona en donde se produjo el naufragio han sido proporcionados

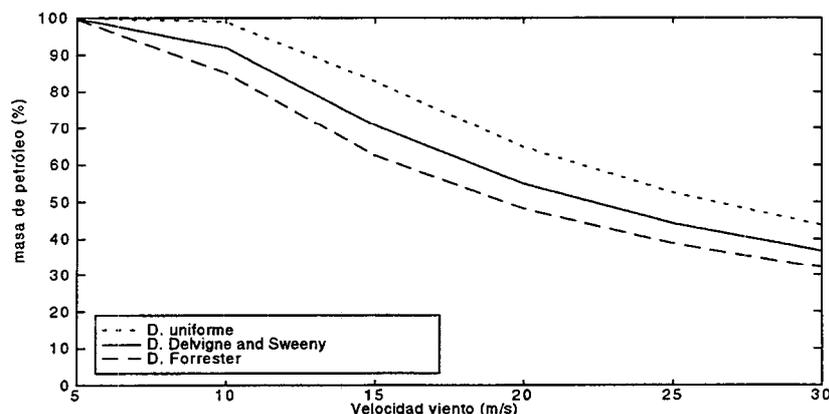


Figura 4.23. Variación de la masa superficial de petróleo en superficie dependiendo de la distribución de partículas para el caso de dispersión dada únicamente por turbulencia oceánica.

por el Departamento de Ingeniería Oceanográfica de la Universidad de Rhode Island, (EEUU). Los flujos de velocidades son variables en profundidad y están dados en cada célula de malla en su punto medio, variando las profundidades de las células de malla entre los 10 y los 40 m. La Figura 4.26 muestra la velocidad y dirección de viento para cada hora durante este suceso.

Se van a seguir las recomendaciones que Thorpe (1995) de incluir en la modelización del movimiento de una mancha de petróleo factores tales como el aumento de la turbulencia en una profundidad dt , aumento de la profundidad de intrusión en la columna de agua de las partículas dispersadas por el oleaje y turbulencia, así como el tiempo que tardan las partículas de petróleo en alcanzar dicha profundidad. Además, incluiremos el efecto que van a tener la distribución de partículas según tamaño,

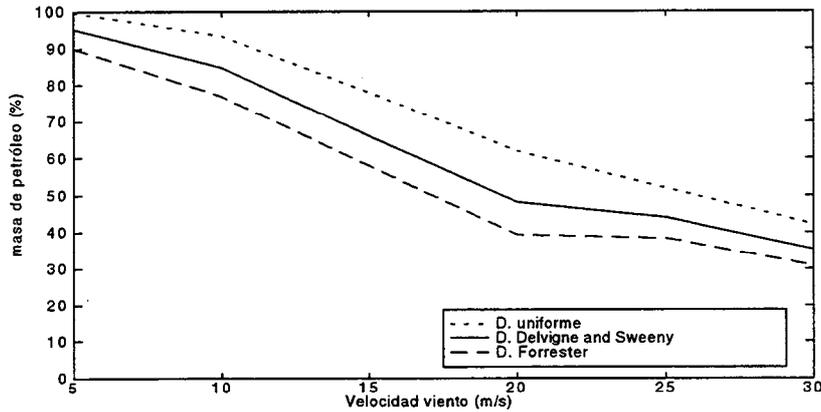


Figura 4.24. Variación de masa superficial de petróleo según distribución de partículas para diferentes velocidades de viento cuando la dispersión se ha representado por la acción conjunta de la dispersión mecánica por oleaje rompiente y por turbulencia oceánica.

utilizando para ello las distribuciones que han sido descritas en el Capítulo 3 y que se han designado por distribución Uniforme, distribución Delvigne-Sweeny y por último, distribución Forrester.

4.5.1 Entrada en la columna de agua del petróleo

Como se expuso en el apartado general, se va a simular el proceso de entrada de petróleo teniendo en cuenta únicamente la dispersión mecánica por oleaje rompiente para compararla con la dispersión debida al efecto conjunto de los dos procesos de entrada: el debido a la turbulencia oceánica y el de dispersión mecánica. De esta forma, se estudia la influencia de la turbulencia como proceso de entrada de petróleo

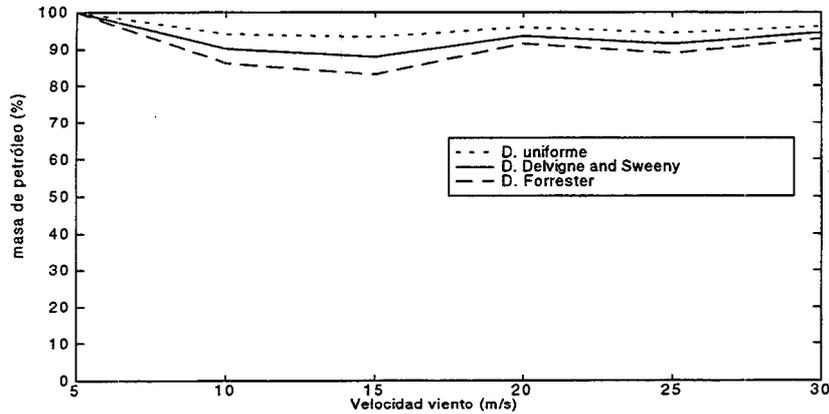


Figura 4.25. Masa superficial de petróleo para las diferentes distribuciones de partículas en el caso en que la dispersión de petróleo superficial se debe únicamente al oleaje.

en la columna de agua para diferentes condiciones.

4.5.2 Profundidad de intrusión

La profundidad de intrusión de las partículas que han sido dispersadas mecánicamente por oleaje rompiente, z_i , se sitúa en (Johansen, 1982; Delvigne y Sweeny, 1988)

$$z_i = R]_0^1 1.5 H_b \quad (123)$$

donde $R]_0^1$ es un número aleatorio entre 0 y 1 y H_b es la altura del oleaje rompiente, que es la mitad de la altura de ola significativa, H_s (Johansen, 1982, 1992). Thorpe,

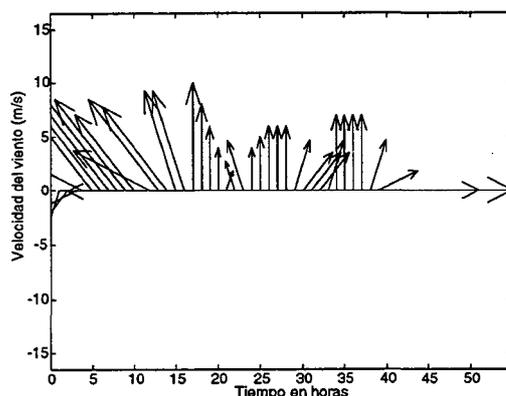


Figura 4.26. Velocidad y dirección del viento desde las 20:00 h del 19 de enero de 1996

1995, sitúa la profundidad de intrusión de las partículas de petróleo a una profundidad similar a la que alcanzan las burbujas de aire generadas cuando rompe el oleaje y que es igual a cuatro veces la altura de ola significativa,

$$z_i = 4 H_s \quad (124)$$

Existe otro factor a tener en cuenta y que es el tiempo que tardan las partículas en alcanzar dicha profundidad. Este mismo autor indica que es aproximadamente igual a pocas decenas de períodos de ola, (hasta dos minutos según las mediciones hechas con las burbujas de aire), periodo mucho menor que los dos días que Turrell (1994) utilizó para modelizar la dispersión de petróleo durante el derrame que siguió al naufragio del petrolero *Braer*. En la aproximación que aquí se utiliza, necesitamos que las partículas no alcancen esa profundidad de forma instantánea, sino que utilicen un tiempo similar a los dos minutos dado por Thorpe (1995). Por ello, se impone que la profundidad de intrusión esté en el rango $0 \leq z \leq z_i$ de forma aleatoria, lo que conseguimos multiplicando la anterior ecuación por un número aleatorio entre 0 y 1, esto es,

$$z_i = R]_0^1 4 H_s \quad (125)$$

de tal forma, y teniendo en cuenta que el intervalo temporal durante el cual se mueven las partículas en la simulación es de un minuto, se consigue disminuir el efecto de introducir las partículas a la profundidad z_i de forma instantánea.

4.5.3 Aumento de turbulencia en la profundidad dt

Como se ha visto en el apartado anterior, algunas aproximaciones tienen en cuenta no sólo el aumento de turbulencia en los primeros metros de la columna, sino también cómo la turbulencia va disminuyendo cerca del fondo (Ichiye, 1967; Davies y Jones, 1996). Siguiendo el trabajo de Agrawal et al. (1992) en donde se define una profundidad dt tal que la turbulencia generada por el oleaje rompiente aumenta la turbulencia oceánica debida a la influencia del viento, Thorpe (1995) presenta una serie de resultados que muestran que la turbulencia aumenta en dicha profundidad en aproximadamente 1.5 veces su valor. La Figura 4.27 muestra diferentes valores de dt para diferentes velocidades de viento.

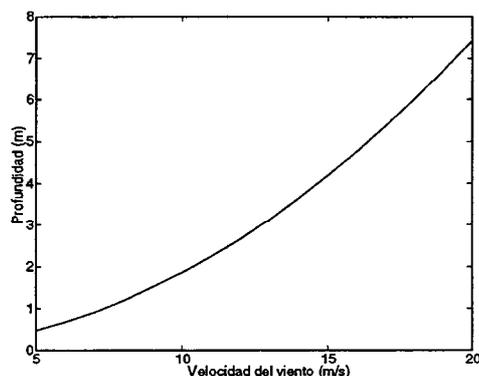


Figura 4.27. Profundidad hasta la que se registra un aumento de la turbulencia, dada por Agrawal et al. (1992) para diferentes velocidades del viento.

4.6 Resultados y discusión

Como se mencionó en la descripción de las condiciones iniciales, se han liberado 8000 partículas de cada intervalo de tamaño en la superficie (entre $z = 0$ y $z = 0.1$ m) de manera aleatoria en el lugar del naufragio y se ha calculado la masa de petróleo en superficie para cada hora para cada una de las distribuciones de partículas según tamaño. Las figuras correspondientes para el caso de simular la entrada de petróleo por oleaje que rompe sobre la mancha, se designan por la letra a, mientras que las que corresponden a los resultados de las simulaciones en donde el proceso de entrada de petróleo en la columna es una combinación de la turbulencia oceánica y dispersión mecánica por oleaje, se designan con la letra b.

Como se mencionó en el apartado correspondiente a la dispersión mecánica, cuando la velocidad del viento es igual o inferior a 5 m/s, el oleaje rompiente no va a actuar como proceso de entrada de petróleo en ninguno de los dos casos que hemos separado para representar los procesos de entrada de petróleo en la columna; cuando es superior a dicha velocidad crítica, la entrada de petróleo en la columna de agua se deberá al proceso combinado de la turbulencia oceánica y a la dispersión mecánica (figuras b) o únicamente a la dispersión mecánica (figuras a). Esa es la razón por la que durante los periodos con vientos iguales o inferiores a 5 m/s, en las figuras designadas por la letra a todo el petróleo permanece en superficie, mientras que en las figuras designadas por la letra b, el petróleo entrará en la columna debido a la turbulencia oceánica. La tabla siguiente esquematiza lo anteriormente expuesto:

Mecanismos de entrada de petróleo en la columna de agua			
Tiempo	Velocidad del viento	Figuras a	Figuras b
1-12 h	> 5 m/s	oleaje rompiente	oleaje rompiente + turbulencia oceánica
12-13 h	≤ 5 m/s	no entrada de petróleo	sólo turbulencia oceánica
13-18 h	> 5 m/s	oleaje rompiente	oleaje rompiente + turbulencia oceánica
18-40 h	≤ 5 m/s	no entrada de petróleo	sólo turbulencia oceánica
40-42 h	> 5 m/s	oleaje rompiente	oleaje rompiente + turbulencia oceánica

Se observa que durante las 12 primeras horas, el viento es superior a la velocidad

Resultados y discusión

crítica de 5 m/s , por lo que este periodo nos va a servir para poder hacer las comparaciones entre las simulaciones utilizando un proceso de entrada de petróleo en la columna (dispersión mecánica por oleaje rompiente) o los dos combinados (dispersión mecánica debida al oleaje rompiente y a la turbulencia oceánica).

Para cada una de las simulaciones para ambos caso de representación del proceso de entrada de petróleo en la columna, se imponen las siguientes condiciones:

- I. Coeficiente de difusión vertical constante e igual a $0.01 m^2/s$ y profundidad de intrusión dada por la expresión teórica
- II. Coeficiente de difusión vertical constante e igual a $0.01 m^2/s$ excepto en la profundidad dt , en donde ha aumentado 1.5 veces su valor y profundidad de intrusión dada por la expresión teórica
- III. Coeficiente de difusión vertical constante e igual a $0.01 m^2/s$ y profundidad de intrusión dada por la expresión de Thorpe
- IV. Coeficiente de difusión vertical constante e igual a $0.01 m^2/s$ excepto en la profundidad dt , en donde ha aumentado 1.5 veces su valor y profundidad de intrusión dada por la expresión de Thorpe

Los resultados obtenidos del caso I, que nos servirán como una primera referencia para el resto de las simulaciones, se muestran en la Figura 4.28, en donde se aprecia que no existe diferencia entre la masa de petróleo superficial en los dos tipos de entrada de petróleo en la columna. Esto nos indica que la turbulencia no ha influido en gran medida en la dispersión vertical de las partículas en superficie.

Los resultados de la simulaciones para el caso II (Figura 4.29) muestran que en ambas aproximaciones, existe un incremento en la cantidad de petróleo en la columna. Este resultado es similar en magnitud para ambas representaciones de entrada de petróleo superficial, lo que indica que la dispersión mecánica sigue siendo el proceso dominante en introducción de partículas de petróleo en la columna de agua.

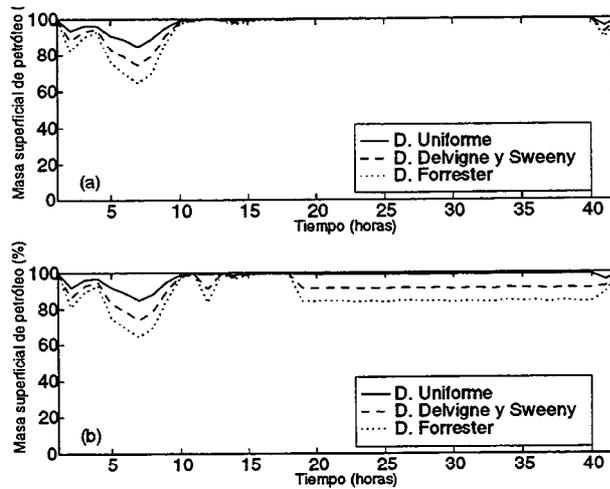


Figura 4.28. Variación de la masa superficial de petróleo para las simulaciones en las que se ha representado el proceso de entrada de petróleo en la columna como debido, (a) únicamente al oleaje y (b) cuando actúan conjuntamente la turbulencia oceánica y el oleaje (Caso I).

Esto significaría en principio que un aumento de turbulencia no influye como proceso de entrada del petróleo en la columna de agua. Sin embargo, si estudiamos la variación del número de partículas en superficie según tamaño para el caso I y para el que ahora se discute (caso II, Figuras 4.30, 4.31) se observa cómo el aumento de turbulencia en la profundidad dt afecta a las partículas más pequeñas (intervalos de tamaño 1 y 2).

Teniendo en cuenta que la entrada de petróleo por oleaje rompiente sólo propulsa al interior a las partículas que se encuentran en la superficie, el que exista la misma dispersión en ambas simulaciones para las partículas más pequeñas implica que éstas van a estar dispersas en la columna de agua, proceso que es similar en ambos casos. Se deduce, pues, que el proceso dominante sigue siendo la dispersión mecánica, y que un aumento de turbulencia oceánica va a afectar en el posterior movimiento de dichas partículas en la columna de agua.

Cuando se aumenta la profundidad de entrada (Caso III), el aumento de masa de petróleo que se introduce en la columna es superior, similar en ambas aproximaciones

Resultados y discusión

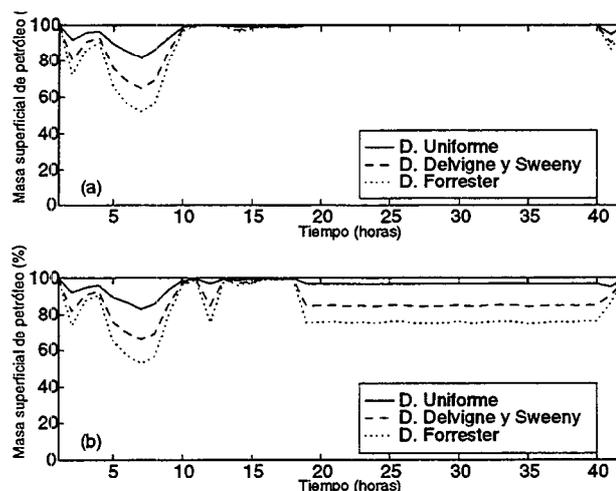


Figura 4.29. Variación temporal de la masa superficial de petróleo para las simulaciones en las que se ha representado el proceso de entrada de petróleo en la columna como debido (a) únicamente al oleaje y (b) cuando oleaje y turbulencia oceánica actúan conjuntamente (Caso II).

(Figura 4.32), lo que indica que el proceso de dispersión mecánica por oleaje rompiente sigue siendo dominante.

En este caso, un aumento de la profundidad de intrusión va a significar un aumento en el tiempo que las partículas más pequeñas, que son las más afectadas por la turbulencia oceánica, tardan en alcanzar la superficie, por lo que se produce una acumulación de petróleo en la columna. Así se comprueba, que si combinamos un aumento de la profundidad de intrusión con un aumento de turbulencia en dt , (Caso IV, Figura 4.33), se aumenta de igual forma la dispersión de petróleo en la columna para ambas simulaciones. La dispersión mecánica por oleaje es dominante como proceso de entrada de petróleo en la columna con respecto a la dispersión por turbulencia oceánica. Para la variación de petróleo en superficie va a ser fundamental las condiciones posteriores que existan en la columna de agua para el movimiento de las partículas, ya que un aumento de la profundidad de intrusión significa mayor tiempo para las partículas en alcanzar la superficie, que junto con un aumento de la turbulencia oceánica significa una mayor dispersión de las partículas en la columna.

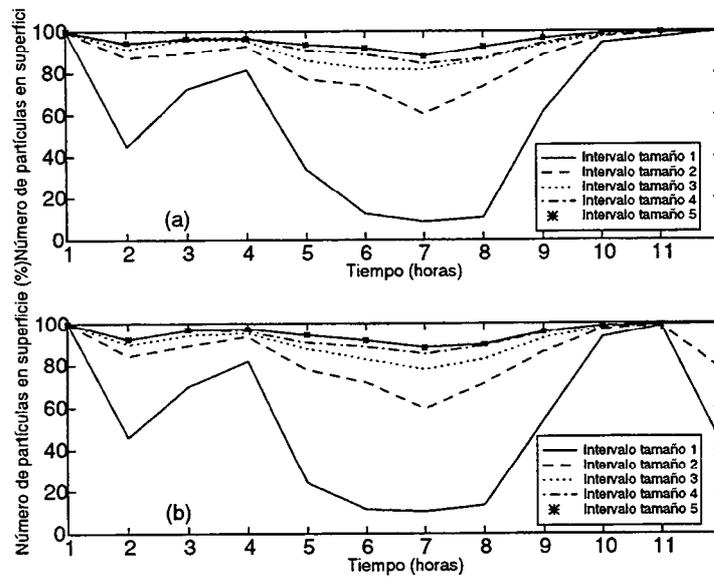


Figura 4.30. Variación del número de partículas en superficie para cada uno de los intervalos de tamaño utilizado para el caso I.

Finalmente, cabe destacar que las condiciones de contorno reflectantes dan lugar a una acumulación irreal de petróleo en la columna, debido a que las partículas una vez que han sido introducidas en la columna durante la primera hora, tendrán muy poca posibilidad de quedarse en superficie, por lo que, aunque la entrada de petróleo debido al oleaje disminuya pues depende de la cantidad de petróleo que hay en superficie, el petróleo se irá acumulando en la columna (Figura 4.34).

Resultados y discusión

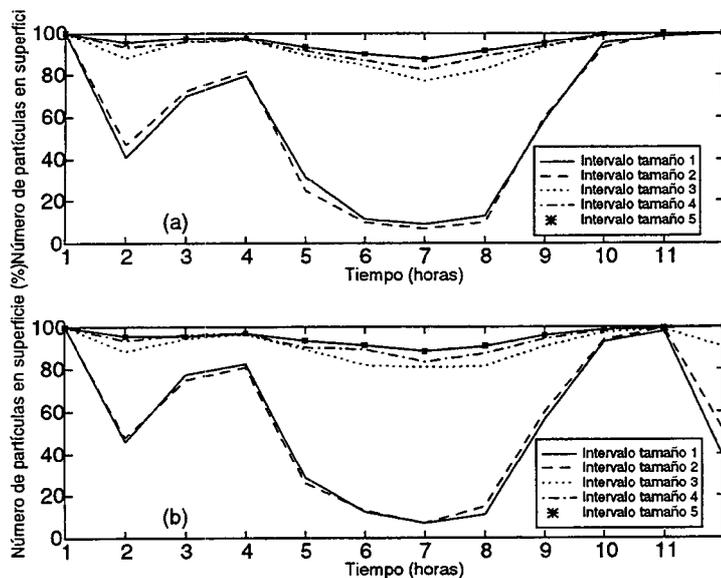


Figura 4.31. Variación del número de partículas en superficie para cada uno de los intervalos de tamaño utilizado para el caso II

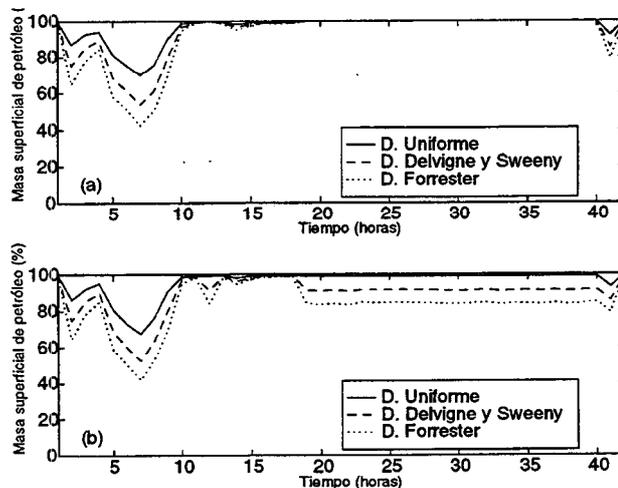


Figura 4.32. Variación temporal de la masa superficial de petróleo para cada una de las distribuciones de partículas cuando se ha aumentado la profundidad de intrusión de las partículas por oleaje (Caso III) para la dispersión de petróleo superficial por (a) oleaje rompiente y (b) turbulencia oceánica y oleaje, conjuntamente.

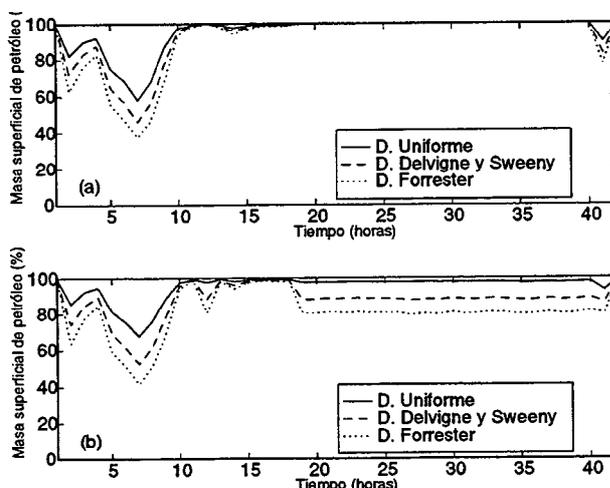


Figura 4.33. Variación temporal de la masa superficial de petróleo cuando se ha aumentado la turbulencia en profundidad dt así como la profundidad de intrusión de las partículas en la columna (Caso IV) para la entrada de petróleo por (a) oleaje y (b) turbulencia oceánica y oleaje, conjuntamente.

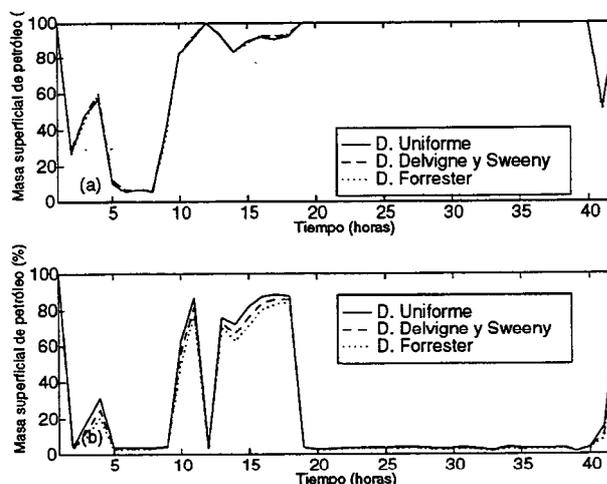


Figura 4.34. Variación temporal de la masa superficial de petróleo utilizando condiciones reflectantes en superficie para las condiciones correspondientes al Caso I cuando el proceso de entrada de petróleo en la columna viene dado por (a) oleaje rompiente y (b) acción conjunta de la turbulencia oceánica y del oleaje.

Resultados y discusión

A partir de estos resultados se puede hablar en principio de la influencia de parámetros tales como profundidad de intrusión y aumento de turbulencia en el aumento de dispersión de petróleo superficial, tal y como Thorpe (1995) estableció. La influencia de la distribución de partículas según sus tamaños se puede ver en todas las figuras en las que se han representado cada una de las distribuciones usadas y que hemos designado por los nombres de distribución Uniforme, distribución Delvigne-Sweeny y distribución Forrester. Las distribuciones que tienen un número superior de partículas de pequeño tamaño (distribución Forrester) estarán sujetas a una mayor dispersión debido a una influencia más acusada de la turbulencia en su movimiento vertical, mientras que las que tienen menor número de partículas pequeñas (distribución Uniforme), presentará una menor cantidad de petróleo disperso en la columna de agua.

4.7 Conclusiones

La importancia de los procesos verticales en el estudio del comportamiento de una mancha de petróleo se ha visto reflejado en los resultados obtenidos en dos casos claramente diferenciados. Las principales conclusiones de este apartado se pueden resumir en los siguientes puntos:

- (1) Se ha demostrado la importancia en la elección de la distribución de partículas de diferentes tamaños para el comportamiento del modelo.
- (2) Se ha comprobado cómo la distribución que presenta mayor masa formada por partículas pequeñas están sujetas a una mayor dispersión al verse más afectadas por los fenómenos turbulentos.
- (3) La aplicación del modelo a una simulación teórica de una barrera de contención ha mostrado que los fenómenos de dispersión mecánica junto con la turbulencia disminuyen la eficacia de los mecanismos de contención de la mancha y consecuentemente de los aparatos de recogida física del petróleo.
- (4) Cuando el modelo se ha aplicado a un caso real, se ha mostrado la importancia de la profundidad de intrusión y el aumento de turbulencia en la dispersión superficial, lo que enfatiza la necesidad de una correcta implementación de los fenómenos de turbulencia oceánica.
- (5) Finalmente, se ha comprobado que la suposición de condiciones reflectantes en superficie para representar el comportamiento del petróleo no resulta realista.

Parte II

Aplicación bidimensional: estudio de la expansión horizontal del petróleo por dispersión turbulenta

4.8 Introducción

La correcta descripción de la expansión de una mancha de petróleo sobre la superficie del mar es necesaria para poder cuantificar otros procesos que tienen lugar dentro de ella produciendo la alteración química del petróleo, como son la emulsificación y la evaporación de ciertas fracciones de petróleo, generalmente las más ligeras. Además, es una información necesaria para poder llevar a cabo con eficacia la eliminación del petróleo del mar, ya sea física mediante el uso de desnatadores, o química, mediante el uso de dispersantes. La expansión de una mancha de petróleo significa, por otro lado, una mayor área contaminada con las consecuencias ecológicas que se derivan de ello. Desafortunadamente, la expansión es un fenómeno muy complejo pues se rige

por las propiedades físico-químicas y, en mayor medida, por el estado del océano. La mayoría de los estudios que describen este proceso, han dado lugar a fórmulas que no se aproximan sino por encima a las manchas reales (Lehr, 1996).

Por ello, durante los pasados años se han intentado modelizar de forma más realista la expansión del petróleo considerando los procesos físicos que la originan. Tal y como se vió en el Capítulo 1, la aproximación lagrangiana utilizando partículas de petróleo en vez de pequeñas manchas, da como resultado una mejor aproximación a sus dimensiones reales. Sin embargo, debido a que la mancha de petróleo se considera formada por partículas de diferente tamaño siguiendo distribuciones determinadas, es necesario estudiar su expansión en función de variaciones en los tamaños de partículas o en la distribución. Se conseguirá de esta forma comprender en mayor medida los procesos de expansión, además de describir las limitaciones que se derivan del uso de un modelo lagrangiano que utiliza partículas de diferente tamaño.

A continuación, se describe la teoría referente a la expansión horizontal de un soluto en general y su aplicación al petróleo, soluto con flotabilidad positiva. Se derivan así mismo, los coeficientes correspondientes a este proceso de dispersión turbulenta para ambos casos en función del llamado *tiempo de mezcla*.

4.9 Método y definiciones

Para estudiar el proceso de dispersión de una mancha de petróleo se recurrirá una vez más a su modelización por camino aleatorio, ya introducida en capítulos anteriores. La versatilidad de este método lagrangiano se ha comprobado en estudios de dispersión de solutos pasivos (Allen, 1982; Van Dam, 1994; Wallis, 1994) y en estudios de partículas sedimentarias (Kelsey et al., 1994; Wallis, 1994). Además, algunos autores como Lehr (1996) no consideran que una aproximación euleriana simule adecuadamente dicho proceso de expansión.

Existen varias aproximaciones al fenómeno utilizando la modelización lagrangiana.

Método y definiciones

La técnica inicial consistió en dividir la mancha en un conjunto de pequeñas manchas, cada una de las cuales se expande de acuerdo a un algoritmo que sigue la formulación dada por Fay (1969). Tendrán forma circular, a la vez que se moverán aleatoriamente por difusión turbulenta superficial y por las corrientes (Ahlstrom, 1975; Al-Rabeh et al., 1989). Consecuentemente, no se introducirá petróleo en la columna de agua y por lo tanto no influirá en la expansión horizontal de la mancha. Para solventarlo, otros autores simulan la dispersión vertical del petróleo -con la consecuente formación de partículas- las cuales vuelven a superficie debido a su flotabilidad. Entran de nuevo formar parte de las manchas de las que proceden o forman nuevas manchas que se rigen por los mismos principios de expansión que sus originarias (OILMAP, 1996). Esta aproximación no tiene en cuenta el hecho de que los cálculos del área por las fórmulas de Fay variarán de acuerdo a la elección del número de manchas. Se ignora además que todos los procesos descritos anteriormente acerca de la expansión del petróleo, actúan simultáneamente sobre la mancha (Lehr, 1996). La ruptura de la mancha en varias manchas más pequeñas o partículas es un mecanismo natural y debería ser el resultado de un proceso de modelización más que estar predefinidos en número y forma por los modelos.

La técnica alternativa a la modelización con pequeñas manchas es considerar el petróleo formado por partículas de diferente tamaño; de esta forma, las coordenadas de estos elementos lagrangianos o partículas de petróleo definirían la forma global de la mancha. Esta aproximación, permite el uso de un gran número de elementos o partículas, y de aquí una mejor resolución de la mancha, mientras que las simulaciones en las que se divide la mancha en manchas más pequeñas, debido a las consideraciones de cálculo no sobrepasan los 100 elementos (Lehr, 1996).

En base a lo expuesto, en este trabajo se considera el petróleo formado por partículas, de igual o diferente tamaño según la distribución empleada. De este modo, se consigue encontrar una relación entre la expansión de una mancha de petróleo y la velocidad terminal de las partículas junto con las diferentes distribuciones según tamaño que sigan.

A continuación, se van a describir los mecanismos básicos por los que la combinación del efecto de un gradiente vertical del perfil de velocidades horizontal y la difusión turbulenta en la misma dirección dan lugar al aumento del área de la mancha de soluto en superficie. Además se caracterizará mediante un coeficiente efectivo de difusión turbulenta (Ozmidov, 1990).

4.10 Expansión de una mancha de soluto por dispersión turbulenta

En un flujo en donde el campo de velocidades sea variable tanto espacial como temporalmente, la distribución de la concentración de la materia se verá afectada no sólo por la difusión turbulenta en cada una de las direcciones, sino también por dicha variabilidad de la velocidad (Ozmidov, 1990). Taylor (1953, 1954), estudiando el transporte de soluto, fue el primero en establecer el efecto combinado de la cizalla vertical de la velocidad y la difusión vertical sobre la expansión horizontal del contaminante. El resultado final es una elongación mayor de la mancha de soluto en la dirección del flujo, esto es, una expansión horizontal mayor que la que se obtiene por simple difusión turbulenta horizontal. Esta expansión debida a la interacción entre el gradiente de la velocidad en una dirección transversal con la mezcla difusiva en la misma dirección se denomina **dispersión turbulenta** (Fischer et al., 1979). Se cuantifica introduciendo un coeficiente efectivo de difusión horizontal o de dispersión turbulenta. Los primeros análisis se basaron en flujos estacionarios con la velocidad horizontal de la corriente, siendo una función de la coordenada vertical z . Si se promedia la ecuación de difusión-advección correspondiente a dicho flujo desde la superficie al fondo ($z = H$), aparece un nuevo término en la ecuación que se identifica como un término adicional al transporte horizontal del soluto. El movimiento del soluto se caracteriza por la ecuación de difusión-advección, que para el caso unidimensional es:

Expansión de una mancha de soluto por dispersión turbulenta

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (126)$$

Si utilizamos las analogías de Reynolds, entonces

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} + u' \\ c &= \bar{c} + c' \end{aligned} \quad (4.127)$$

siendo u' y c' las componentes turbulentas de la velocidad y concentración, respectivamente. Las hipótesis de trabajo de Taylor consideran que después de que el soluto se ha distribuido en la vertical, se cumple que $c' < \bar{c}$. Entonces, al buscar una solución que satisfaga

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (128)$$

se tendrá que verificar que:

$$u' \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c'}{\partial z} \right) \quad (129)$$

o, ya que $c' < \bar{c}$

$$u' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c'}{\partial z} \right) \quad (130)$$

Esta última ecuación muestra el equilibrio en cualquier punto entre la transferencia convectiva de la mezcla y la difusión vertical asociada con pequeñas variaciones en concentración con la profundidad. La integración de esta última ecuación sobre z nos

llevará a (Monin y Yaglom, 1971; Cristodoulou et al., 1976):

$$\int_0^H u'c' dz = \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \int_0^H \frac{1}{K_z} \left(\int_0^z u' d\zeta \right)^2 dz \quad (131)$$

para la dirección x y profundidad H . Se observa que el transporte integrado debido a las desviaciones espaciales de la velocidad y concentración a partir de sus valores promediados en profundidad, se han expresado en términos de los gradientes horizontales de las concentraciones promedios. Los coeficientes de dispersión turbulenta se identifican como

$$K_x = \frac{1}{H} \int_0^H \frac{1}{K_z} \left(\int_0^z u' d\zeta \right)^2 dz \quad (132)$$

para la dirección x en la horizontal. Como se observa, el coeficiente de dispersión turbulenta es inversamente proporcional al coeficiente de difusión vertical K_z .

El análisis inicial de Taylor dió paso a otra serie de trabajos en donde se estudia y cuantifica dicho coeficiente efectivo de difusión turbulenta horizontal para diferentes casos (Csanady, 1963; Ichiye et al., 1964; Okubo y Carter, 1964; Bowden, 1965; Csanady, 1966; Bowden y Lewis, 1973). Este coeficiente de dispersión turbulenta tiende a un valor constante para valores grandes de tiempo (Taylor, 1954; Aris, 1956; Fischer et al., 1979; Van Dam, 1994) y que para el caso estacionario toma la forma

$$K_x^d = \lambda \frac{H^2}{K_z} \bar{u}^2 \quad (133)$$

en donde λ es una constante función del perfil de velocidades $u(z)$ (Christodoulou et al., 1976; Van Dam, 1994), \bar{u} es el promedio de dichas velocidades con la profundidad, H es la profundidad y K_z es el coeficiente de difusión turbulenta en la vertical. La consecuencia que se obtiene en todos los casos es que existe una dependencia inversa

Expansión de una mancha de soluto por dispersión turbulenta

de dicho coeficiente con el de difusión vertical turbulenta, K_z , de tal forma que si la difusión vertical disminuye, la expansión horizontal debida a la dispersión turbulenta aumenta.

El coeficiente de dispersión turbulenta se puede escribir en función del llamado **tiempo de mezcla**, T_z que es el tiempo que tarda un soluto en distribuirse por la columna de profundidad H . Este tiempo, será pues, proporcional a H^2/K_z . (Fischer et al., 1979). La elección del coeficiente de proporcionalidad entre T_z y H^2/K_z es arbitrario. Una elección generalizada de dicho coeficiente es (Van Dam, 1994):

$$T_z = \frac{1}{2} \frac{H^2}{K_z} \quad (134)$$

De esta forma, el coeficiente efectivo de difusión turbulenta horizontal o dispersión turbulenta se puede escribir como:

$$K_x^d = C_d T_z \bar{u}^2 \quad (135)$$

en donde C_d será igual a 2λ . La constante adimensional c_d viene dada para cada perfil de velocidades ya que $\lambda = c_d * (1/2)$.

La expansión horizontal en una mancha de soluto, se caracteriza por su dispersión entorno a la media o varianza, σ_x^2 . Está relacionada con el coeficiente tanto de difusión como de dispersión turbulenta mediante la forma (Csanady, 1972; Fischer et al., 1979; Okubo, 1980)

$$K_x = \frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_x^2}{\partial t} \quad (136)$$

Debido a que la expansión horizontal es el resultado de la difusión horizontal y dispersión turbulenta, la varianza horizontal, σ_x^2 va a ser el resultado de una difusión

turbulenta en la horizontal, σ_{turb} , y la llamada dispersión debida al gradiente, σ_{grad}^2 (Ebbesmeyer y Okubo, 1975; Okubo, 1980)

$$\sigma_x^2 = \sigma_{turb}^2 + \sigma_{grad}^2 \quad (137)$$

Por otro lado, la varianza de la mancha (σ_x^2) depende del tiempo, obteniendo unas veces una mancha más alargada y otras no. Cuando la expansión horizontal se debe únicamente a la difusión turbulenta, la relación entre la varianza horizontal y el tiempo es lineal. Sin embargo, cuando se trata de dispersión turbulenta, esta variación es diferente dependiendo cómo esté distribuido el soluto en la vertical, como demostró Saffman (1962) después de estudiar la dispersión turbulenta de un soluto en un campo de velocidades lineal. Saffman definió tres estados diferentes de dispersión horizontal efectiva:

- Estadio inicial. El soluto se encuentra muy alejado de los contornos y su varianza es función de t^2 .
- Estadio intermedio. Se caracteriza porque el soluto se encuentran lo suficientemente dispersos en la vertical como para sentir el gradiente de la velocidad, y por tanto su varianza depende de t^3 .
- Estadio final. El soluto ya ha alcanzado los contornos (que corresponde al punto en el que Taylor (1954, 1955) realizó sus estudios sobre la dispersión turbulenta), por lo que su varianza ya sólo depende de t .

Hasta ahora, se ha considerado la dispersión turbulenta de un soluto pasivo (flotabilidad neutra). Cuando el soluto no es pasivo, se necesita incluir la influencia en el proceso dispersivo de la velocidad terminal o de sedimentación. Elder (1959) modificó el tratamiento que siguió Taylor, y calculó el coeficiente de dispersión turbulenta para partículas sedimentarias en un caso unidimensional, que dependerá, por lo tanto, no sólo de las características del flujo sino también de la velocidad de

Expansión de una mancha de soluto por dispersión turbulenta

sedimentación. La excepción son aquellas partículas muy finas en las que la velocidad de sedimentación es tal que su transferencia vertical está dominada por la difusividad turbulenta vertical más que por la velocidad sedimentaria, esto es:

$$\frac{w_s H}{K_z} \ll 1$$

donde w_s es la velocidad de sedimentación de la partícula, K_z es el coeficiente de difusión vertical, y H es la profundidad.

Summer (1974) calculó analíticamente las expresiones de los coeficientes de dispersión turbulenta para partículas sedimentarias en un campo de velocidades longitudinal, utilizando el método de los momentos desarrollado por Aris (1959) para explicar el proceso de dispersión turbulenta. Summer demostró que a medida que la velocidad sedimentaria aumentaba, lo hacía de igual manera el coeficiente de dispersión longitudinal, debido a que las partículas con mayor velocidad sedimentaria estarían más cerca del fondo, que es la zona en donde el gradiente de velocidad era mayor.

Aplicando la misma argumentación de Summer al estudio de partículas de petróleo, las que posean una mayor velocidad terminal o tamaño, se encontrarán en la zona más cercana a superficie donde el gradiente de velocidad es menor, por lo que su expansión horizontal será menor y, consecuentemente también su correspondiente coeficiente de dispersión horizontal.

Hunter (1980) modelizó la expansión de una mancha de petróleo intentando reproducir los efectos de la difusión por gradiente resolviendo de forma explícita los gradientes laterales en corrientes mareales y reproduciendo la difusión de petróleo por un proceso bidimensional de camino aleatorio. El modelo despreciaba los procesos verticales y, por lo tanto, las manchas predichas se elongaban en la dirección de las corrientes mareales. Sin embargo, aunque las manchas son advectadas por corrientes mareales, las observaciones de Elliot (1986) sugirieron que las manchas se alargaban

preferentemente en la dirección que marcaba el viento y el oleaje. Esto puso de manifiesto que los procesos verticales eran importantes, por lo que modelizó de forma más realista la expansión de una mancha incluyendo gradientes tanto laterales como verticales. El resultado fue que la elongación y orientación de una mancha de petróleo formada por partículas de diferente tamaño era debida a los gradientes verticales que dominaban durante las condiciones en que se liberó el petróleo y que, por lo tanto, una representación realista de la expansión horizontal del petróleo necesitaba de la inclusión de tales procesos de difusión turbulenta vertical.

Como se vió en secciones previas, los procesos de difusión por gradiente de velocidad de cualquier soluto tienen diferentes estados. En el primer estado, la mancha de soluto está lejos de los contornos y el tamaño de la mancha es capaz de incrementarse en todas las direcciones sin ninguna interferencia. Los estados posteriores se caracterizan por un retardo en el crecimiento de la mancha debido a que su expansión efectiva está limitada por los contornos, verticales o laterales del océano. La idea que se aplicará aquí es que en el caso del petróleo, los contornos van a estar determinados, no sólo por contornos físicos, sino por la limitación que ejerce su propia flotabilidad a expandirse a mayores profundidades, sin que ello signifique que su expansión no este también gobernada por los procesos turbulentos descritos con anterioridad.

El petróleo alcanzará una profundidad máxima relacionada directamente con su velocidad terminal, y que se describe como aquella profundidad en donde existe un equilibrio entre el transporte advectivo hacia la superficie debido a su flotabilidad y el transporte difusivo hacia abajo debido a las turbulencias en la vertical. Esta profundidad máxima de mezcla es lo que se define como *profundidad máxima de intrusión*, que para una partícula se puede expresar como (Kolluru et al., 1994)

$$z_{\max} = \frac{K_z}{w_t} \quad (138)$$

donde K_z es el coeficiente de difusión turbulenta vertical y w_t es la velocidad terminal de la partícula.

4.11 Simulaciones numéricas

Se van a efectuar dos simulaciones numéricas. En la primera, se va a estudiar la dependencia del coeficiente de dispersión turbulenta en la dirección horizontal x con la velocidad terminal, mientras que la segunda se analizará la dispersión turbulenta para manchas formadas por partículas que siguen cada una de las tres distribuciones según tamaño descritas en capítulos precedentes: Distribución Forrester, Distribución Delvigne y Sweeney y Distribución Uniforme. Son simulaciones bidimensionales en el plano XZ . En la vertical, z , se toma una profundidad constante de 10 m, y en la horizontal, x , no existen limitaciones. Además, las velocidades sólo tienen componente longitudinal, independientes de la posición x , y se describen por:

$$u(z) = \frac{(q+1)}{q} (z)^{1/q} \quad (139)$$

Estos perfiles son denominados *distribuciones Van Veem* (Van Dam, 1994). El factor del perfil q varía dependiendo del sistema y profundidad que se utilice; así, para sistemas bien mezclados, los valores usuales son $q = 5, 6, 7$ (serán mayores a medida que aumenta la profundidad). Cuando existe estratificación, las mejores aproximaciones se obtienen con valores bajos de q (igual o menor de $q = 1$), pero generalmente el grado de aproximación en estos casos es pobre, y no se adapta a la distribución vertical de densidad real (Van Dam, 1994). Los perfiles correspondientes a varios valores de q se muestran en la figura 4.35.

Para analizar la influencia de los procesos físicos en la vertical, se impone que la difusión en la horizontal sea cero ($K_x = 0$), mientras que la difusión en la vertical viene dada por un valor constante del coeficiente de difusión vertical K_z que se fija en

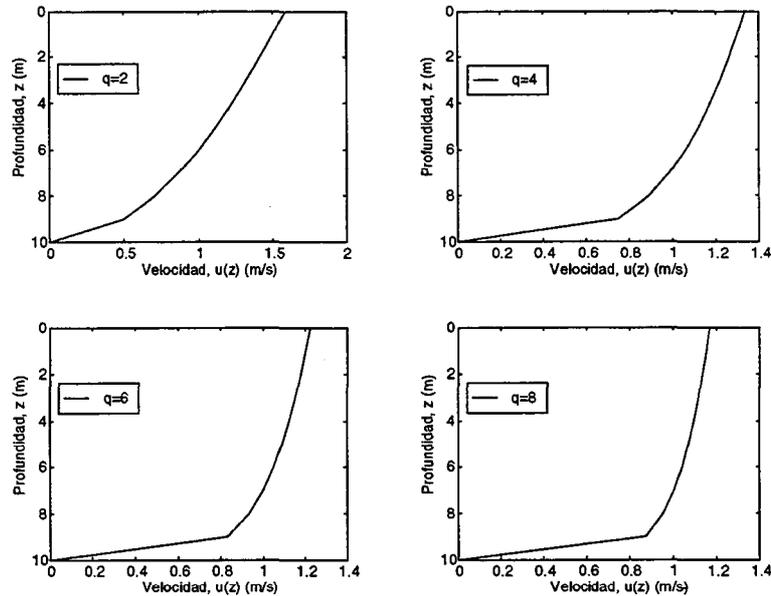


Figura 4.35. Distribuciones de velocidad en el plano vertical, calculadas a partir de los perfiles Van Veem.

$0.01 \text{ m}^2/\text{s}$. Para un intervalo temporal pequeño y un número suficientemente grande de partículas, la distribución de las partículas es próxima a la solución exacta de la ecuación de difusión-advección, que en teoría se alcanza sólo para un intervalo temporal igual a cero y un número de partículas infinito, aunque en la práctica se pueden obtener aproximaciones considerables con un intervalo temporal finito y un número finito de partículas (Srinivasan et al., 1971).

Todas las fuentes se toman en el plano $x = 0$ y pueden ser fuentes puntuales o fuentes lineales en la vertical. En esta sección sólo se consideran fuentes instantáneas en superficie y se consideran las distribuciones de las partículas en la dirección x (dispersión longitudinal). Para las simulaciones en las que la mancha de petróleo está formado por partículas de un mismo tamaño, se eligen un total de cinco intervalos, con un rango que va desde 100μ a 1100μ de diámetro.

Intervalo de tamaño	Velocidad terminal (m/s)	Diámetro ($10^{-6}m$)
1	0.0033	100 – 200
2	0.0103	200 – 300
3	0.0178	300 – 500
4	0.0257	500 – 800
5	0.0341	900 – 1100

Tabla 4.2. Diámetro de partículas empleado en las simulaciones

La segunda simulación se realizará con la condición de que la mancha de petróleo está formada por partículas de diferente tamaño, pero siempre dentro de los rangos que se dan en la tabla anterior, y que siguen las distribuciones previamente definidas. Las diferencias en el petróleo utilizando una u otra distribución se refieren a la cantidad de masa de petróleo representada en cada intervalo de tamaño (3.16a). En términos de número de partículas, la distribución que hemos denominado Forrester, será la que mayor número de partículas de menor tamaño tenga, ya que existe igual cantidad de masa de petróleo en cada intervalo de tamaño (3.16b).

4.12 Análisis de resultados

El estudio de la expansión horizontal en superficie de una mancha de petróleo formada por partículas se basa en el estudio de la varianza y de su evolución temporal. Por ello, los resultados acerca de las distribuciones espaciales de las partículas se obtienen cada cierto periodo de tiempo. Trabajar con partículas significa realizar un estudio de los momentos de sus distribuciones alrededor de la media; en particular interesa la evolución temporal de su media y varianza.

Cuando se trabaja con partículas de petróleo, no sólo se necesita la distribución espacial de las partículas, sino también la distribución de la masa de petróleo en la mancha. Por ello, para calcular la distribución de la concentración en la dirección longitudinal y vertical en diferentes tiempos se utiliza la siguiente técnica: el área de la mancha para cada tiempo t_i se divide en células de igual tamaño. Se calcula el número de partículas en la célula i , y de aquí su concentración, $c(x, z, t_i)$. Para ello, hay que tener en cuenta la masa de cada partícula, m_i y el área de la célula, A_i , de tal forma que en la dirección x y en el tiempo t_i la concentración está dada por

$$C(x, t_i) = \sum_{z=0}^{z=z_{\max}} c(x, z, t_i) \quad (140)$$

Análisis de resultados

Interesa conocer la expansión horizontal de la mancha en superficie, de tal forma que la profundidad máxima que vamos a utilizar, z_{\max} , se hace igual a 0.1 m, (Elliot, 1986). A partir de aquí, y siempre trabajando con concentraciones, se obtienen diferentes parámetros estadísticos, entre los que interesan están el centroide de la mancha definido como:

$$\bar{x} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x C(x, t_i) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} C(x, t_i) dx} \quad (141)$$

para un tiempo determinado t_i y su segundo momento central o varianza de la distribución:

$$\sigma_x^2 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (x - \bar{x})^2 C(x, t_i) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} C(x, t_i) dx} \quad (142)$$

Repitiendo los mismo pasos para cada tiempo t_i , se obtiene la evolución temporal del centroide y de la varianza de la mancha de petróleo, y que se puede escribir como (Bowden y Lewis, 1973)

$$\sigma_x^2 = at^m \quad (143)$$

Podemos relacionar la variación temporal de la expansión horizontal de la mancha, representada por la varianza horizontal, con el coeficiente de dispersión longitudinal de forma análoga al coeficiente de difusión turbulenta en una difusión tipo fickiano clásico (ver, por ejemplo, Csanady, 1972; Bowden y Lewis, 1973; Fischer et al., 1979; Ozmidov, 1990),

$$K_x = \frac{1}{2} \frac{d\sigma_x^2}{dt} \quad (144)$$

en donde el coeficiente de difusión o dispersión turbulenta, será por tanto:

$$K_x = \frac{am}{2}t^{m-1} \quad (145)$$

En el estudio de la expansión de una mancha de petróleo formada por partículas de diferente tamaño, el centroide y la varianza de la mancha se calculan de igual forma, sin más que tener en cuenta que la masa de petróleo en cada célula será la suma de la masa del petróleo contenido en cada uno de las partículas que pertenecen al intervalo de tamaño j .

$$m(x, z, t_i) = \sum_{j=1}^n m_j(x, z, t_i) \quad j = 1, \dots, n \quad (146)$$

donde n es el número de intervalos de tamaño que se están utilizando. Según las condiciones impuestas, en nuestro caso, $n = 5$. Es importante resaltar que dado que la difusión horizontal turbulenta no se ha incluido en las modelizaciones, la varianza horizontal en superficie de la mancha de petróleo se debe únicamente a la dispersión turbulenta horizontal debida al efecto combinado del gradiente de velocidad con la profundidad y la mezcla turbulenta vertical, esto es

$$\sigma_x^2 = \sigma_{grad}^2 \quad (147)$$

Los resultados obtenidos a partir de las simulaciones, se pueden dividir en aquellos que se refieren a la expansión horizontal en superficie de una mancha de petróleo formada por partículas de igual tamaño y en los que la mancha está formada por partículas de petróleo de diferente tamaño que siguen una de las distribuciones dadas.

4.12.1 Resultados numéricos para cada uno de los intervalos

de tamaño

Estudio de la varianza: Los resultados obtenidos acerca de la expansión de una mancha de petróleo formada por partículas del mismo tamaño, muestran cómo la varianza aumenta a medida que disminuye el tamaño de las partículas (figuras 4.36, 4.37, 4.38, 4.39)

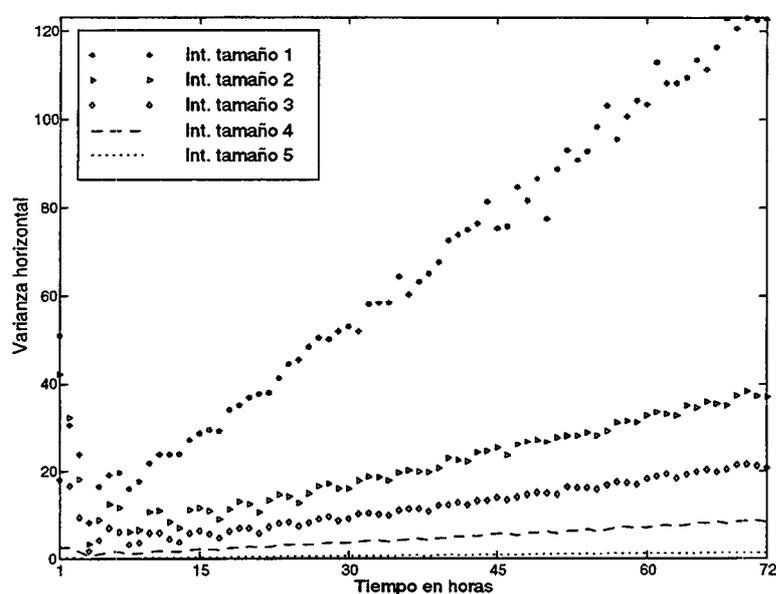


Figura 4.36. Varianza horizontal de diferentes manchas superficiales de petróleo formadas por partículas de igual tamaño para un perfil de velocidad de Van Veem para $q = 2$.

Para las manchas cuyas partículas pertenezcan al intervalo de tamaño p , la varianza disminuye a medida que el gradiente de la velocidad es menos acusado (q aumenta):

$$\sigma_x^2(p, q) > \sigma_x^2(p, q + 1) \quad p = 1, \dots, n \quad q = 2, \dots, 8 \quad (148)$$

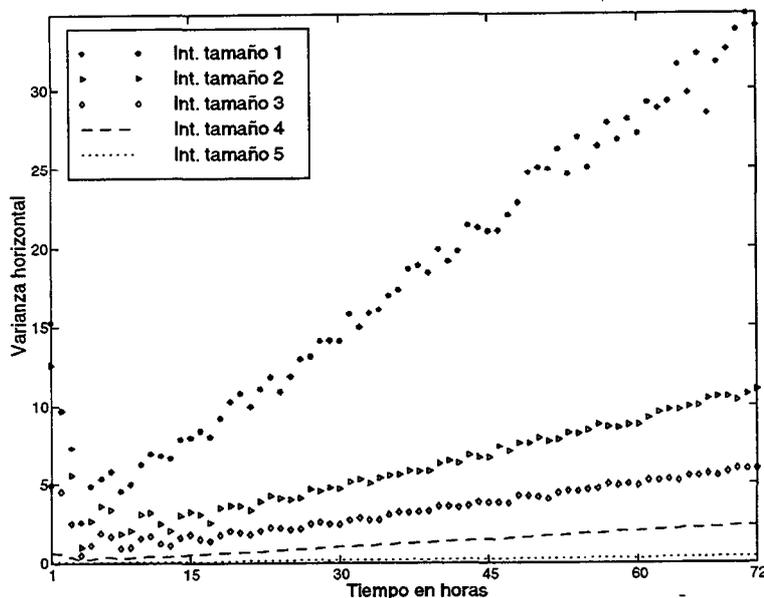


Figura 4.37. Varianza horizontal de diferentes manchas superficiales de petróleo formadas por partículas de igual tamaño para un perfil de velocidad de Van Veem para $q = 4$.

mientras que para un mismo perfil de velocidad, la expansión de la mancha aumenta a medida que el tamaño de las partículas, o la velocidad terminal, disminuye:

$$\sigma_x^2(p, q) > \sigma_x^2(p + 1, q) \quad p = 1, \dots, n \quad q = 2, \dots, 8$$

Esto se puede explicar en base a dos hechos: en primer lugar, estos resultados se relacionan con la profundidad que una partícula con velocidad terminal w_t alcanza en la columna y que se designó como profundidad máxima de intrusión. Como se observa, la profundidad que alcanzan las partículas de petróleo, es mayor a medida que disminuye la velocidad terminal (figura 4.40).

Esto da lugar a que las partículas de menor tamaño (partículas pertenecientes al

Resultados numéricos para cada uno de los intervalos de tamaño

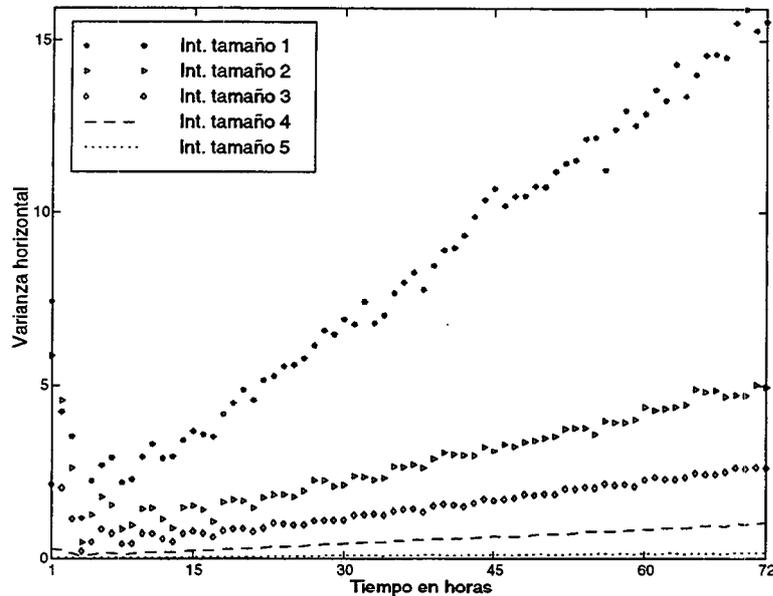


Figura 4.38. Varianza horizontal de diferentes manchas superficiales de petróleo formadas por partículas de igual tamaño para un perfil de velocidad de Van Veem para $q=6$.

intervalo de tamaño $p=1$) alcanzan zonas de la columna de agua más cercanas al fondo, en donde el gradiente de la velocidad es mayor (figura 4.35), por lo que, de acuerdo con la teoría de la dispersión turbulenta, da lugar a una mayor expansión de la mancha.

La importancia de la profundidad de mezcla como factor determinante en la expansión se refleja en la siguiente simulación, en donde se ha utilizado un perfil lineal de velocidad que disminuye con la profundidad (figura 4.41a).

De esta forma, el gradiente de la velocidad $\Delta u/h$ para cualquier profundidad es el mismo, por lo que el efecto de las diferencias de velocidad teóricamente tendría que ser igual para todas las partículas. Sin embargo, como se muestra en la figura 4.42, la varianza de la mancha disminuye a medida que aumenta la velocidad terminal o

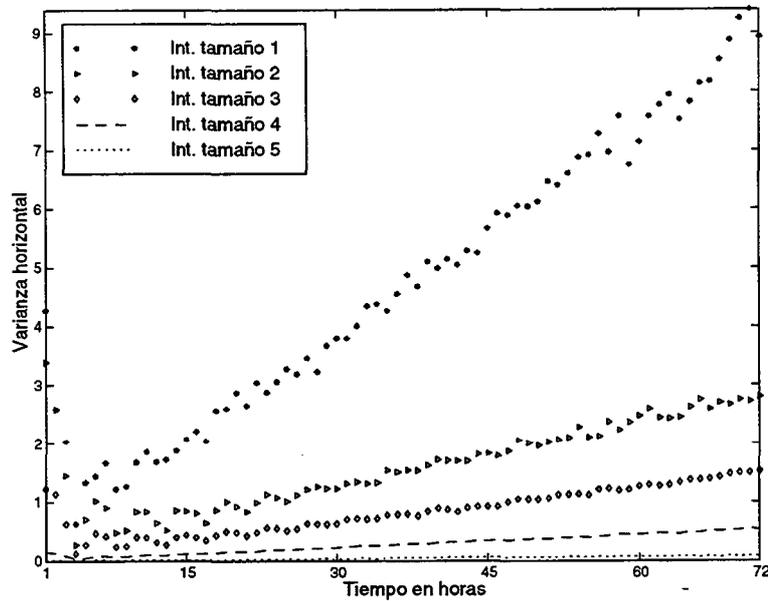


Figura 4.39. Varianza horizontal de diferentes manchas superficiales de petróleo formadas por partículas de igual tamaño para un perfil de velocidad de Van Veem para $q = 8$.

tamaño de las partículas. Esto se debe a que la profundidad de intrusión máxima disminuye a medida que aumenta el tamaño, por lo que dos partículas que puedan acceder a profundidades mayores (zona 1 de la figura 4.41b) dará lugar a que las partículas situadas en la superficie y en $z = z_{i_{\max}}$ estén separadas por una distancia superior a dos partículas que tengan acceso a una columna menos profunda (zona 2 de la figura 4.41b).

Por otro lado, a medida que disminuye el tamaño, las partículas permanecerán durante más tiempo en la columna de agua, por lo que sentirán los efectos de la dispersión turbulenta durante mas tiempo. Este hecho lo podemos relacionar con el tiempo de mezcla definido para partículas pasivas como:

Resultados numéricos para cada uno de los intervalos de tamaño

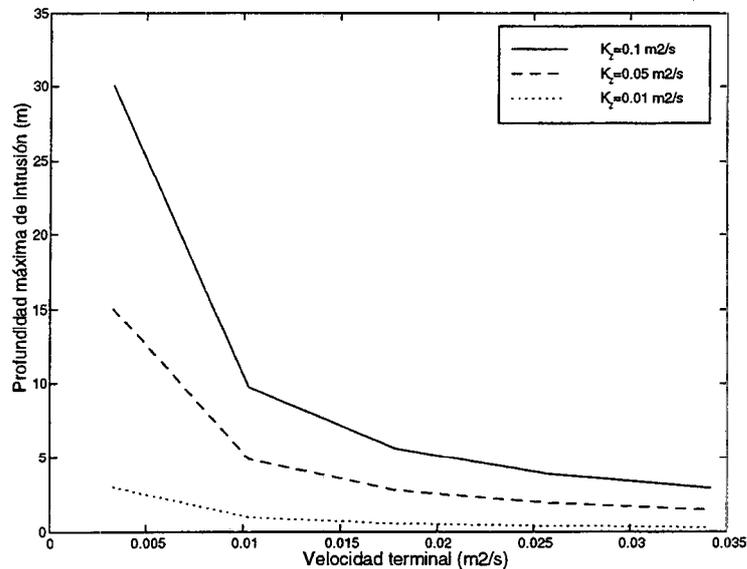


Figura 4.40. Profundidades máximas de intrusión para las velocidades terminales correspondientes a los tamaños de partícula utilizados. Simulaciones con diferentes valores del coeficiente de difusión turbulenta vertical.

$$T_z = \frac{1}{2} \frac{H}{K_z}$$

Si el tiempo que tardaría un soluto en mezclarse en una columna de profundidad $H = z_{\max}$ es:

$$T_z = \frac{1}{2} \frac{z_{\max}^2}{K_z} \quad (149)$$

entonces podemos relacionar el tiempo de mezcla de este soluto con la velocidad terminal de una partícula de petróleo teniendo en cuenta la definición de profundidad máxima de intrusión de la siguiente manera:

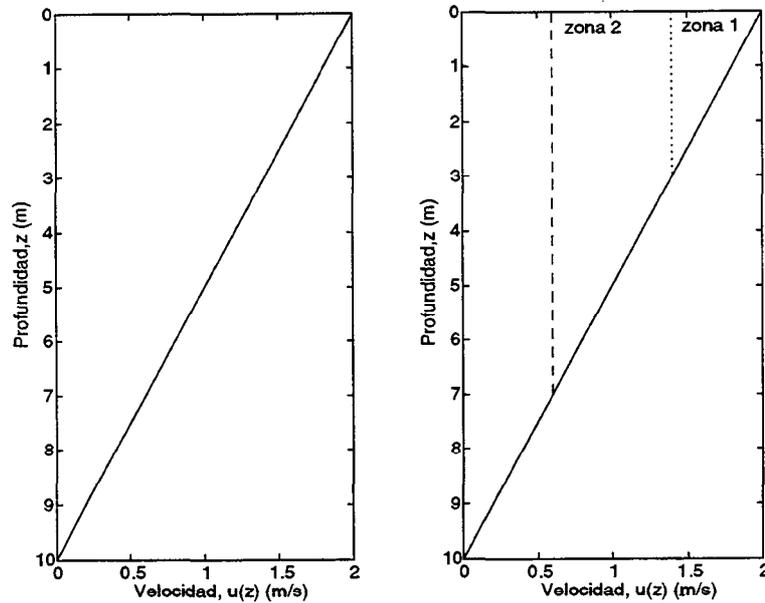


Figura 4.41. (a) Distribución de la velocidad en el plano vertical calculada a partir de la ecuación 4.139 para $q = 1$ (b) Mismo perfil en el que se ha señalado las profundidades de intrusión para dos tamaños de partículas (Zona 1 y Zona 2).

$$T_z = \frac{1 K_z}{2 w_t^2} \quad (150)$$

Este tiempo así descrito nos sirve además para definir el tiempo que tardaría una partícula de petróleo con velocidad terminal w_t en alcanzar la profundidad máxima de intrusión. Lógicamente aumenta a medida que disminuye la velocidad terminal. Así, las partículas con mayor tamaño o velocidad terminal les corresponde una menor profundidad de intrusión y, por lo tanto, un menor tiempo de mezcla, T_z (figura 4.43a, b).

Si se aplica este tiempo de mezcla a los resultados obtenidos de la varianza de una mancha de petróleo formada por partículas del mismo tamaño, confirma lo

Resultados numéricos para cada uno de los intervalos de tamaño

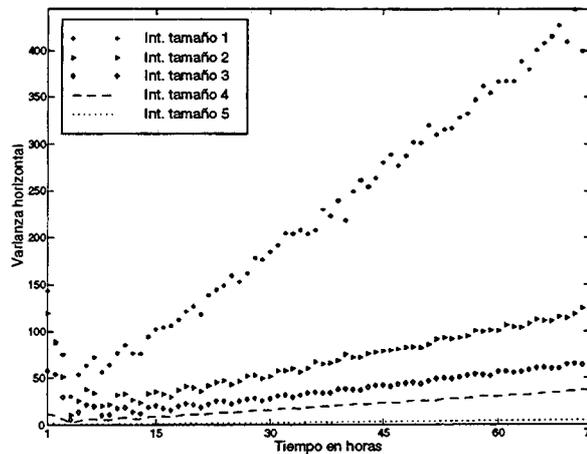


Figura 4.42. Varianzas horizontales para diferentes manchas horizontales de petróleo formadas por partículas de petróleo del mismo tamaño para un perfil de velocidad con $q = 1$.

que habíamos dicho anteriormente: un mayor tiempo de mezcla, lo que resulta en un mayor tiempo de permanencia en la columna, dando como resultado una mayor dispersión turbulenta que en consecuencia produce una mayor expansión o varianza.

Se observa, además, que la varianza aumenta linealmente con el tiempo a partir de las primeras horas para todas las partículas y tamaños. Según la teoría de dispersión turbulenta, este estado se da cuando el soluto alcanza los contornos y, por lo tanto, se ha mezclado completamente en la columna (ver p.e Csanady, 1972; Fischer et al., 1979). Si aplicamos el mismo razonamiento para el petróleo, podemos decir que el contaminante también ha alcanzado los límites. En este caso, están determinados por la propia profundidad máxima de intrusión, $z_{i_{max}}$. En el caso de las partículas con $z_{i_{max}} > H$, el límite lo marca la propia profundidad utilizada H .

En base a los resultados, podemos decir que la varianza evoluciona linealmente con el tiempo de la forma

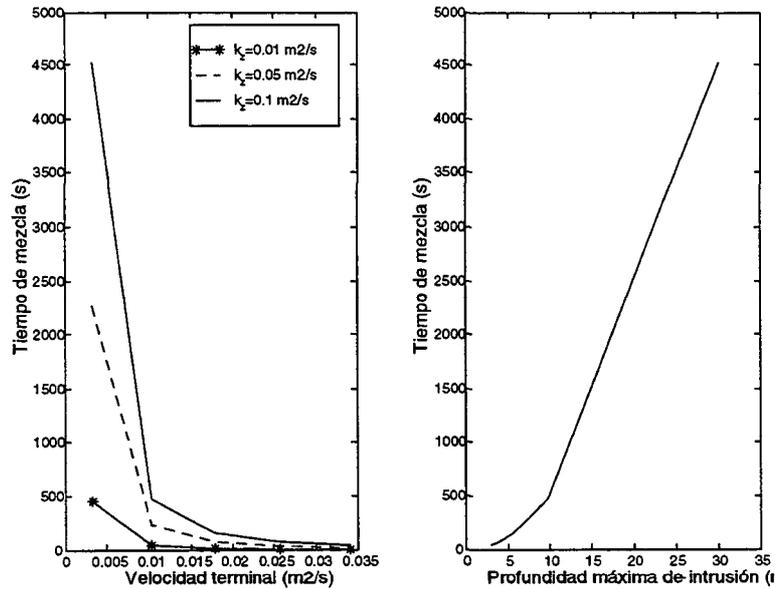


Figura 4.43. Tiempo de mezcla para partículas de petróleo con respecto a (a) velocidad terminal y (b) profundidad máxima de intrusión.

$$\sigma_x^2 = at \tag{151}$$

donde a es una constante que relacionamos con el coeficiente de dispersión turbulenta por:

$$K_x = \frac{a}{2} \tag{152}$$

Estudio del coeficiente de dispersión turbulenta: La figura 4.44 muestra los coeficientes para cada intervalo de tamaño y para cada perfil de velocidad. El resultado que se obtiene, de acuerdo a los de la varianza, es que el coeficiente de

Resultados numéricos para cada uno de los intervalos de tamaño

dispersión turbulenta aumenta a medida que disminuye el tamaño para cada perfil de velocidad utilizado, y disminuye a medida que el gradiente de velocidad del perfil se suaviza.

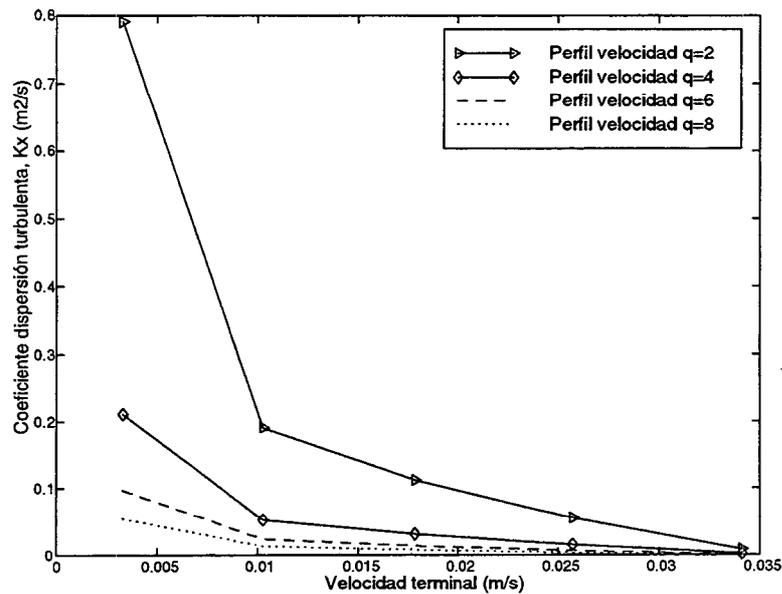


Figura 4.44. Valor de los coeficientes de dispersión turbulenta en la horizontal con respecto a la velocidad terminal para los diferentes perfiles de velocidad horizontal.

Es interesante estudiar la influencia de la flotabilidad como factor limitante en la expansión de una mancha superficial de petróleo. Una forma de hacerlo es utilizar el coeficiente de dispersión de una mancha de soluto pasivo calculado para cada uno de los perfiles y profundidad de intrusión. Para ello, necesitamos relacionar el coeficiente de dispersión turbulenta definido para un soluto pasivo con la velocidad terminal. Esto lo podemos conseguir teniendo en cuenta la relación entre el tiempo de mezcla y el coeficiente de dispersión turbulenta longitudinal en el equilibrio para una partícula de soluto pasiva. Se puede poner el coeficiente de dispersión turbulenta en función del

tiempo de mezcla expresado de la forma anterior de tal forma que se pueda relacionar el coeficiente de dispersión turbulenta con la velocidad terminal, esto es:

$$K_x = c_d T_z \bar{u}^2 = c_d \frac{K_z}{w_t^2} \bar{u}^2 \quad (153)$$

Esta ecuación permite relacionar el coeficiente de difusión con partículas con flotabilidad positiva, ya que indica que a mayor velocidad terminal, menor será la dispersión (pues habría una menor profundidad máxima de intrusión).

Generalizando la ecuación anterior para cada uno de los grupos de partículas pertenecientes a un mismo intervalo de tamaño p , el coeficiente de dispersión turbulenta se expresa por:

$$K_x^i = c_d T_z^i \bar{u}_i^2 = c_d \frac{K_z}{w_{t,i}^2} \bar{u}_i^2 \quad i = 1, \dots, p \quad (154)$$

donde T_z^i y $w_{t,i}$ son ahora el tiempo de mezcla y velocidad terminal de las partículas, pertenecientes al intervalo según tamaño i . Se ha incluido también el subíndice i en la velocidad \bar{u} para indicar que es el promedio para la velocidad en la columna delimitada por $z = 0$ y $z = z_{i,\max}$ y que por lo tanto, también dependerá del tamaño de la partícula.

Se ve así mismo, que en este caso, el coeficiente de dispersión turbulenta para una determinada velocidad terminal, K_z^i , aumenta con el coeficiente de difusión vertical. En términos de tiempo de mezcla significa un tiempo mayor, y en términos de profundidad de intrusión significa que las partículas tendrían mayor probabilidad de ser difundidas verticalmente. Esto incrementaría la expansión horizontal de la mancha. El resultado parece diferente desde el punto de vista que se obtiene al utilizar la ecuación para el coeficiente de difusión turbulenta, que es inversamente proporcional al coeficiente de difusión vertical. Sin embargo, es similar si el razonamiento se hace en términos de tiempo de mezcla: si aumenta el coeficiente

Resultados numéricos para cada uno de los intervalos de tamaño

de dispersión horizontal se incrementa en igual grado, ya que el tiempo de mezcla o el tiempo que el soluto pasivo tardaría en mezclarse en la columna disminuiría, y por lo tanto el efecto debido al gradiente de la velocidad en la vertical sería mayor (Csanady, 1972; Fischer, 1978).

En la ecuación que da el valor teórico del coeficiente de difusión turbulenta horizontal es necesario dar un valor al coeficiente c_d ; se utiliza el obtenido por Christodoulou et al. (1976) y Van Dam (1994) para perfiles logarítmicos de velocidad y que es aproximadamente de 1/300.

Los coeficientes de dispersión turbulenta calculados teóricamente a partir de la ecuación (4.154) para cada tamaño o velocidad terminal y el perfil de velocidad se muestra en la figura 4.45. Los resultados muestran que el coeficiente de dispersión turbulenta horizontal aumenta cuando disminuye la velocidad terminal o el tamaño de las partículas, mismo patrón que se obtiene de las simulaciones numéricas, pero con diferencia en magnitud.

Éstas se deben a la interacción entre el gradiente vertical de la velocidad y los procesos en la vertical. Son, por una parte, el resurgimiento de las partículas debido a su flotabilidad y, por otra, los procesos difusivos turbulentos que intentan llevar la partícula hacia el interior de la columna.

Los resultados teóricos muestran la interacción entre la difusión vertical y el gradiente de la velocidad en esa dirección, mientras que los resultados a partir de las simulaciones, se deben a la interacción entre estos mismos procesos y el efecto limitante de la velocidad terminal en la mezcla vertical. La forma en la que interactúan estos tres procesos es compleja, como se puede observar en la figura 4.46 en donde se ha calculado la diferencia relativa, δ , entre los resultados teóricos y los obtenidos a partir de las simulaciones, y se ha representado con respecto a las profundidades de intrusión. Esta diferencia relativa se ha definido como:

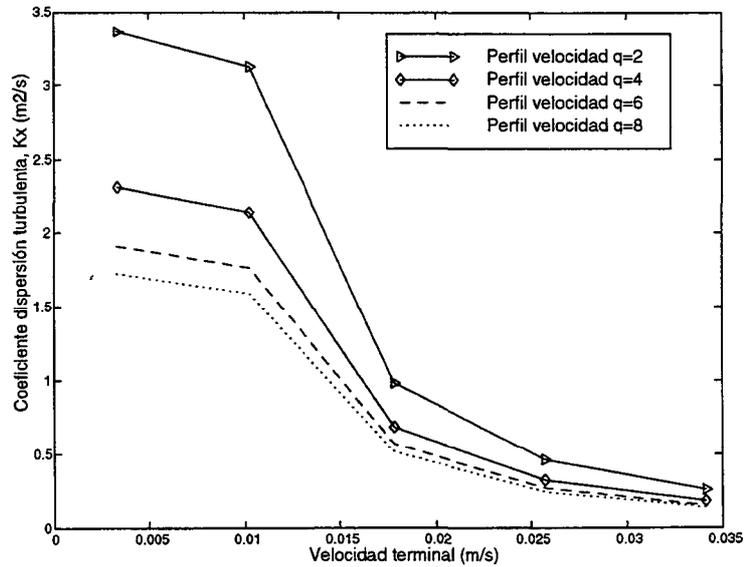


Figura 4.45. Coeficientes de dispersión turbulenta calculados a partir de la ecuación 4.154 con respecto a la velocidad terminal para diferentes perfiles de velocidad horizontal.

$$\delta = \frac{K_x - K_x^s}{K_x} \quad (155)$$

donde K_x es el coeficiente de dispersión turbulenta y K_x^s es el coeficiente de dispersión turbulenta obtenido a partir de los resultados de las simulaciones. En la figura 4.46 se observa que para las profundidades de intrusión menores, las diferencias relativas son mayores, lo que significa que existe una mayor influencia de la velocidad terminal y que los resultados numéricos se alejan del proceso de dispersión turbulenta. Esto se confirma por el hecho de que a medida que disminuye el gradiente para estas mismas profundidades de intrusión las diferencias relativas aumentan. Si aumentamos la profundidad de intrusión, el efecto del gradiente será mayor, pero a su vez, observamos que existe un aumento en la diferencia relativa, lo que nos indica que el factor

Resultados numéricos para cada uno de los intervalos de tamaño

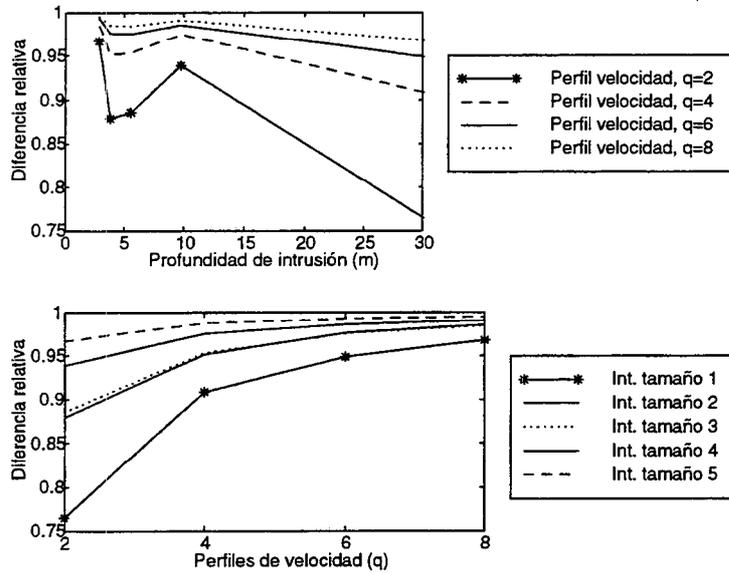


Figura 4.46. Diferencias relativas entre los coeficientes de difusión calculados a partir de la ecuación y los obtenidos a partir de las simulaciones con respecto a la velocidad terminal para los diferentes perfiles de velocidad horizontal, $u(z)$, utilizados.

velocidad terminal interactúa con la difusión vertical turbulenta y el gradiente.

A medida que el gradiente de velocidad disminuye, las diferencias relativas entre los coeficientes teóricos y numéricos aumentan. Esto significa que la expansión se debe a los efectos mayoritarios de la velocidad terminal, ya que el efecto de cizalla disminuye. Se puede observar en el perfil $q = 8$, en donde las diferencias relativas para todas las profundidades de intrusión (velocidades terminales) son similares, lo que nos indica una dispersión gobernada por la velocidad terminal como efecto dominante. Sin embargo, si aumentamos el gradiente, las diferencias relativas tienen una forma diferente. En primer lugar se observa que para la profundidad menor los coeficientes numéricos se alejan de los teóricos (las diferencias relativas son mayores y similares las de los perfiles de velocidades) debido a la mayor influencia de la velocidad terminal en el proceso de expansión. Por otro lado, a medida que aumenta el gradiente

(línea perteneciente a $q = 2$), y aumenta la profundidad de intrusión, resulta que las diferencias relativas son similares, como en los otros casos. Esto nos indica una interacción entre el gradiente, la velocidad terminal y la difusión turbulenta vertical similar.

Existe además otra restricción que no se incluye en las ecuaciones anteriores, pero que se reflejan en los resultados, y es el comportamiento de las partículas de petróleo en superficie. Una partícula pasiva cuando llega a superficie rebota y se introduce en la columna recorriendo un camino similar al que hubiera hecho si hubiera podido atravesar la superficie (condición reflectante). Sin embargo, no es correcto aplicar una condición reflectante a una partícula de petróleo al no ser real, ya que la partícula sólo puede entrar en la columna debido a las condiciones turbulentas, y no por condicionantes de cálculo. Las partículas una vez en superficie, sólo pueden entrar en la columna cuando la turbulencia las empuje de nuevo hacia la columna venciendo su flotabilidad (condición semiabsorbente). El uso de condiciones reflectantes, dará lugar a que las partículas de petróleo tengan un comportamiento más próximo a las partículas pasivas. La figura 4.47 muestra las varianzas de una mancha de petróleo cuando se han utilizado condiciones reflectantes en superficie para el perfil de velocidad calculado para $q = 6$. Se observa que la varianza, aunque aumenta también linealmente, resulta superior para todas las partículas. Sus correspondientes coeficientes de dispersión turbulenta serán por lo tanto, también mayores, pero siempre por debajo de los teóricos (figuras 4.45 y 4.48)

4.12.2 Resultados para las distribuciones

Estudio de la varianza: Los resultados obtenidos a partir de manchas de petróleo formadas por partículas del mismo tamaño, van a servir para explicar los resultados del análisis de la varianza horizontal en superficie para manchas de petróleo. Se van a formar mediante partículas de diferente tamaño que siguen las distribuciones Forrester, Uniforme y Delvigne y Sweeny. La diferencia entre las manchas así

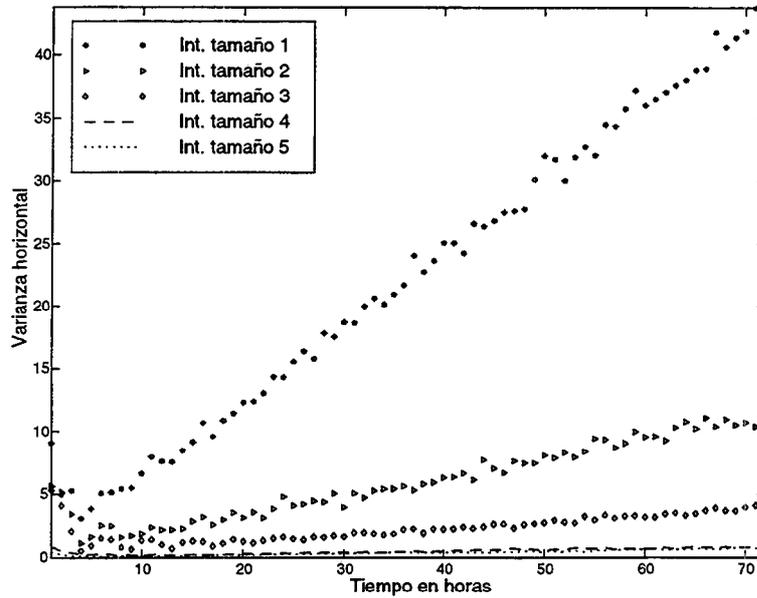


Figura 4.47. Varianza horizontal para manchas de petróleo formada por partículas de diferente tamaño para un perfil de velocidad, $u(z)$, con $q = 6$. Condiciones reflectantes en superficie.

formadas se refieren a la cantidad de petróleo contenida en cada uno de los intervalos de tamaño, y consecuentemente, de partículas.

Los resultados de las varianzas se pueden resumir como sigue para un mismo perfil de velocidad, q

$$\sigma_x^2(d, q) > \sigma_x^2(d, q + 1) \quad q = 2, \dots, 8$$

donde d representa la distribución utilizada, mientras que q es el factor correspondiente a cada perfil de velocidad. Para una misma distribución, a medida que disminuye el gradiente debido a la velocidad, disminuye así mismo la dispersión. Para un mismo perfil de velocidad, tenemos que

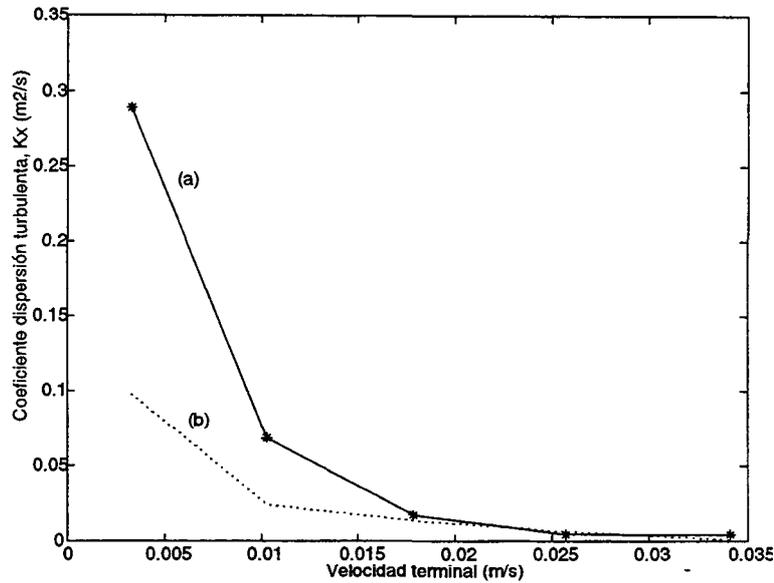


Figura 4.48. Coeficientes de dispersión turbulenta horizontal con respecto a la velocidad terminal. Condiciones reflectantes (a) y semiabsorbentes (b) en superficie.

$$\sigma_x^2(\text{Forrester}, q) > \sigma_x^2(\text{Delvigne} - \text{Sweeney}, q) > \sigma_x^2(\text{Uniforme}, q) \quad \forall q$$

donde q es el número que designa el perfil de velocidades utilizado. Los resultados muestran que aquellas manchas que estén formadas por una mayor masa de petróleo contenida en los intervalos de tamaño mas pequeños (Distribución Forrester), tendrán una mayor elongación o expansión en x , porque será el petróleo quien más sienta los efectos de la dispersión turbulenta (figura 4.49 a, b, c y d)

De igual modo, aumentando la masa contenida en los intervalos de partículas con mayor velocidad terminal, se disminuye la expansión debido a que existe una menor acción de la dispersión turbulenta para el petróleo que esté mas cercano a

Resultados para las distribuciones

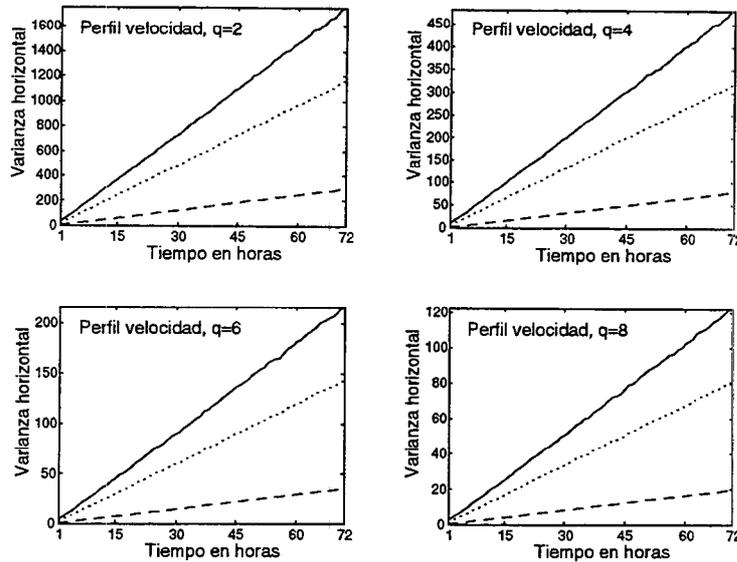


Figura 4.49. Evolución temporal de la varianza horizontal para manchas de petróleo formada por partículas de diferentes tamaños y perfiles de velocidad. Trazo grueso: distribución Forrester; trazo punteado: distribución Delvigne y Sweeney; Trazo segmentado: distribución uniforme.

la superficie. Además, el tiempo de permanencia en la columna es también menor. Esto lo podemos confirmar definiendo un tiempo de mezcla para cada una de las distribuciones de partículas, T_d , de la siguiente forma:

$$T_d = \frac{1}{N} \sum n_i T_z^i \quad i = 1, \dots, p \quad (156)$$

en donde n_i es el número de partículas que conforman el intervalo i , T_z^i es el tiempo de mezcla calculado para la velocidad terminal media de las partículas del intervalo i , y N es el número total de partículas utilizado. De esta manera, se consigue una media ponderada de todos los tiempos de mezcla para cada uno de los intervalos de tamaño. Así, las distribuciones que tengan un mayor número de partículas más

pequeñas -como es en este caso la distribución de Forrester- el tiempo de mezcla en la columna será mayor y por lo tanto, tal y como muestran los resultados, la expansión también será mayor (figura 4.50):

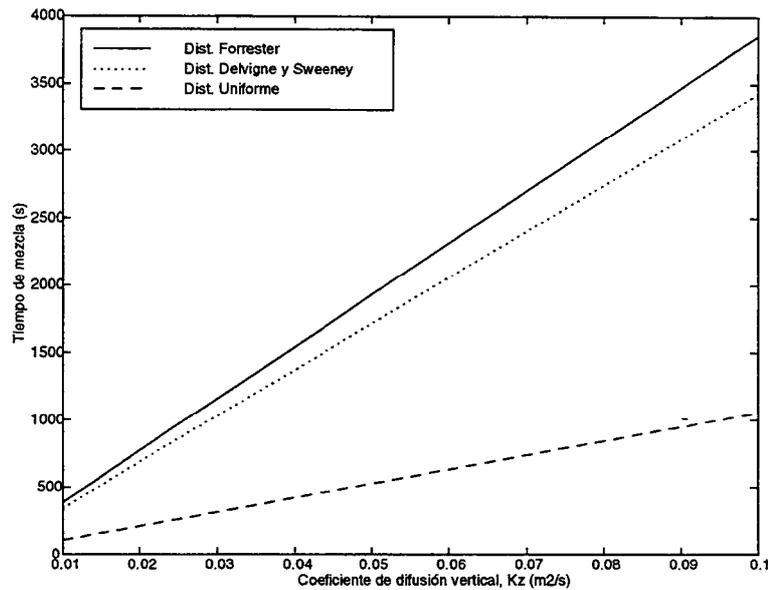


Figura 4.50. Tiempo de mezcla con respecto a varios coeficientes de difusión turbulenta vertical para las diferentes distribuciones utilizadas.

Se observa que para todo coeficiente de difusión turbulenta, se cumple que:

$$T_d(\text{Forrester}) > T_d(\text{Delvigne} - \text{Sweeney}) > T_d(\text{Uniforme})$$

Por otro lado, se observa que la evolución temporal de la expansión de la mancha, representada por la varianza, también es lineal después de las primeras horas (figura 4.51).

Estudio del coeficiente de dispersión turbulenta: Para referenciarlos a coeficientes teóricos, se necesita hacer uso del tiempo de mezcla para cada

Resultados para las distribuciones

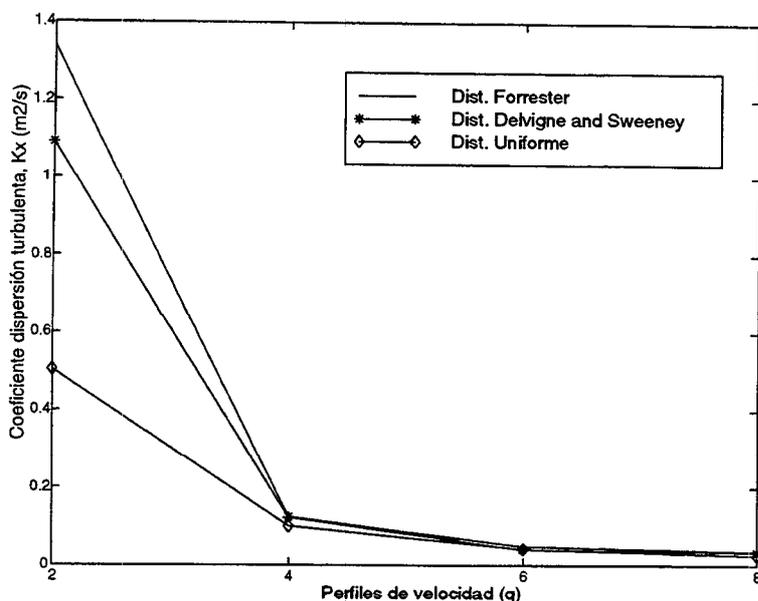


Figura 4.51. Coeficientes de dispersión turbulenta para manchas de petróleo formadas por partículas de diferente tamaño. Se han calculado a partir de simulaciones para cada uno de los perfiles de velocidad Van Veem utilizados.

distribución, obteniendo un coeficiente teórico función del número de partículas o masa que se esté utilizando. Dicho coeficiente se expresa por:

$$K_x^d = c_d T_d \bar{u}_d^2 \quad (157)$$

donde la velocidad promedio \bar{u}_d se define como el valor de la velocidad media en una columna de agua que vaya desde la superficie hasta la máxima profundidad de intrusión que pueda alcanzar alguna de las partículas ($z = 0$ hasta $z = \max(z_{i_{\max}})$). De igual forma que ocurría con las manchas formadas por partículas con igual tamaño, los coeficientes numéricos son más pequeños que los teóricos (figuras 4.51 y 4.52), debido a la influencia de la flotabilidad con la difusión turbulenta en la vertical y al

efecto del gradiente de la velocidad con la profundidad, tal y como se demostró en la sección anterior.

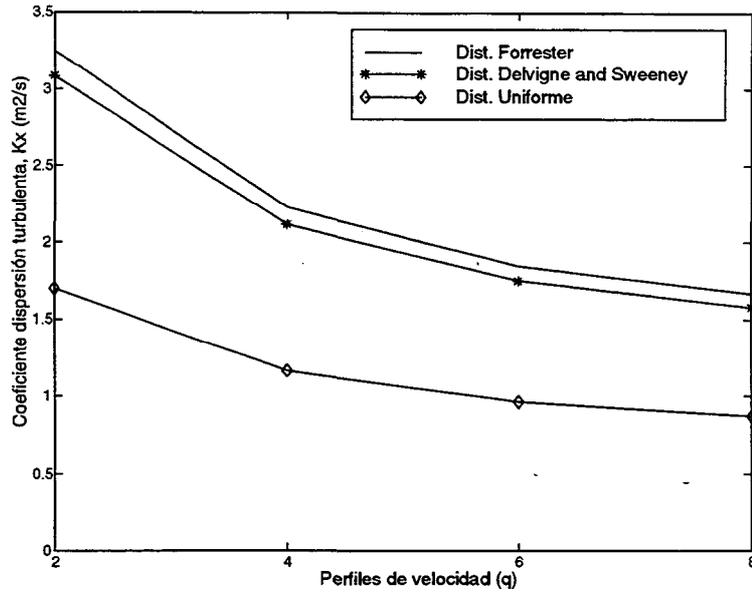


Figura 4.52. Coeficientes de dispersión turbulenta horizontal para cada uno de los perfiles de velocidad utilizados. Se consideran manchas de petróleo formadas por partículas de diferente tamaño.

4.13 Discusión

El modelo ha descrito los efectos que la dispersión turbulenta debida a la acción combinada del gradiente de velocidad horizontal en la dirección vertical con la mezcla turbulenta en la vertical, tienen sobre la expansión horizontal de la mancha de petróleo. No se ha incluido la expansión radial inicial del tipo descrito por las leyes de Fay-Blokker debido a la corta duración de los procesos de expansión y a las propias características lagrangianas del modelo, que trata con partículas de petróleo

Discusión

de diferente tamaño en lugar de manchas con dimensiones determinadas. Para escalas temporales de varias horas, después de que se introduzca el petróleo en el mar no es realista fijar el tamaño de la mancha. Por ello se necesita un modelo que de lugar a la elongación de la mancha por medio de la dispersión turbulenta. En las simulaciones presentadas se ha impuesto la condición de que la difusión horizontal sea nula. Por tanto, la expansión horizontal de la mancha se deberá únicamente a la interacción entre la flotabilidad de las partículas, la turbulencia y el gradiente de la velocidad en la columna de agua.

Gracias a ello se ha dado una visión de la expansión de una mancha de petróleo debida a la acción conjunta del gradiente de la velocidad horizontal con la profundidad y la mezcla turbulenta en la vertical, a la vez que se ha comprobado la versatilidad de los modelos lagrangianos. Éstos hacen uso de una distribución de partículas que simula adecuadamente la dispersión turbulenta del petróleo, confirmando así el hecho de que no se necesita incluir ninguna parametrización adicional en las ecuaciones de advección-difusión para dar cuenta de dicho proceso.

Haciendo uso de ello, se han realizado diferentes simulaciones para encontrar la proporción en la que una mancha de petróleo, primero formada por partículas de un mismo tamaño (se han utilizado hasta un total de cinco intervalos de tamaño) y, después, formada por diferentes distribuciones de partículas según tamaño (Distribución Forrester, Uniforme y de Delvigne and Sweeny), crece con el tiempo. Se ha definido un coeficiente efectivo de difusión en la horizontal, basado en la relación entre el coeficiente de dispersión turbulenta, K_x , y el tiempo de mezcla en la columna, T_z . Se ha definido un coeficiente de dispersión turbulenta en la horizontal, K_x^i para cada intervalo de tamaño y análogamente un K_x^d para cada distribución según tamaño, d , definiéndolos relativos al tiempo de mezcla para cada intervalo de tamaño o distribución utilizada.

Los resultados de las simulaciones empleando una mancha de petróleo formada por partículas del mismo tamaño, han mostrado cómo para todos los perfiles de velocidad utilizados, la expansión superficial de la mancha, caracterizada por su

varianza, aumentaba a medida que disminuía el tamaño de las partículas. Se debe al hecho de que dichas partículas estarán durante más tiempo en la columna, y podrán por tanto sentir los efectos de la dispersión turbulenta durante más tiempo, con lo que resultará en una mayor expansión horizontal. Se ha comprobado, así mismo, cómo la varianza va a disminuir a medida que el gradiente vertical de la velocidad horizontal disminuya, por lo que se reducirá en igual medida la dispersión turbulenta. Por otro lado, estudiando la variación temporal de la expansión de la mancha, se observa cómo la varianza aumenta linealmente con el tiempo a partir de las primeras horas. Este resultado permite asemejarlo con un proceso de tipo fickiano, y que en términos de dispersión turbulenta se refieren al estado en el que el soluto ya se ha mezclado por toda la columna (ver p.e. Csanady, 1972; Bowden y Lewis, 1973; Fischer, 1979, Ozmidov, 1990). Los resultados permiten distinguir un estado inicial en el que el crecimiento de la mancha variaba de con t^2 pasando después a un crecimiento lineal. Este crecimiento de la varianza de forma lineal con el tiempo se explica teniendo en cuenta que las partículas alcanzarán en pocas horas la profundidad máxima de intrusión, $z_{i_{max}}$, dando lugar a la aparición de una expansión lineal de la mancha, que correspondería al segundo estado establecido por Elliot (1986).

Se han comparado los coeficientes de dispersión turbulenta obtenidos a partir de las simulaciones con los calculados a partir de la formulación que se ha desarrollado para el coeficiente de dispersión turbulenta. Para cada una de los tamaños de partículas utilizadas, se ha hecho uso del tiempo de mezcla, obteniéndose coeficientes mayores que los numéricos para todos los casos simulados. Es debido a que las partículas de petróleo no son partículas pasivas sino con flotabilidad positiva, restringiendo por tanto la difusión en la vertical, que se traduce en una menor dispersión horizontal turbulenta. La simulación de partículas de petróleo necesita de una condición en superficie adecuada, tal que cuando la partícula llegue a superficie no rebote como en las clásicas condiciones reflectantes que se utilizan en las modelizaciones lagrangianas por camino aleatorio. Se trata de que el petróleo simule la flotabilidad positiva, de tal forma que pueda volver a entrar en la columna siempre que la turbulencia la empuje

Discusión

de nuevo (*condición semiabsorbente*). Esto dará lugar a que cuando las partículas alcancen la superficie, no se expandan horizontalmente, por lo que resultará en una menor varianza horizontal y consecuentemente en un menor coeficiente de dispersión turbulenta. Teóricamente, la varianza horizontal para el caso de las partículas pertenecientes a los intervalos de tamaño 1 y al 2 debiera ser similar, como se ve en los resultados. Sin embargo, en todas las simulaciones, la varianza de la mancha formada por las partículas de intervalo de tamaño 1 es bastante superior a la del 2. Esto muestra, una vez más, cómo la flotabilidad de las partículas restringe el efecto del gradiente vertical de velocidad, pues aunque las profundidades de máxima intrusión para ambos intervalos de tamaño sean similares, en la práctica, las partículas más pequeñas tendrán más probabilidad de volver a la columna de agua que las otras, debido a que la turbulencia podrá ser superior a su flotabilidad.

Los resultados referentes a las simulaciones de la dispersión turbulenta de una mancha de petróleo que siguen una de las distribuciones definidas anteriormente, muestran que la varianza mayor corresponde a las formadas según una Distribución Forrester, la sigue la Distribución Delvigne y Sweeney y por último, la varianza menor corresponde a la Distribución Uniforme, patrón que se repite para cada uno de los perfiles de velocidad utilizado. La explicación es obvia, por el hecho de que el volumen de petróleo contenido en cada uno de los intervalos de tamaño para la distribución Forrester es el mismo, mientras que en la distribución uniforme, la mayor parte de la masa de petróleo está concentrado en las partículas mayores, que son las que tienen una menor expansión horizontal debido a su flotabilidad.

Los tiempos de mezcla definidos para cada una de las distribuciones como la media ponderada de cada uno de los tiempos de mezcla para cada intervalo de tamaño, es una medida de cómo será la expansión horizontal para las manchas formadas por partículas siguiendo una distribución u otra. El coeficiente teórico calculado de esa forma, sigue los patrones que se encuentran para partículas individuales, en donde los coeficientes teóricos eran superiores a los encontrados a partir de la simulación. Se explicaban en base a la condición de contorno utilizada en superficie, que hacía a

las partículas de petróleo comportarse como partículas con flotabilidad positiva y no como partículas pasivas.

El modelo representa además el hecho de que las partículas más grandes estén en la cabeza de la mancha, y que las más pequeñas se encuentren formando parte de la cola, característica que se ha encontrado en las observaciones *in situ* en derrames de petróleo.

4.14 Conclusiones

A partir de los resultados se pueden obtener varias conclusiones referentes a la expansión de una mancha de petróleo debido al efecto combinado de un campo de velocidades horizontales con gradiente en la vertical y la difusión turbulenta en la misma dirección. Estas conclusiones se resumen en:

- (1) El uso de un modelo lagrangiano permite la simulación adecuada de procesos tales como la expansión de una mancha de petróleo debido a la dispersión turbulenta sin necesidad de incluir ningún término adicional en las ecuaciones de difusión-advención.
- (2) Las dimensiones de la mancha deben ser el resultado de procesos debido a condiciones medioambientales, como son la dispersión turbulenta, difusión turbulenta horizontal, expansión debido al viento y circulación Langmuir, y no ser debidas únicamente a las propiedades físico-químicas del petróleo.
- (3) Se ha comprobado la dependencia de la expansión de la mancha con respecto al tamaño de las partículas que la forman, de tal manera, que a medida que disminuye el tamaño de las partículas aumenta la expansión horizontal del petróleo.
- (4) Con ello se ha verificado la dependencia de la expansión de la mancha respecto a la distribución que siguen las partículas, dando como resultado que existe una mayor dispersión para aquellas distribuciones que contengan un mayor número

Conclusiones

de partículas más pequeñas.

- (5) Finalmente, se ha encontrado que la diferencia en la expansión de una mancha de petróleo con respecto a una mancha de soluto pasivo, se debe no sólo a la flotabilidad sino a las condiciones de contorno impuestas en superficie.

Parte III

Aplicación tridimensional: estudio de los procesos físicos relacionados con el derrame *North Cape*

4.15 Introducción

En las secciones precedentes se ha estudiado la dispersión mecánica de una mancha superficial por oleaje rompiente y su relación con la distribución de las partículas según tamaño. A continuación, se ha aplicado el modelo a realizar un estudio bidimensional acerca de cómo afectan a la difusión por gradiente de velocidad las distribuciones utilizadas. En ambos casos, los resultados demostraron una elevada dependencia de los procesos con respecto a la distribución utilizada o los tamaños de las partículas empleados.

En esta sección, se estudia la validez del modelo lagrangiano de camino aleatorio para representar la hidrodinámica que incluye el modelo: advección, difusión turbulenta y dispersión mecánica por oleaje rompiente. Para ello se compararán los resultados numéricos obtenidos a partir de las simulaciones con los datos referentes al derrame de petróleo producido por el encallamiento del carguero *North Cape* en aguas costeras de Rhode Island en enero de 1996.

La elección de este derrame de petróleo para utilizarlo en la validación del modelo se debe, aparte de la disponibilidad de datos obtenidos in situ, a una característica

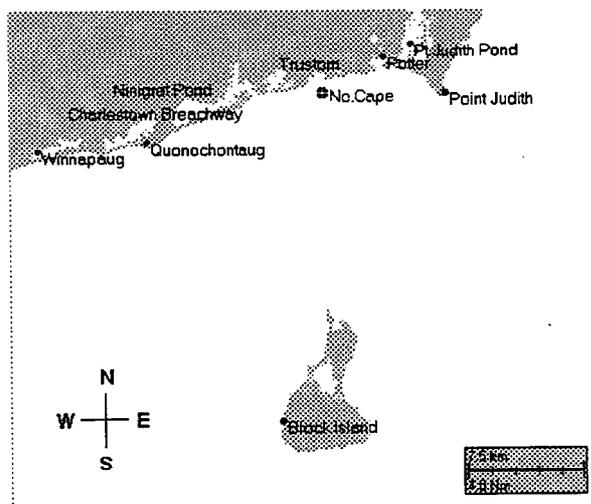


Figura 4.53. Mapa de la zona afectada por el derrame. En él se sitúa el lugar donde encalló el barco y los lugares mencionados en el trabajo.

permitieron describir aproximadamente el movimiento del petróleo en todo momento. El petróleo se transportó inicialmente hacia el este en una dirección paralela a la costa hacia el puerto de Point Judith durante las horas finales del 19 de enero y las primeras del 20 de enero debido fundamentalmente a las mareas y corrientes de la zona. A la vez, fuertes vientos dirigidos hacia la costa originaron un oleaje que rompía sobre el carguero y el petróleo derramado. El petróleo entró en las lagunas, incluida la de Pt. Judith, al norte del puerto. Al día siguiente, los vientos rolaron hacia el oeste y posteriormente hacia el noroeste, alejando el petróleo de la costa. En la mañana del 21 de enero, con vientos del noreste, el petróleo superficial alcanzó la costa de Block Island. La extensión y forma de la mancha se puede apreciar en la Figura 4.54. En los próximos dos días el petróleo se transportó inicialmente al oeste y para volver después de nuevo hacia la costa cuando los vientos rolaron hacia el sur y sudoeste.

El petróleo se expandió rápidamente en bandas estrechas y capas muy delgadas, características por su brillo. Las pérdidas por evaporación fueron elevadas, dando lugar a un olor que se percibió en tierra durante 3 o 4 días. Debido al oleaje reinante en la zona donde naufragó el carguero, el petróleo se dispersó rápidamente a través

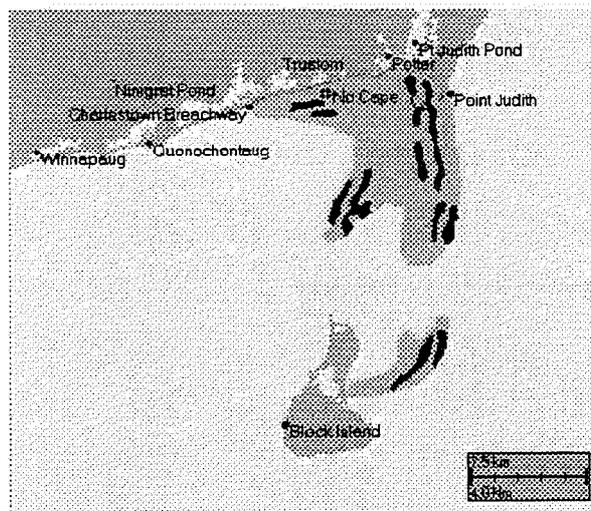


Figura 4.54. Extensión y forma del derrame causado por el carguero *North Cape* para el día 21 de enero de 1996. El petróleo ha alcanzado Block Island

de la columna de agua y fue transportado a lo largo de la misma por mareas y oleaje, originando una pluma subsuperficial tóxica. Para el momento en que el petróleo alcanzó Block Island, poco permanecía en la superficie del mar, y el que había, estaba formando principalmente bandas estrechas muy delgadas y brillantes.

Toda esta información será empleada para contrastar los resultados del modelo. En base a esta información y a partir de los resultados numéricos se puede afirmar que el modelo simula las principales características del movimiento del petróleo, como son la trayectoria principal del petróleo superficial, su llegada en tiempo a Block Island, así como la entrada de petróleo en el puerto de Pt. Judith. A continuación se describen los métodos que han permitido comparar los resultados numéricos con los datos del petróleo superficial del derrame *North Cape*, así como los resultados numéricos obtenidos a partir de las simulaciones.

4.15.1.1 Método y resultados

El movimiento de la mancha superficial del petróleo no sólo está gobernada por las corrientes y la difusión turbulenta; además actúa el arrastre del viento sobre la mancha. Añadido a esto, los procesos que se dan en la vertical, influyen en el

movimiento global del petróleo de tal forma que si aumenta la cantidad de petróleo que entra en la columna de agua por dispersión mecánica debida al oleaje rompiente, la expansión horizontal de la mancha aumentará debido a la difusión turbulenta por el efecto del gradiente de velocidad, como se demostró en la simulación bidimensional.

Método

Estos procesos que afectan el movimiento de la mancha de petróleo se han incluido en el modelo de forma directa, ya sea mediante la implementación de una formulación apropiada -como es el caso de dispersión mecánica- o la introducción de coeficientes que cuantifiquen el proceso, como es el caso del arrastre del viento sobre la mancha (Ozmidov, 1990; Lehr, 1996; ASCE, 1996; Spaulding et al, 1996). Sin embargo, la expansión horizontal de la mancha superficial es consecuencia natural de una simulación tridimensional y, por lo tanto, no hay necesidad de implementarla (Christodoulou et al., 1976). Las condiciones en las que se ha simulado el transporte del petróleo se describen a continuación:

- (1) *Liberación temporal del petróleo:* Se plantean tres simulaciones que se diferencian en la forma en la que se libera el petróleo en el mar. En todas ellas, el tiempo total durante el cual se introducen 800.000 galones de petróleo en el mar comprende desde que comenzó el derrame el día 19 de enero a las 20 h hasta el día 20 de enero a las 24 h. La primera simulación, que se designa por **F1**, consiste en liberar la misma cantidad de petróleo en intervalos iguales de tiempo durante el periodo antes mencionado. La segunda simulación, **F2**, consiste en la liberación de la mayor parte del petróleo (700.000 galones) durante las primeras horas del derrame, desde el día 19 de enero a las 20 h al día 20 de enero a las 8 horas. El petróleo restante se liberó desde las 9 h del día 20 hasta las 24 h de ese mismo día, cumpliéndose, por lo tanto, un tiempo total aproximadamente igual al de la simulación **F1**. Por último, la elección de las condiciones de liberación de petróleo para la tercera simulación, **F3**, se basa en las observaciones *in situ* acerca de la

Método y resultados

proporción y tiempo de liberación del petróleo, por lo que 700.000 galones de petróleo se introducen en el mar desde las 20 h del día 19 hasta las 24 h del mismo día, y los 100.000 galones restantes se introducen desde las 12 h del día 20 hasta las 24 h de ese mismo día, coincidiendo la primera liberación y las primeras horas de la segunda, con las mareas bajas.

- (2) *Liberación espacial del petróleo*: Para cada una de las simulaciones anteriores se va a utilizar dos formas diferentes de introducir el petróleo en el mar: en primer lugar se liberará el 0% del petróleo en la columna de agua, con lo que simulará la liberación de petróleo exclusivamente *superficial*; en segundo lugar, se liberará el 100% de petróleo en la *columna* de agua. De esta forma, se conocerá el comportamiento del petróleo en dos condiciones extremas. Para ambos casos, el petróleo se distribuye espacialmente ocupando un área similar a la sección longitudinal del carguero encallado. Imponiendo esta distribución inicial se consigue por un lado simular las condiciones de salida del petróleo y, por otro, introducir una expansión inicial que puede reemplazar a la que sufre una mancha de petróleo por sus propiedades físico-químicas.
- (3) *Distribución de partículas dependiendo del tamaño*: Las distribuciones que se van a utilizar son las mismas empleadas para las simulaciones precedentes: Distribución Forrester, Distribución Delvigne-Sweeney y Distribución Uniforme.

Resultados

Hay dos formas de caracterizar la mancha de petróleo: representando la posición de las partículas de petróleo o trazando las isolíneas de concentración. En general, para observar el movimiento de la mancha resulta conveniente emplear las partículas además de que nos da una visión más realista de su expansión. Sin embargo, para los casos que se presentan aquí, es mejor utilizar el segundo método de representación, ya que se clarifican los contornos. Dentro de las condiciones que se han impuesto al modelo, se va a caracterizar el comportamiento del modelo ante el factor de *liberación*

Método y resultados

Una vez analizado cómo influyen las distintas formas de liberación temporal, se ha procedido a caracterizar el efecto de la *liberación espacial*, es decir, qué resultado se obtiene cuando se libera todo el petróleo en superficie o todo en columna. En lo que respecta a estos resultados, se muestran para la liberación en superficie la Figura 4.58 y en columna la Figura 4.59. Las diferencias residen en la dispersión del petróleo superficial, existiendo más cantidad de petróleo en superficie para aquellas simulaciones en las que todo el petróleo se ha liberado en superficie. Sin embargo, no existe ninguna diferencia apreciable con respecto a la localización y tiempo de llegada de la mancha superficial de petróleo a Block Island para ambas simulaciones.

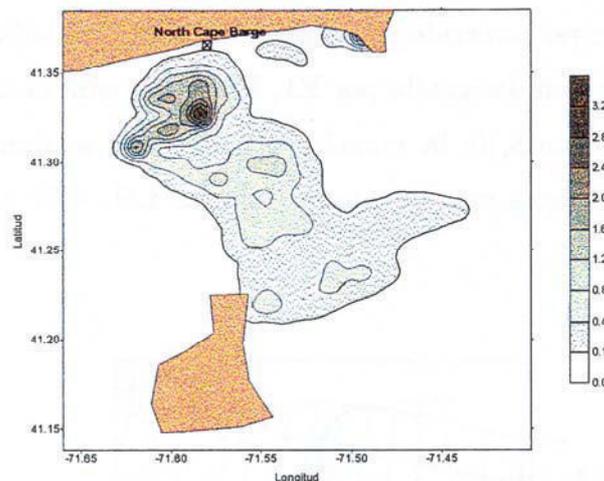


Figura 4.56. Mancha superficial de petróleo para la simulación F1 cuando el 0% del petróleo se libera en la columna de agua. Se utiliza una distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones dadas en ppm).

Por último, el factor que se estudia en cuanto al comportamiento del petróleo superficial es la influencia de las diferentes distribuciones de partículas en el movimiento de la mancha. Como se observa a partir de los resultados, las distintas distribuciones de partículas según tamaño que se han utilizado tampoco afectan al movimiento promedio de la mancha superficial. Sin embargo, tal y como se vió en la simulación bidimensional, va a influir en la expansión horizontal. Así se verifica que las

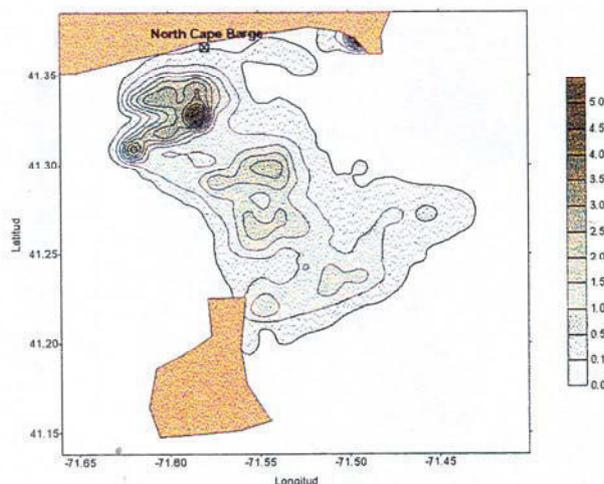


Figura 4.57. Mancha superficial de petróleo para la simulación F2 cuando el 0% del petróleo se libera en la columna de agua. Se utiliza una distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones dadas en *ppm*).

manchas formadas siguiendo una distribución Forrester, que se caracteriza por tener un mayor fracción de masa de petróleo contenida en las partículas de tamaño mas pequeño presenta expansión horizontal mayor (Figura 4.60) que la mancha formada por la distribución Uniforme (Figura 4.61). Recordemos que para esta distribución las partículas pertenecientes al menor intervalo de tamaño ocupan una fracción mínima de masa de petróleo. Además, el contenido de petróleo en la mancha superficial variará de acuerdo a la distribución de igual manera que la expansión. Tal y como se comprobó en el estudio de la expansión horizontal, una mayor fracción de petróleo en columna se traduce en una mayor expansión. Se comprueba de esta manera lo que se afirmo acerca de la expansión horizontal del petróleo: a mayor cantidad de petróleo en columna mayor será la expansión horizontal en la mancha, ya que el petróleo sentirá durante más tiempo los efectos de los gradientes verticales de velocidad.

Un dato significativo es que, en todos los casos, parte de la zona costera no presenta mancha superficial de petróleo. Sin embargo, se ha demostrado que el movimiento del petróleo dado por las simulaciones se corresponde con las observaciones sobre el derrame. Ocurre que, aunque la implementación que se ha utilizado para simular el

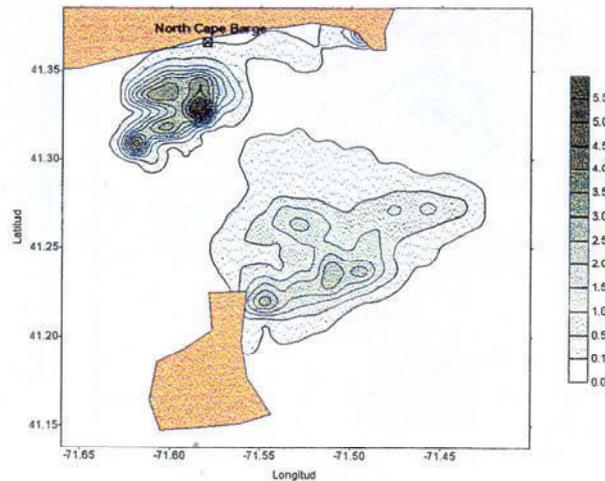


Figura 4.58. Mancha superficial de petróleo para la simulación **F3** cuando el 0% del petróleo se libera en la columna de agua. Se utiliza una distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones dadas en ppm).

movimiento en costa es correcta, no se han introducido todos los procesos costeros que puedan originar dicha acumulación de petróleo. Así por ejemplo, la deposición y reflotación del petróleo en costa, la interacción del petróleo con los sedimentos costeros y los procesos de oleaje costero que dan lugar al aumento de la dispersión mecánica del petróleo y su consecuente transporte subsuperficial son procesos que sin duda han de tener influencia en la expansión de la mancha superficial pero que no han sido incluidos en esta modelización.

En resumen, se ha comprobado que el modelo predice correctamente la localización y tiempo de llegada de la mancha a Block Island independientemente de la forma en la que se libere el petróleo en superficie, la distribución de partículas según tamaño y la implementación en costa utilizada. Con respecto a estos factores, los resultados indican que existe una mayor correlación entre la mancha superficial obtenida a partir de las simulaciones en las que se ha liberado el petróleo de forma discontinua, y que la expansión de la mancha es superior dependiendo tanto de la forma de liberar el petróleo en la columna de agua, como de la distribución de las partículas según

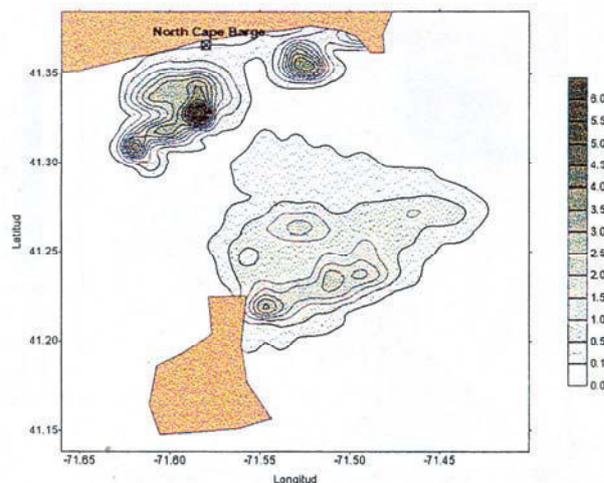


Figura 4.59. Mancha superficial de petróleo para la simulación F3 cuando el 100% del petróleo se libera en la columna de agua. Se utiliza una distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones dadas en ppm).

tamaño utilizada. Por último, es importante observar cómo la implementación del comportamiento del petróleo en la costa no puede ser restringida al movimiento dado por las corrientes mareales promedio, sino que para la correcta evaluación de la distribución del petróleo en costa será necesario incluir los procesos costeros enumerados anteriormente.

4.15.2 Petróleo subsuperficial

Una de las ventajas que ofrece la modelización tridimensional de un derrame de petróleo es el seguimiento del movimiento de la mancha del petróleo subsuperficial. Durante el derrame *Braer* quedó patente la necesidad de seguir la trayectoria del petróleo que entró en columna, así como su cuantificación. En el derrame de petróleo *North Cape*, las observaciones *in situ* mostraron que el petróleo entró en la columna de agua en grandes cantidades, ya que la mayoría del petróleo se liberó por debajo de la superficie (costados y fondo del carguero), al mismo tiempo que un fuerte oleaje, con olas mayores de 5 m, rompía sobre el barco ocasionando que el petróleo se mezclara rápidamente en toda la columna de agua alrededor del carguero (Spaulding et al.,

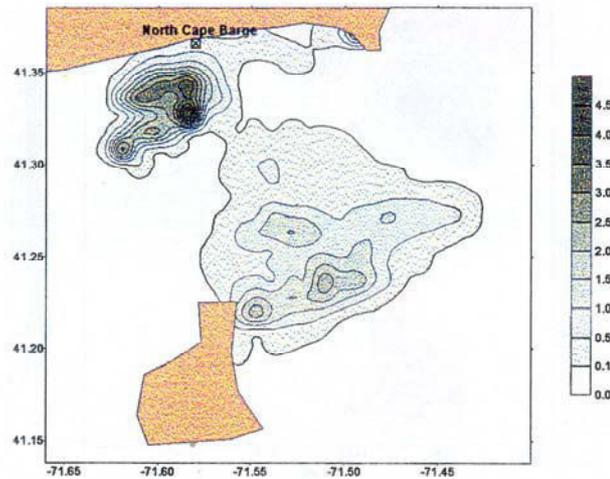


Figura 4.60. Mancha superficial de petróleo para la simulación F3 cuando el 0% de petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Forrester (concentraciones dadas en ppm)

1996; French, 1998).

Este petróleo subsuperficial se movió de diferente forma al superficial. El petróleo superficial fue arrastrado paralelamente a lo largo de la costa, y cuando los vientos cambiaron de dirección, se alejó de la costa adentrándose en mar abierto. Por contra, el movimiento del petróleo subsuperficial fue paralelo a la costa debido a las corrientes mareales que lo transportaron desde el oeste al este y viceversa (Lehr et al. 1996; French, 1998). Así, la evidencia de elevadas concentraciones de petróleo subsuperficial barriendo una amplia zona costera apareció al día siguiente al derrame, cuando la costa se cubrió de organismos bentónicos muertos. En base a los datos referentes a la biota dañada, se pudo establecer que la pluma de petróleo subsuperficial principal cubrió un área aproximada a 10 km en dirección paralela a la costa y 4 km en dirección transversal (Figura 4.62).

Durante el día 21, cuando las condiciones meteorológicas lo permitieron, se pudieron realizar mediciones de las concentraciones de petróleo subsuperficial a profundidades aproximadamente 1 m por encima del fondo y a distancias de 0.5, 1.0 y 2.0 millas náuticas de la costa a lo largo de cinco radiales (Figura 4.63a). Se

Petróleo superficial

señalada que se produjo en este derrame: la elevada entrada de petróleo en la columna de agua. Esto significó una gran influencia de los procesos verticales en el movimiento y destino final del petróleo derramado y va a permitir profundizar en el conocimiento de los procesos físicos que se registran en la vertical.

Aspectos relacionados con la forma de liberar el petróleo, tipos de fuentes, así como la influencia de la distribución de las partículas según tamaño, servirán para detallar los inconvenientes y ventajas de una modelización de camino aleatorio para simular el movimiento tanto del petróleo superficial como del subsuperficial. Finalmente se discutirán los resultados, a partir de los cuales se derivarán las correspondientes conclusiones.

4.15.1 Petrónimo superficial

El carguero *North Cape* naufragó en las costas de Rhode Island, cerca de Moonstone Beach, Narragansett (Rhode Island, EEUU), en el lugar dado por las coordenadas $41^{\circ}21'N$, $71^{\circ}34'W$, durante una tormenta en la tarde del 19 de enero de 1996, y comenzó a liberar su carga de petróleo N^o2 en el Estrecho de Block Island (Figura 4.53). El derrame de petróleo comenzó alrededor de las 20 : 30 h y en días sucesivos perdió aproximadamente 828.000 galones de petróleo.

La liberación de petróleo del carguero fue discontinua, tanto en proporción como en tiempo. Se pudo observar que estaba relacionada con las mareas, de tal forma que se registraron niveles superiores de petróleo durante los periodos de marea baja (Spaulding et al., 1996). Un dato complementario es que la mayor parte del total del petróleo que entró en el mar se liberó durante las primeras horas del derrame. Posteriormente paró hasta el mediodía del día 20 de enero, para comenzar de nuevo y cesando definitivamente el día 21 (Lehr et al. 1996).

Las observaciones aéreas realizadas por la agencia gubernamental estadounidense NOAA (National Oceanic and Atmospheric Administration), así como las informaciones proporcionadas por distintos medios de comunicación locales,

temporal. Si se comparan los resultados de las simulaciones **F1**, **F2** y **F3** (Figuras 4.56, 4.57 y 4.58) con la fotografía aérea de la mancha superficial (Figura 4.54), se puede afirmar que la que se aproxima mejor es la que se obtiene de la simulación **F3**. En esta simulación se ajustaron las fuentes de tal forma que la mayor parte del petróleo se liberó durante las primeras horas del derrame, que coincidieron con la marea baja. Además, los resultados muestran que la mancha superficial de petróleo sigue una trayectoria similar a la descrita por las observaciones. En la Figura 4.55 se observa, efectivamente, que el movimiento del petróleo a lo largo de la costa es tal que alcanza las proximidades del puerto de Pt. Judith y a partir de ese punto, se adentra en el océano abierto para más tarde llegar a las proximidades de Block Island la mañana del día 21, resultados que coinciden con las observaciones del derrame acerca del camino principal recorrido por el petróleo. Por otro lado, para cada una de las simulaciones que se han designado por **F1**, **F2** y **F3**, aunque no existe diferencia notable entre el movimiento de la mancha superficial sí se dan diferencias en su expansión horizontal. Véanse nuevamente las Figuras 4.56, 4.57 y 4.58.

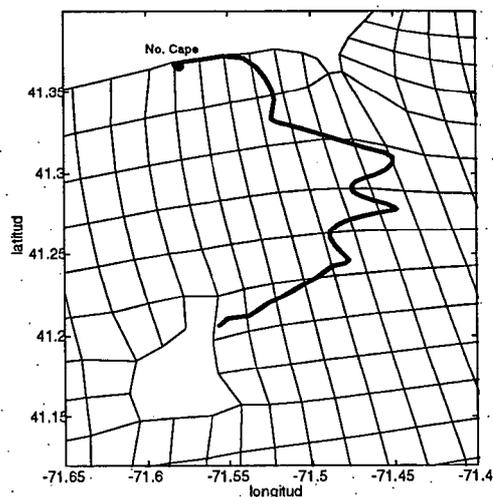


Figura 4.55. Trayectoria del centroide de la mancha superficial desde el día 19 a las 20 horas hasta el 21 a las 9 horas.

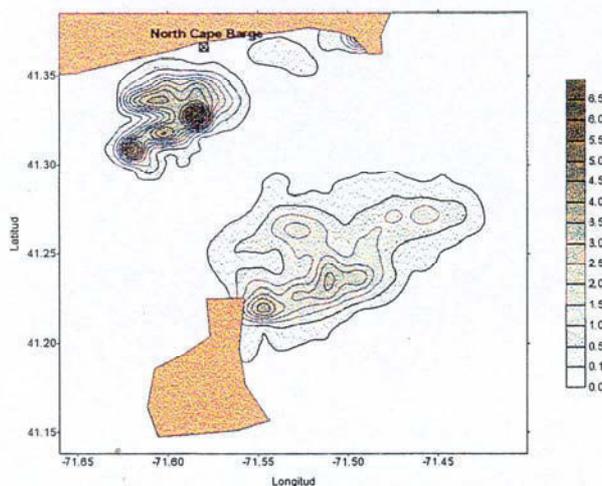


Figura 4.61. Mancha superficial de petróleo para la simulación F3 cuando el 0% de petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Uniforme (concentraciones dadas en ppm)

midió además el petróleo en los ponds, obteniendo medidas elevadas de concentración de petróleo: de 0.5 a 3.5 ppm en el pond de Pt. Judith y 5 ppm en el de Trustom que, como se observa en la Figura (4.54) corresponden a los ponds situados en la costa justo en la línea en donde el carguro naufragó y al punto de la costa a donde el petróleo llegó movido por las corrientes mareales. A continuación se establece el método con el que se van a comparar los resultados numéricos con respecto al petróleo subsuperficial, su movimiento y distribución en la columna y los resultados reales.

4.15.2.1 Método y resultados

Para poder estudiar la versatilidad del modelo con respecto al transporte del petróleo subsuperficial, se necesitaría tener datos similares a los de la mancha superficial, en donde se han utilizado tanto observaciones *in situ* como fotografías aéreas para contrastar los resultados. Los datos referentes al petróleo subsuperficial se restringen, sin embargo, a ciertas evidencias encontradas en la zona, como la elevada mortalidad de organismos bentónicos y medidas directas de la concentración de petróleo cerca del fondo en varias estaciones situadas en la zona costera. Esto permite que, al menos, se

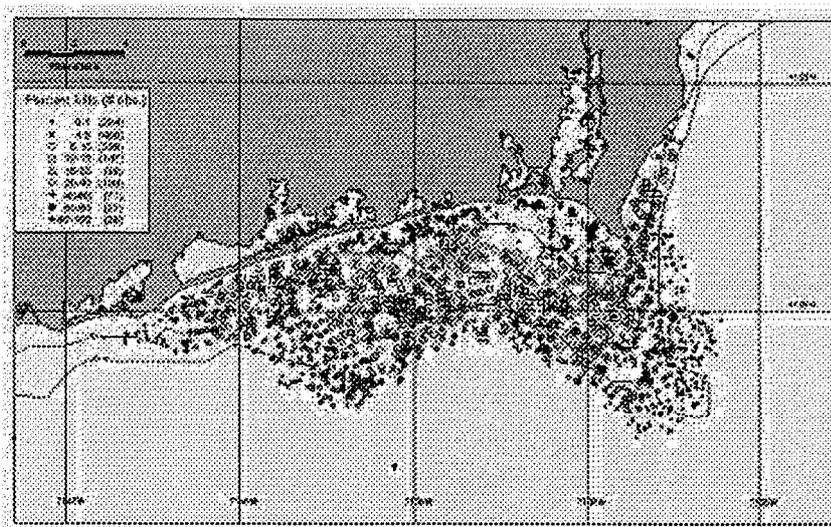


Figura 4.62. Área afectada por el petróleo subterráneo. En la figura da una idea de la biota dañada.

puedan comparar dos aspectos relacionados con el petróleo subterráneo. El primero se refiere al movimiento y expansión del petróleo en la columna de agua, y que se puede realizar comparando los resultados numéricos con los estudios efectuados en la zona en donde existió gran mortandad de organismos bentónicos, ya que no van a estar afectados por la mancha superficial de petróleo (French, 1998). El segundo aspecto trata de la comparación cualitativa entre los resultados numéricos y las medidas de la concentración de petróleo contenido en la columna de agua, cerca del fondo. No se puede, sin embargo, realizar una comparación cuantitativa de la cantidad de petróleo en la columna de agua, ya que no se han incluido en la modelización procesos como la evaporación y la disolución, que dan lugar a una variación de la concentración del petróleo en el agua.

Las condiciones en las que se va a liberar el petróleo en el mar en las simulaciones se van a elegir en base a las observaciones *in situ*: por una parte el petróleo se liberó por debajo de la superficie y, por otra, el oleaje de tipo shoaling que rompía sobre el barco dió lugar a un rápida mezcla del petróleo en la columna. Debido a que la dispersión mecánica que se utiliza en la modelización está descrita por una formulación en donde

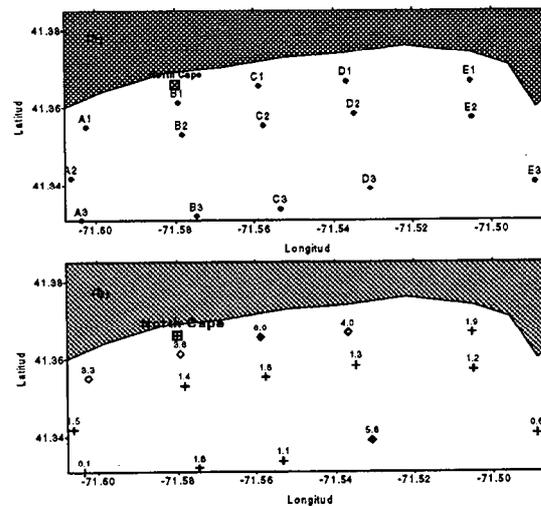


Figura 4.63. (a) Localización de las estaciones cercanas a la costa en donde se midió la cantidad de petróleo total en la columna de agua a profundidades de 1 m por encima del fondo durante el día 21 a las 12 h (b) Valores de concentración de petróleo en ppm tomados en dichas estaciones (Latimer, 1996)

se cuantifica la entrada de petróleo en el agua por oleaje rompiente spilling, se elige una simulación en la que el 60% del petróleo se inyecta en columna para que de esa forma se incluya en alguna medida la dispersión por oleaje shoaling (Spaulding et al., 1996). Paralelamente, teniendo en cuenta que el petróleo se liberaba alrededor del carguero, se incluye una distribución espacial del petróleo correspondiente a la superficie del barco. Además, se ha elegido liberar la mayor parte del petróleo durante las mareas bajas (simulación **F3**) ya que se observó que los resultados utilizando este tipo de liberación del petróleo eran próximos a la mancha superficial encontrada durante el rastreo aéreo realizado el 21 de enero a las 8:30 h.

Petróleo subsuperficial

La mancha subsuperficial de petróleo representada por una nube de partículas de los rangos que se han utilizado en las simulaciones, se muestra en la Figura 4.64. Se observa que el petróleo se sitúa entre la costa y el norte de Block Island, y se extiende de tal forma que incluye la banda costera en donde se dió la mayor mortandad de la biota bentónica. La nube de partículas sirve para distinguir el comportamiento según

Método y resultados

el tamaño de las partículas; así, se observa una mayor acumulación de partículas pertenecientes al intervalo menor de tamaño cercana a la costa, mientras que las partículas mayores se van adentrando en mar abierto. Además, existe petróleo en Pt. Judith, indicado por las partículas de menor tamaño. Sin embargo, en mar abierto, la mayoría de las partículas pertenecen a los intervalos más pequeños, debido a que pertenecen al primer y mayor derrame, que se ha ido alejando de la tierra y acercándose a Block Island. Durante ese recorrido las partículas de mayor tamaño han vuelto a superficie, debido a que los mecanismos que introducen petróleo -y que de igual forma lo retienen- cesaron a partir del segundo día del derrame al ser los vientos inferiores al valor límite de 5 m/s (Figura 4.26), condición necesaria para que exista el oleaje que se ha introducido en la simulación. El petróleo subsuperficial se mueve de diferente manera que el superficial, tal y como se muestra en la Figura 4.65, en donde el centroide de la mancha de petróleo va barriendo la zona costera durante las primeras horas después del derrame hasta que las propias corrientes mareales varían en dirección y se dirigen hacia el mar abierto, arrastrando consigo al petróleo subsuperficial.

Distribución petróleo cerca del fondo

A partir de las mediciones de petróleo subsuperficial, se observa que la distribución de la concentración de petróleo cerca de los sedimentos que se obtiene a partir de los datos obtenidos para cada una de las estaciones (Figura 4.63b), muestra una gran variabilidad. Aún así, se puede advertir la existencia de concentraciones elevadas ($> 3 \text{ ppm}$) en una banda aproximada de 2 a 3 km de ancho y 9 km a lo largo de la costa.

La Figura 4.66 muestra la nube de partículas de petróleo subsuperficial cercano al fondo en la misma zona en donde se realizaron las mediciones. Se observa cómo parte de la costa no queda cubierta con petróleo, tal y como se pudiera esperar. La mayor parte del petróleo cercano al fondo se encuentra situado en una banda costera más estrecha de la que se podría deducir de los datos reales, y que además, está mayoritariamente formada por las partículas de menor tamaño. Se observa también que mientras las partículas aumentan de tamaño, aumenta así mismo la distancia a la

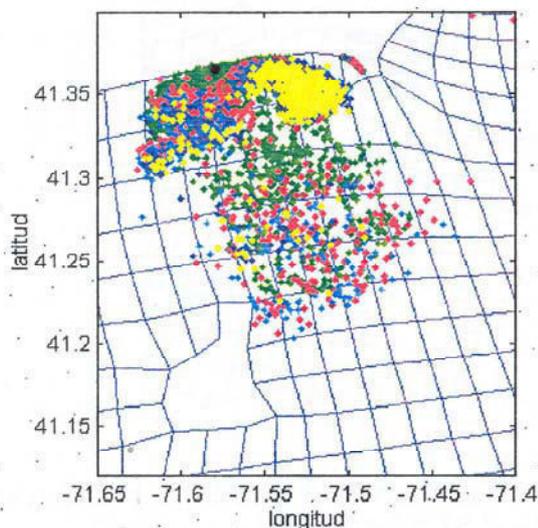


Figura 4.64. Distribución en superficie de partículas de petróleo para el día 21 a las 9 h cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna. Los diferentes colores representan cada uno de los intervalos de tamaño utilizados.

costa. Así mismo, se puede identificar una acumulación de partículas pertenecientes a los tamaños menores en la zona de Pt. Judith.

Con objeto de poder comparar los datos numéricos con los reales, se van a convertir las distribuciones de partículas a concentraciones de petróleo, utilizando para ello la unidad de partes por billón (*ppm*), para que la representación sea más clara y se puedan hacer comparaciones con los valores encontrados en las estaciones de la zona costera.

Los resultados en concentración de petróleo para las distintas distribuciones de partículas y calculadas para el fondo se muestran en las Figuras 4.67, 4.68 y 4.69. Se observa una menor concentración de la esperada en todos los casos, ya que cuando los procesos que dan lugar a la alteración del petróleo son importantes y no se han incluido en las simulaciones, las concentraciones debieran ser mayores. Para comprender la razón pongamos un ejemplo: un proceso que produce alteración y pérdida de masa superficial de petróleo es la evaporación. Si este proceso no se implementa en el modelo, la cantidad de petróleo que se introduce en la columna de agua por dispersión

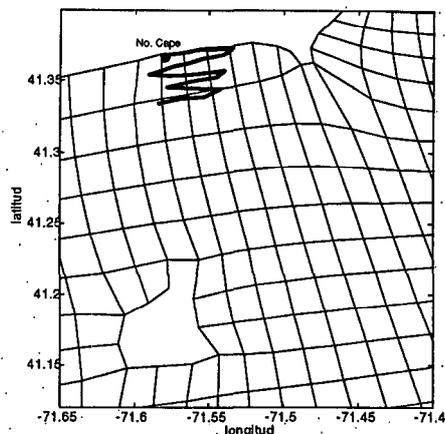


Figura 4.65. Trayectoria del centro de la mancha de petróleo subsuperficial desde el día 19 a las 20 horas hasta el 21 a las 9 horas.

mecánica tendrá necesariamente que ser mayor. En cuanto a las distribuciones utilizadas, aquellas que contengan una mayor fracción de petróleo formado por partículas de menor tamaño (distribución Forrester y distribución Delvigne-Sweeney, por ese orden) dan lugar a una mayor concentración de petróleo en el fondo y a una mayor extensión de la mancha cercana a los sedimentos, ya que éstas partículas son las que van a estar más tiempo retenidas en la columna de agua. El resultado de la simulación es que las concentraciones obtenidas para la distribución Uniforme no se ajusta poco a la realidad.

Se ha comprobado cómo el modelo al simular adecuadamente la expansión de la mancha subsuperficial, al igual que ocurre en superficie, nos da una mejor visión de lo que realmente puede acontecer en un derrame de petróleo. Además se ha comprobado que las diferencias entre los datos reales y la simulación en la extensión de la mancha subsuperficial se debe a la distribución de partículas utilizadas, aumentando la expansión con la mayor intrusión de petróleo en columna

4.16 Discusión

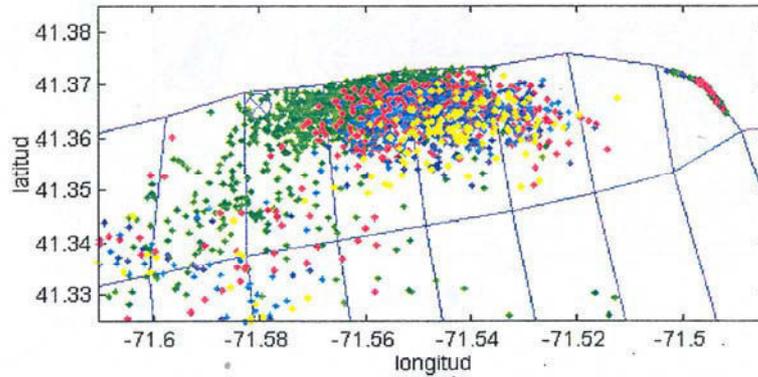


Figura 4.66. Distribución de partículas de petróleo aproximadamente a 1 m por encima de los sedimentos para la simulación F3 el día 21 a las 12 h, cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna.

4.16.1 Mancha superficial

En los apartados anteriores se ha aplicado el modelo de camino aleatorio al derrame de petróleo *North Cape*, variando condiciones referentes a la fuente temporal, espacial y distribuciones de partículas. La validación se ha planteado de acuerdo a la información que se tenía del derrame. Por ello, se ha distinguido entre petróleo en superficie y petróleo en la columna de agua.

Las características de la mancha superficial que se han comparado con los datos reales del derrame de petróleo *North Cape* son su trayectoria, el tiempo de llegada a Block Island y la extensión o área cubierta. Se ha comprobado que, en todos estos casos, la modelización representa con adecuada fidelidad la evolución real. Se puede afirmar por tanto que los modelos lagrangianos que utilizan partículas son un método fiable a la hora de representar la extensión de la mancha (Lehr, 1996).

La ventaja que ofrece este tipo de modelización para poder observar la extensión de la mancha no se puede utilizar en casos de contingencia, en donde se necesitan

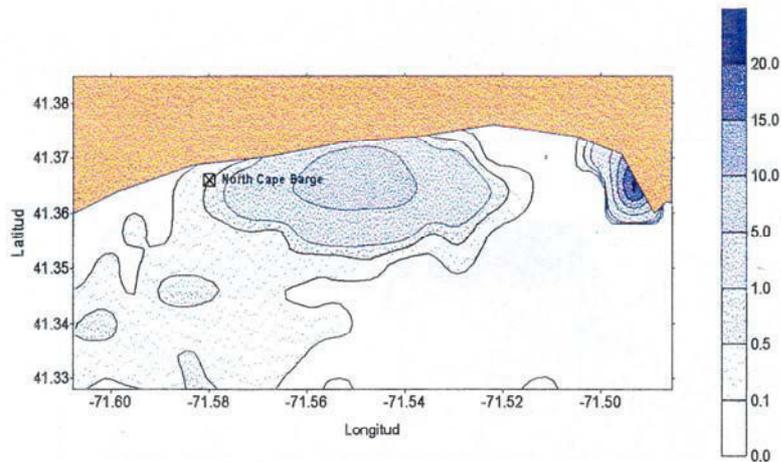


Figura 4.67. Isolneas para petróleo medido a 1 m por encima del fondo para la simulación F3 cuando el 60% del petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones en ppm)

respuestas rápidas y modelos capaces de ir asimilando toda la información que le va suministrando del derrame. En estos casos, se ha comprobado la versatilidad de modelos bidimensionales que utilizan un método de camino aleatorio aplicado a pequeñas manchas en vez de a partículas. Este es el caso del modelo OILMAP desarrollado por ASA y que dio excelentes predicciones durante el derrame producido por el North Cape (Lehr et al., 1996).

Esta es la razón por la cual las simulaciones en casos de contingencia utilizan una fuente puntual e instantánea ya que poco se sabe de la forma en la que se está liberando el petróleo. En general, la información se reduce al lugar en el que se encalló el barco. Una consecuencia que se extrae de este estudio es que el uso del modelo de camino aleatorio en el que el petróleo está formado por partículas de diferente tamaño en casos de contingencia puede resultar sensitivo a los datos de entrada del modelo. Esto se debe a que es necesario, entre otras cosas, inicializar el modelo con un coeficiente de difusión turbulenta. Para mostrar hasta qué punto puede ser sensitivo, se han realizado dos simulaciones en las que se utilizan dos aproximaciones diferentes para calcular el coeficiente de difusión: la primera utiliza las ecuaciones en donde se han definido los coeficientes de difusión turbulenta en función de la velocidad

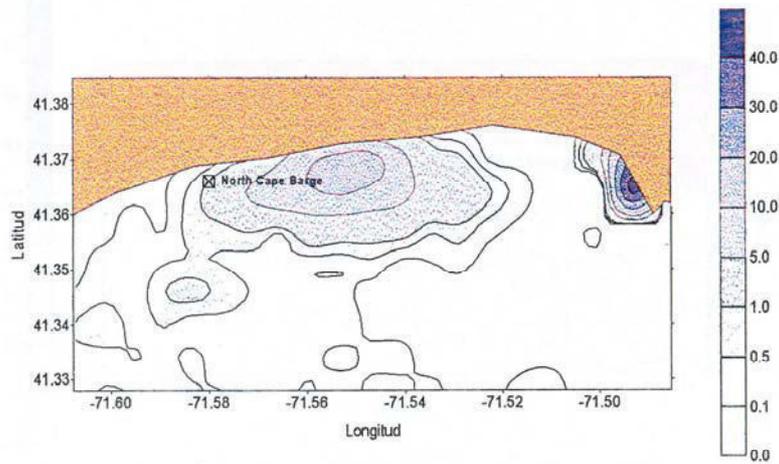


Figura 4.68. Isocóncas para petróleo medido a 1 m por encima del fondo para simulación F3 cuando el 60% del petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Forrester (concentraciones en ppm)

media en cada una de las células de malla y la longitud de la misma (ver Cap. 2), mientras que la segunda simulación utiliza los diagramas de Okubo que introduce coeficientes constantes basados en medidas directas en diferentes localizaciones. La diferencia entre las dos simulaciones resulta evidente a partir de la Figura 4.70, en donde se muestra la trayectoria del centroide, resultando que la simulación en donde los coeficientes de difusión son constantes se aproxima a la trayectoria descrita durante el derrame de petróleo *North Cape*, constatándose a la vez que la elección de dichos coeficientes es correcta.

Otro de los factores que determina la trayectoria, es el arrastre del viento sobre la mancha superficial de petróleo. Como se dijo anteriormente, este factor se cuantifica entre un 2 y un 4% de la velocidad del viento. La elección de dicho factor es necesaria para poder simular la trayectoria del petróleo superficial. Para comprobar este aspecto, se han calculado las trayectorias de dos manchas superficiales de petróleo con un factor de viento nulo y de un 2%. La trayectoria del centroide para dichas simulaciones se muestra en la Figura 4.71.

Por último, se ha comprobado durante la validación la importancia del comportamiento en costa del petróleo. Utilizando dos diferentes formas de

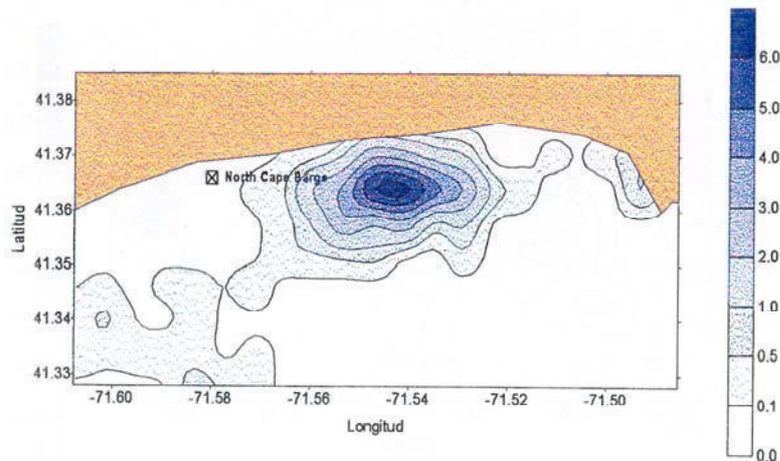


Figura 4.69. Isolneas para petróleo medido a 1 m por encima del fondo para la simulación F3 cuando el 60% del petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Uniforme (concentraciones en ppm)

implementar dicho comportamiento, se obtendrán trayectorias diferentes. Para comprobar esta afirmación, se ha procedido a implementar el comportamiento en costa, considerando en una primera simulación que cuando el petróleo la alcance se mueve por corrientes y difusión, y en una segunda sólo lo hace por difusión. Esta última aproximación es una forma de introducir cierta interacción del petróleo con la costa, ya que se ralentiza el movimiento a lo largo de la misma. Los resultados son diferentes, como se comprueba en la Figura 4.72.

4.16.2 Mancha subsuperficial

En la validación del modelo se manejaron tres características con respecto al petróleo que entra en la columna de agua: su movimiento, expansión de la mancha subsuperficial y distribución de la concentración cerca del fondo. El movimiento del petróleo subsuperficial se debió únicamente a las corrientes mareales ya que el arrastre del viento no le afecta, por lo que su trayectoria promedio fue tal que el petróleo se movió a lo largo de la costa de este a oeste, alcanzando hasta Pt. Judith, uno de los hechos que caracterizaron el derrame *North Cape* (Spaulding et al., 1996).

Dos aspectos básicos a tratar respecto al petróleo subsuperficial son la distribución

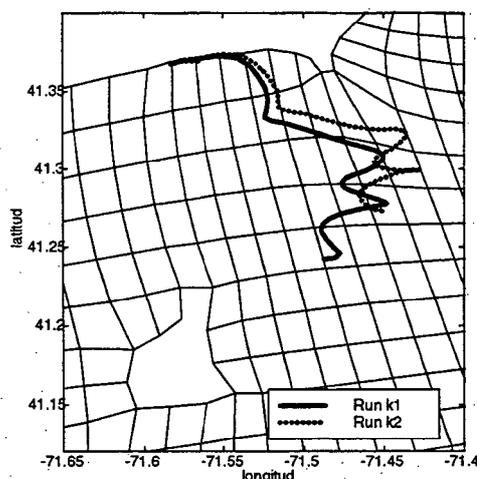


Figura 4.70. Movimiento del centroide para una mancha superficial de petróleo formada a partir de una fuente puntual instantánea. La simulación K1 utiliza los coeficientes de difusión $K_x = K_y = 10 \text{ m}^2/\text{s}$; $K_z = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$. En la simulación K2 los coeficientes de difusión son variables.

del petróleo a lo largo de la costa y su concentración cerca del fondo. Con respecto a la distribución del petróleo, los resultados mostraron que en parte de la zona costera no existía petróleo; mientras que con respecto a la concentración de petróleo cerca del fondo, los resultados fueron inferiores a los esperados cuando ciertos procesos que dan lugar a la eliminación del petróleo no se incluyen, como por ejemplo la evaporación, que constituyó una pérdida de aproximadamente el 50% del total (Spaulding et al., 1996; French, 1998). Ambos, la distribución y la concentración, están interrelacionados de tal forma que una mayor entrada de petróleo en la columna daría lugar a una distribución más aproximada a la esperada. En un principio, se supone entonces que los mecanismos de entrada de petróleo en la columna de agua (dispersión mecánica por oleaje rompiente como mecanismo principal y turbulencia oceánica como mecanismo secundario) no son suficientes para implementar la proporción de petróleo en columna. Sin embargo, una mayor concentración en columna no sólo va a depender de una mayor entrada de petróleo en la columna, sino también de la permanencia de dicho petróleo en columna, ya

Mancha subsuperficial

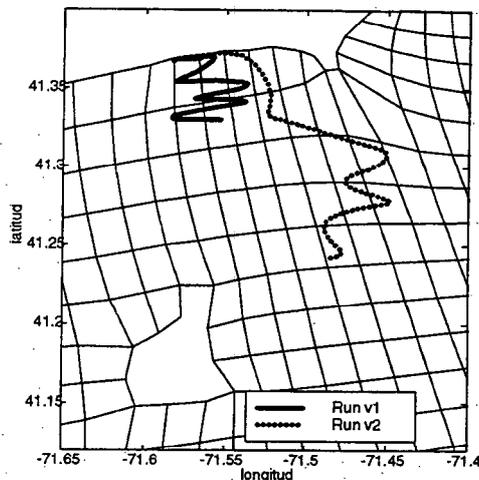


Figura 4.71. Movimiento del centroide de una mancha superficial de petróleo formada a partir de una fuente instantánea puntual con un factor de viento del 0% para la simulación V1 y de un 2% para la simulación V2. En ambas, los coeficientes de difusión empleados son $K_x = K_y = 10 \text{ m}^2/\text{s}$ y $K_z = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$

que siempre tiende a volver a superficie debido a su flotabilidad. Teniendo en cuenta que el oleaje es un mecanismo que permite retener al petróleo en la columna (ASCE, 1996) debido al aumento de turbulencia oceánica superficial que origina (Thorpe, 1995), se ha realizado una nueva simulación con las mismas características que la que se ha utilizado para estudiar el petróleo subsuperficial, incluyendo además el efecto de aumento de turbulencia oceánica superficial por oleaje rompiente.

Los resultados que se obtienen de esta nueva simulación para la mancha subsuperficial es, en primer lugar, una mayor extensión de la mancha, que se atribuye a que las partículas en columna permanecen durante mayor tiempo y sienten consecuentemente en mayor medida los efectos de los gradientes verticales de la velocidad (Figura 4.73). Se observa además que existe más petróleo acumulado en la línea costera y que además las partículas que lo conforman (color rojo y verde) pertenecen a intervalos de tamaño mayores que las que se acumularon mayoritariamente en parte de la costa en relación a la simulación en donde no se incluían los efectos de aumento de turbulencia oceánica superficial por oleaje

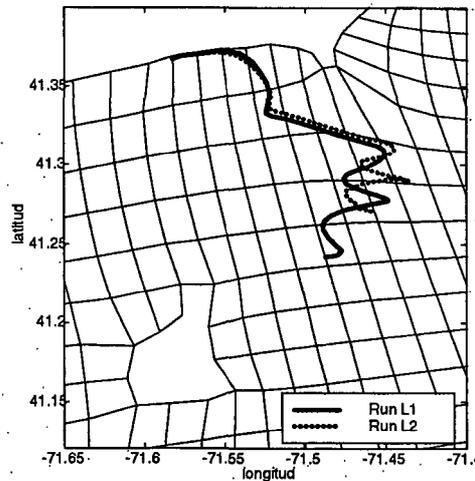


Figura 4.72. Movimiento del centroide para una mancha superficial de petróleo formada a partir de una fuente instantánea superficial. El petróleo se mueve por corrientes y difusión cuando alcanza la costa para la simulación L1 mientras que sólo lo hace por difusión para la simulación L2.

rompiente.

Para analizar el contenido de petróleo cerca de los sedimentos, se muestra en primer lugar la Figura 4.74, que muestra la nube de partículas que representan el petróleo cercano al fondo. Es apreciable una mayor extensión de la banda que ocupa el petróleo, así como una mayor concentración (Figura 4.75) y que por tanto se aproxima mejor a las medidas realizadas en las estaciones de la zona (Figura 4.63). En consecuencia se puede afirmar que la inclusión de los mecanismos de dispersión (retención) de petróleo en columna significa una mejor aproximación a los resultados reales con respecto a la concentración de petróleo subsuperficial

Sin embargo, existe un aspecto acerca de la implementación del petróleo en el fondo que puede dar lugar a unos resultados erróneos en materia de concentración y distribución del petróleo en la columna, y es la condición de barrera reflectante que se utiliza. Esta condición que consiste en que si el paso del petróleo es tal que tendría que atravesar el fondo, sale reflejado, poniéndose de nuevo en la columna de agua y recorriendo una distancia igual a la que hubiera hecho en el caso de atravesar el fondo.

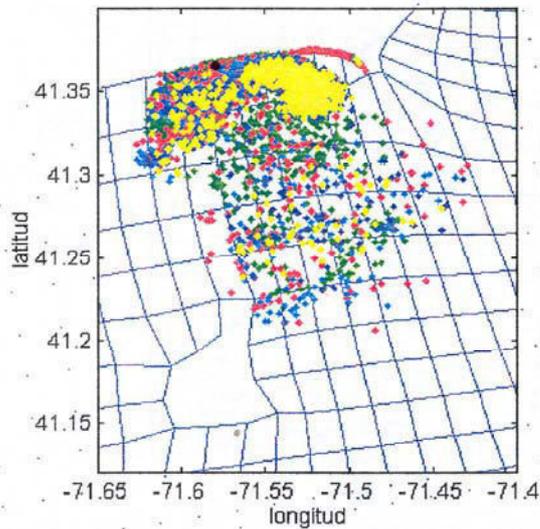


Figura 4.73. Distribución de partículas de petróleo en la columna para la simulación F3 cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna. La turbulencia generada por el oleaje ha aumentado de acuerdo con la formulación dada por Thorpe (1995).

Este tipo de condición lo que consigue es incrementar el paso determinístico debido a la flotabilidad del petróleo, de tal forma que se está sobreestimando la capacidad del petróleo de volver a la superficie cuando supera la turbulencia oceánica. Por ello influye directamente en los resultados referentes a la concentración de petróleo en columna. En consecuencia se ha utilizado una nueva condición de contorno en el fondo que variará ligeramente las condiciones en las que el petróleo reflotará y que siempre lo hará en base a su propia flotabilidad y no en base a ciertas condiciones que se le imponga para no tener que atravesar el fondo. En esta nueva condición el petróleo que llegue al fondo tal que tienda a atravesarlo no va a salir reflejado en ese mismo paso temporal a la columna, sino que en el paso siguiente se encontrará en una profundidad igual a la del fondo que ha tocado y podrá volver a superficie siempre que su flotabilidad así lo fuerce.

Utilizando esta nueva condición se ha efectuado una simulación con las condiciones especificadas anteriormente y que consisten en un aumento de turbulencia oceánica superficial debido al oleaje rompiente. Esta nueva condición va a afectar realmente al

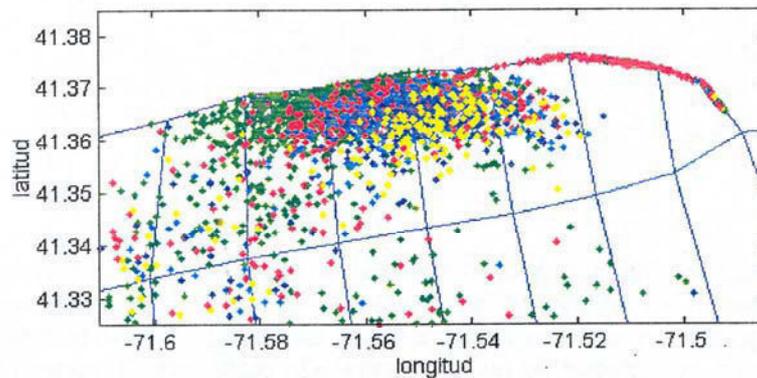


Figura 4.74. Distribución de partículas de petróleo aproximadamente a 1 m por encima de los sedimentos para la simulación F3 en donde el 60% del petróleo se ha liberado en columna, y la turbulencia superficial oceánica generada por el oleaje aumenta de acuerdo a la formulación dada por Thorpe (1995).

fondo cercano a la costa, en donde la profundidad es menor y, por tanto, las partículas más pequeñas de petróleo van a ser capaces de alcanzar el fondo.

Los resultados respecto a la mancha subsuperficial utilizando esta última condición de fondo, se muestran en la Figura 4.76, en donde se comprueba que existe una mayor expansión de la mancha. Se observa así mismo que las partículas más pequeñas de petróleo tienden a agruparse en torno al lugar en donde naufragó el carguero North Cape, lo que resulta más realista ya que el carguero estuvo constantemente sometido a un fuerte oleaje, y que partículas de mayor tamaño son las que se acumulan en costa.

Además, la distribución de petróleo y concentración en la zona costera próxima al fondo se encuentra más próxima a los resultados reales, en donde se observa una mayor dispersión del petróleo alrededor del carguero (Figura 4.77). Sin embargo, con respecto a las concentraciones obtenidas numéricamente (Figura 4.78), los resultados no son tan elevados como se esperaban aunque son superiores a los de las dos anteriores

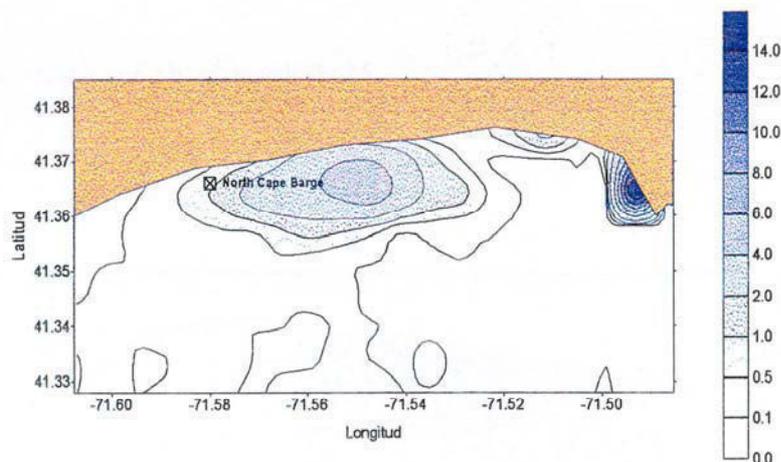


Figura 4.75. Isolíneas para petróleo medido a 1 m por encima del fondo para simulación F3 cuando el 60% del petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones en ppm). La turbulencia oceánica generada por el oleaje rompiente se ha incrementado siguiendo Thorpe (1995)

simulaciones.

Recordemos que los resultados obtenidos debieran ser superiores a los reales al no haber incluido los procesos que dan lugar a la eliminación del petróleo. Estos resultados indican la existencia de otros procesos a tener en cuenta y que, por lo tanto, resultan fundamentales a la hora de calcular la concentración de petróleo en la columna. Se refieren a la dinámica costera, y van a dar lugar a una mayor entrada de petróleo en la columna de agua en la zona de estudio (Spaulding et al., 1996). Hay que tener en cuenta que el petróleo que se introduce en la columna por oleaje rompiente es función del viento, de tal forma que cuando es inferior a 5 m/s, la entrada de petróleo por oleaje rompiente cesa. Además, el aumento de turbulencia debido al oleaje también es función de la velocidad del viento y sólo se produce cuando el viento es superior al mismo límite (Thorpe, 1995). Como se observa en la Figura 4.26, el viento a partir de las primeras horas siguientes a la del derrame fue inferior a dicho valor límite. Como consecuencia, cabe esperar que la mancha subsuperficial causada por el primer derrame esté mayoritariamente formada por partículas pertenecientes a los rangos inferiores. Esto se debe a que las partículas de mayor tamaño tienen mayor

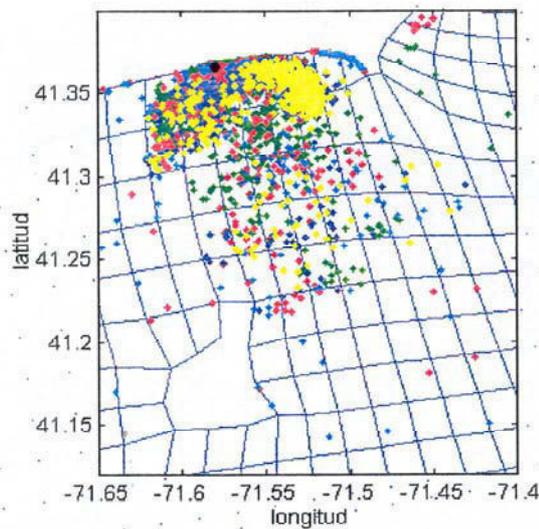


Figura 4.76. Distribución de partículas de petróleo en la columna cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna. La turbulencia generada por el oleaje ha aumentado de acuerdo con la formulación dada por Thorpe (1995) y se utiliza una condición semiabsorbente en el fondo.

flotabilidad y han tenido tiempo suficiente a volver a la mancha superficial, quedando por tanto en columna las de menor tamaño. Se puede observar en la Figura 4.76 en donde en la zona cercana a Block Island las partículas subsuperficiales son escasas, correspondiendo al primer derrame.

A pesar de que los resultados referentes a la concentración difieren parcialmente de los datos reales, es importante destacar la presencia de una mayor mancha subsuperficial. Como consecuencia dará lugar a una mayor expansión del petróleo superficial, originada al incluir los mecanismos de permanencia de petróleo en la columna (Figura 4.79). Este resultado mejora cuando se implementa el petróleo en el fondo con una condición semiabsorbente (Figura 4.80), pudiéndose contrastar al comparar cualquiera de las dos figuras anteriores con la correspondiente a la de la simulación que no incluye ninguno de los dos procesos (Figura 4.81).

Los resultados mostrando las manchas superficiales en cada uno de las condiciones anteriores se pueden ver en las Figuras 4.82, 4.83 y 4.84. A partir de ellas, se

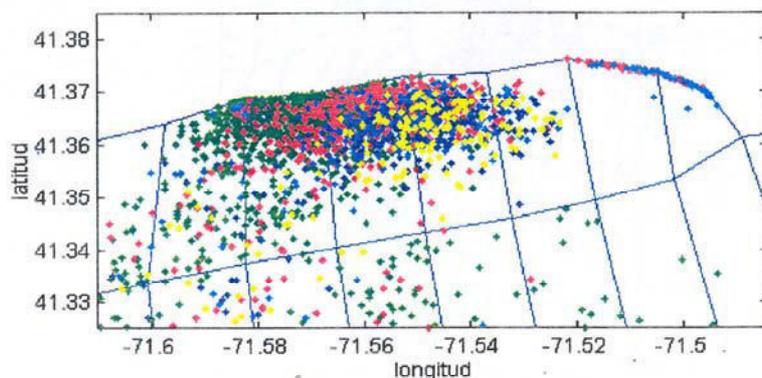


Figura 4.77. Distribución de partículas de petróleo aproximadamente a 1 m por encima de los sedimentos para la simulación en donde el 60% del petróleo se ha liberado en columna, y la turbulencia superficial oceánica generada por el oleaje aumenta de acuerdo a la formulación dada por Thorpe (1995).

puede afirmar que el resultado que se aproxima mejor a la mancha real es aquella correspondiente a la simulación en la que se ha incluido la nueva condición de contorno del petróleo en el fondo.

En resumen, se ha comprobado cómo los mecanismos que dan lugar a un mayor tiempo de permanencia en la columna son, en primer lugar, los mismos que introducen el petróleo en la columna: dispersión mecánica por oleaje y turbulencia generada por el propio oleaje. Se comprobó que la combinación de ambos mecanismos da lugar a una mancha subsuperficial, y consecuentemente una mancha superficial más extendida. Si se incluye la interacción del petróleo con los sedimentos modificando su comportamiento en el fondo, el petróleo permanece durante más tiempo en la columna y origina una mayor expansión de la mancha. Se deduce de todo esto que la expansión va a estar ligada a una mayor permanencia del petróleo en la columna y por lo tanto, a una mayor concentración de petróleo en la columna de agua. Esto significa que los procesos de dispersión mecánica por oleaje costero, sedimentación o

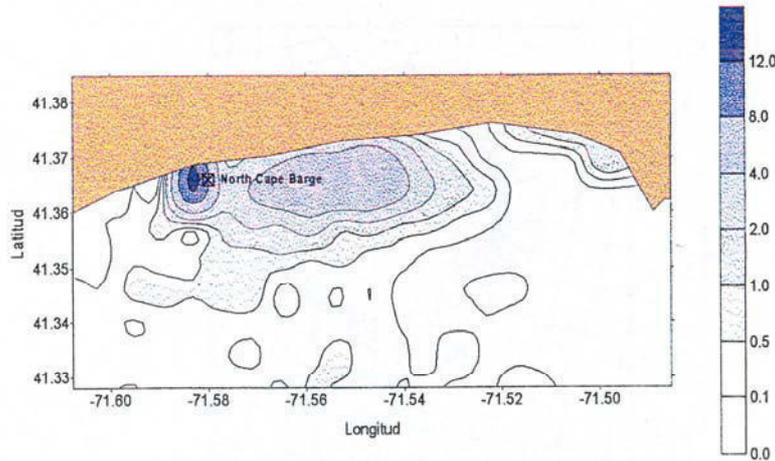


Figura 4.78. Isolneas para petróleo medido a 1 m por encima del fondo para la simulación F3 cuando el 60% del petróleo se libera en la columna de agua. Distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones en ppm). La turbulencia oceánica generada por el oleaje rompiente se ha incrementado siguiendo Thorpe (1995) y se ha utilizado una condición semiabsorbente en el fondo.

deposición en costa y sedimentos, deberán de tenerse en cuenta para obtener unos resultados más acordes con la realidad con respecto a la concentración.

Una consecuencia evidente a lo largo de este estudio es que todos los procesos verticales descritos y que se incluyen en la simulación van a depender de la distribución de partículas y sus rangos. Debido a su menor flotabilidad, las partículas más pequeñas son las que podrán interaccionar con los sedimentos o permanecerán más tiempo en la columna. En realidad, se debe fundamentalmente a la relación que existe entre los procesos difusivos verticales con la flotabilidad de las partículas. Para dar cuenta de esta relación, se podría definir un parámetro adimensional de la forma:

$$p = \frac{w_t \Delta t}{\sqrt{2K_z \Delta t}} \quad (158)$$

donde K_z es el coeficiente de difusión turbulenta vertical, w_t es la velocidad terminal de la partícula y Δt es el intervalo temporal utilizado. Este parámetro no es más que el cociente entre el paso determinístico (flotabilidad) y el paso aleatorio (difusividad).

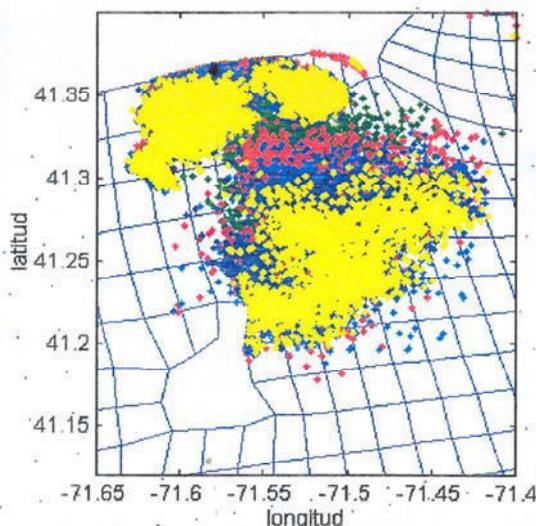


Figura 4.79. Distribución de partículas de petróleo en superficie para el día 21 a las 9 h cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna y la turbulencia oceánica superficial aumenta por el oleaje según formulación dada por Thorpe(1995).

El grado de influencia del paso aleatorio con respecto al determinístico aumentará a medida que el parámetro p se aproxime a cero, lo que significa que los procesos difusivos verticales son dominantes con respecto a los advectivos en la misma dirección. Como consecuencia, la turbulencia generada por el oleaje mantendrá a las partículas en la columna de agua durante más tiempo. A su vez, la expansión horizontal aumentará debido a que las partículas permanecerán durante más tiempo en la columna de agua.

Lo contrario ocurre cuando p tome valores elevados, ya que el que el paso determinístico influye en menor medida que el aleatorio. Cuando p es igual a la unidad, significa que el movimiento de la partícula va a venir influenciado en igual medida por el paso determinístico y el aleatorio.

Johansen (1982) introdujo el concepto de *tiempo de residencia* del petróleo en la columna de agua como el tiempo que tardaba en volver a la superficie el 99% de la masa. A partir de sus trabajos con partículas de diferentes tamaños, pudo obtener una relación entre el tiempo de residencia y la velocidad terminal de dicha partícula.

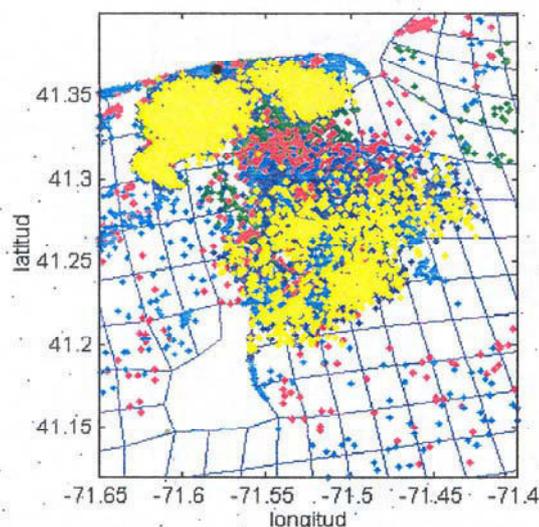


Figura 4.80. Distribución de partículas de petróleo en superficie para el día 21 a las 9 h cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna y la turbulencia oceánica superficial aumenta por el oleaje según formulación dada por Thorpe (1995). Condición en el fondo semiabsorbente.

El hecho de que el parámetro p sea función de la velocidad terminal y ésta a su vez se pueda relacionar con el tiempo de residencia, plantea la posibilidad de establecer la relación entre el parámetro p y el tiempo de residencia.

Para completar la definición de este parámetro, hay que tener en cuenta que la composición de una mancha de petróleo es debida a diferentes rangos de partículas. Por ello, el parámetro p se ha de poder escribir en función de la distribución propia de cada mancha. La contribución del parámetro p a la distribución viene dada por el número de partículas de cada tamaño dentro de cada intervalo. Por tanto, para cada distribución se puede definir un nuevo parámetro adimensional P , que indique la influencia de la flotabilidad o la turbulencia

$$P = \frac{1}{n_i} \sum_{i=1}^{n_i} N_i p_i \quad (159)$$

donde n_i es el número total de intervalos de tamaño que tenga la distribución usada,

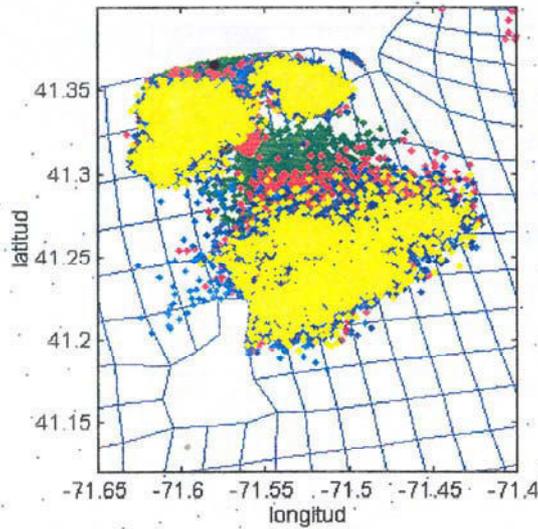


Figura 4.81. Distribución de partículas de petróleo en superficie para el día 21 a las 9 h cuando el 60% del petróleo se ha liberado en columna.

N_i es el número de partículas para cada intervalo de tamaño en tanto por ciento relativo y p_i es el parámetro adimensional antes definido. De esta forma, podremos decir que a medida que P se acerca a 0 mayor es la influencia de la turbulencia.

Como resultado de todas las simulaciones, se ha constatado que los modelos de camino aleatorio presentan una gran dependencia de las distribuciones de partículas según tamaño empleadas en la implementación. Además hay que tener en cuenta que dentro de una misma mancha de petróleo coexisten diferentes rangos de partículas, de forma que la posibilidad de representar la mancha de petróleo a través de un único tamaño tampoco parece razonable. Para comprobar esta hipótesis, se han efectuado dos simulaciones con rangos totalmente opuestos -las de mayor y menor tamaño-, representando los resultados en las Figuras 4.85 y 4.86. En ellas se puede comprobar cómo sólo aquellas partículas cuyo tamaño es tal que permanecen en superficie consiguen alcanzar Block Island. Por lo tanto, la hipótesis de la utilización de un único tamaño de partículas debe quedar totalmente descartada.

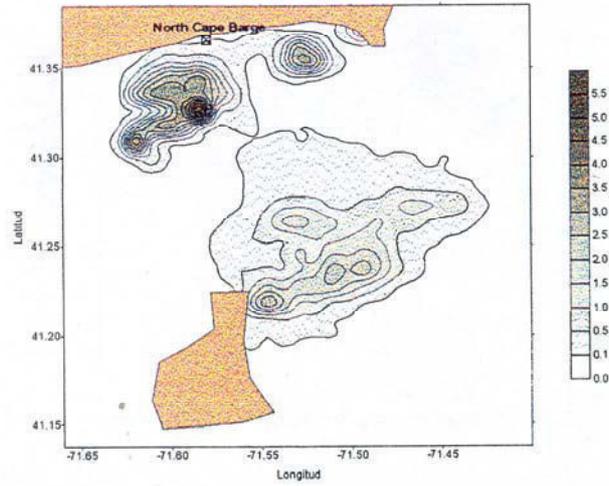


Figura 4.82. Mancha superficial de petróleo para la simulación **F3** cuando el 60% de petróleo se libera en la columna de agua, para la Distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones en *ppm*).

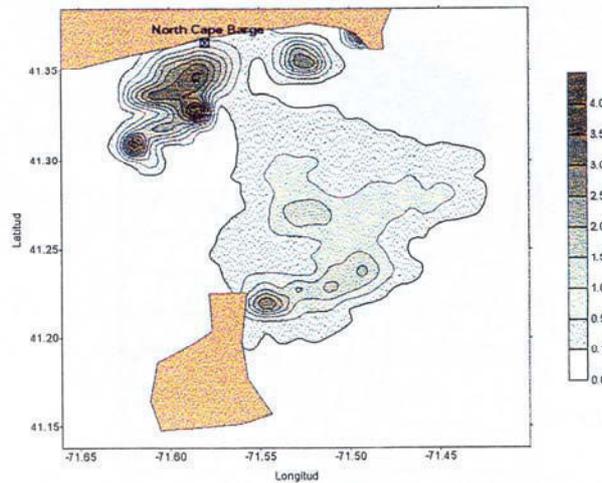


Figura 4.83. Mancha superficial de petróleo para la simulación **F3** cuando el 60% de petróleo se libera en la columna de agua, para la Distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones en *ppm*). La turbulencia en superficie se ha implementado según Thorpe.

Mancha subsuperficial

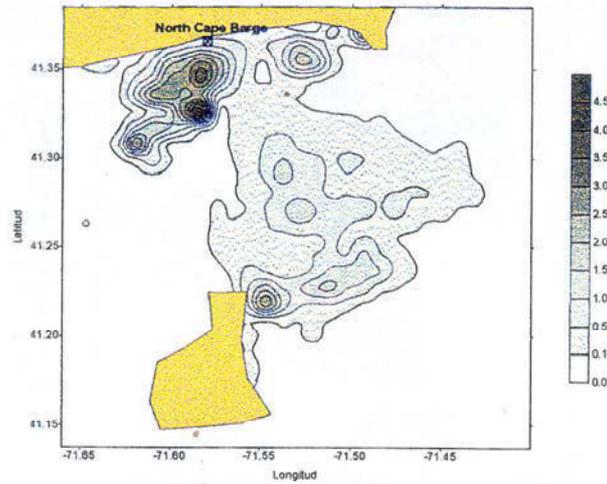


Figura 4.84. Mancha superficial de petróleo para la simulación F3 cuando el 60% de petróleo se libera en la columna de agua, para la Distribución Delvigne-Sweeney (concentraciones en *ppm*). La turbulencia en superficie se ha implementado según Thorpe. Condiciones no reflectantes en el fondo.

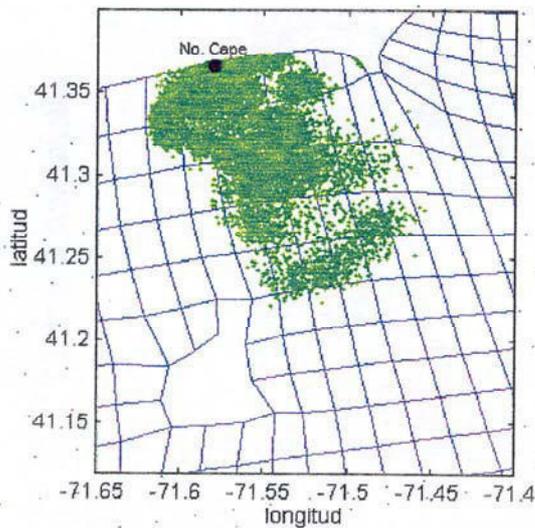


Figura 4.85. Distribución de partículas de petróleo en superficie, pertenecientes al intervalo de tamaño menor, para el día 21 a las 9 h.

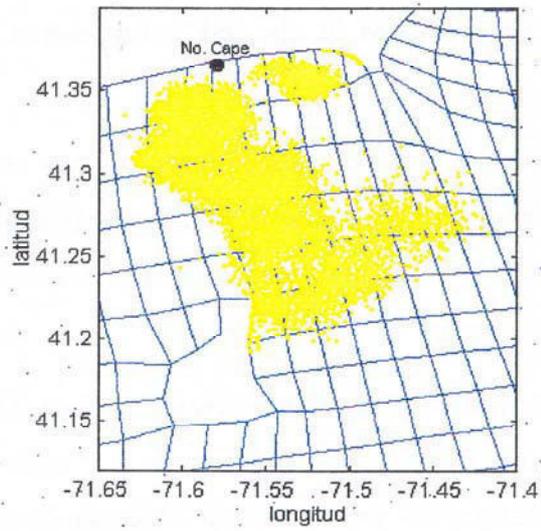


Figura 4.86. Distribución de partículas de petróleo en superficie, pertenecientes al intervalo de tamaño mayor, para el día 21 a las 9 h.

4.17 Conclusiones

La modelización tridimensional mediante camino aleatorio de un derrame de petróleo permite seguir el movimiento de la mancha tanto superficial como subsuperficial, incluir fácilmente procesos de entrada de petróleo en la columna y simular la interacción del petróleo con los sedimentos del fondo. Las principales conclusiones que se pueden extraer de este apartado son las siguientes:

- (1) Se ha comprobado la versatilidad de estos modelos a la hora de predecir la expansión de la mancha al haber incluido los procesos que originan una extensión del derrame en superficie, como es la dispersión turbulenta por gradientes de velocidad.
- (2) Una consecuencia notable es que la obtención de buenos resultados con estos modelos se basa en la elección no solo de la hidrodinámica, sino también de las condiciones que se utilizan para representar el comportamiento del petróleo en los contornos.
- (3) El uso de diferentes distribuciones tiene como resultado una diferencia en concentración, pero no influyen en el movimiento global de la mancha superficial ya que éste va a estar regido sólo por las partículas que alcancen la superficie.
- (4) Es necesario incluir procesos como el aumento de turbulencia generada por el oleaje en la capa superficial del océano para poder cuantificar de forma correcta la entrada de petróleo y su permanencia en la columna de agua.
- (5) Respecto a las distribuciones de partículas y su tamaño y número, se ha comprobado que existe una mayor dispersión para las manchas generadas mediante la distribución Delvigne-Sweeney y distribución Forrester; la distribución Uniforme no resulta realista.
- (6) Pero no sólo influye la distribución, sino también los rangos de partículas que se

han utilizado. Por ejemplo, el rango inferior de los cinco tamaños habitualmente empleados a lo largo de este trabajo es demasiado grande. Todos estos aspectos se han de tener en cuenta para futuras modelizaciones.

Capítulo 5. Conclusiones

5.1 Resumen y Conclusiones

Debido al innegable impacto medioambiental que tiene los derrames de petróleo en el océano, durante los pasados años se ha intentado modelizar con la máxima precisión posible la evolución de la mancha causada por un derrame de petróleo. Para ello, se ha tratado de incluir la mayor parte de los fenómenos tanto físicos como químicos que gobiernan su dinámica, aunque el conocimiento de la física de alguno de estos procesos no sea adecuado. Dentro de las diferentes soluciones que se han propuesto para su modelización, la técnica lagrangiana que emplea el método de camino aleatorio, permite incluir de forma sencilla la mayor parte de los fenómenos que afectan a la expansión de la mancha, por lo que ha sido una de las más frecuentemente empleada durante la última década y se ha utilizado a lo largo de este estudio. En este trabajo se ha profundizado básicamente en el conocimiento de los procesos de carácter hidrodinámico que afectan a la expansión del petróleo, determinando la dependencia y validez de esta forma de modelización frente a variaciones en la parametrización. Se exponen a continuación las principales conclusiones a las que se ha llegado.

- (1) La importancia de los procesos verticales en la expansión de una mancha de petróleo se ha reflejado en los resultados del estudio unidimensional, ya que se ha detectado su dependencia respecto a la elección de la distribución de partículas.
- (2) Se ha constatado cómo las manchas formadas por una distribución que presenta mayor proporción de masa formada por partículas pequeñas, están sujetas a una

mayor dispersión al verse más afectadas por los fenómenos turbulentos.

- (3) El estudio unidimensional aplicado a un caso real ha mostrado la importancia de la profundidad de intrusión y el aumento de turbulencia para determinar la dispersión superficial de la mancha, lo que enfatiza la necesidad de una correcta implementación de los fenómenos de turbulencia oceánica.
- (4) Se ha comprobado que la suposición de condiciones reflectantes para representar el comportamiento del petróleo en superficie no resulta correcta, proponiéndose una nueva condición denominada *semiabsorbente*.
- (5) El modelo lagrangiano de camino aleatorio permite la adecuada simulación de procesos tales como la expansión de una mancha de petróleo debido a la dispersión turbulenta, sin necesidad de incluir ningún término adicional en las ecuaciones de difusión-advección.
- (6) Las dimensiones de la mancha deben ser el resultado de la acción combinada de la dispersión turbulenta, difusión turbulenta horizontal, expansión debido al viento y circulación Langmuir, no viniendo impuesto únicamente por las propiedades físico-químicas del petróleo.
- (7) Se ha comprobado la dependencia de la expansión de la mancha con respecto al tamaño de las partículas que la forman, de tal manera que a medida que disminuye el tamaño de las partículas, la expansión horizontal del petróleo aumenta.
- (8) Se ha determinado que la diferencia en la expansión de una mancha de petróleo con respecto a una mancha de soluto pasivo se debe no sólo a la flotabilidad de las partículas, sino también a las condiciones semiabsorbentes en superficie.
- (9) La modelización tridimensional de un derrame permite seguir el movimiento del petróleo tanto superficial como subsuperficial, incluir procesos de entrada del contaminante en la columna y simular en cierta medida su interacción con los sedimentos del fondo.

- (10) Los resultados de la modelización tridimensional también dependen de la distribución y número de partículas empleada en la simulación, resultando que la denominada Distribución Uniforme no es adecuada para las simulaciones.
- (11) Los resultados de la modelización presentan así mismo dependencia respecto a los rangos de partículas utilizados. Se ha comprobado cómo el tamaño inferior de los habitualmente empleados es demasiado grande.
- (12) La elección de la hidrodinámica y las condiciones que se utilizan para representar el comportamiento del petróleo en el fondo o la costa son determinantes para obtener resultados próximos a la realidad.
- (13) Se constata la necesidad de incluir procesos como la turbulencia generada por el oleaje en la capa superficial del océano para poder cuantificar de forma correcta tanto la entrada de petróleo como su permanencia en la columna de agua.
- (14) En base a los resultados obtenidos, la mejora de esta modelización pasa necesariamente por la incorporación de la interacción del petróleo con la costa.
- (15) Dado que se ha comprobado que la simulación del movimiento del petróleo no resulta realista si se considera formado por partículas del mismo tamaño, y dada su dependencia de la distribución de partículas empleada para representarla, será necesario encontrar la distribución que mejor represente la dinámica de la mancha, abriendo una nueva línea de investigación.
- (16) La incorporación del parámetro p a la caracterización del movimiento de partículas no pasivas, puede resultar un avance determinante en la modelización por el método de camino aleatorio.

Bibliografía

- [1] *Oil spill case histories, 1967-1991, summaries of significant u.s. and international spills*, Tech. Report HMRAD 92-IJ, NOAA/HAZMAT, Marine Response and Assessment Div., Seattle, Washington, EE.UU., 1992.
- [2] P. Ackerer and W. Kinzelbach, *Modelisation du transport de contaminant par le methode de marche au hasard: Influence des variations du champ decoulement au cours du temps sur la dispersion*, International Symposium on the Stochastic Approach to Subsurface Flow, 1985.
- [3] Y. Agrawal, E.A. Terray, M.A. Donelan, P.A. Hwang, A.J. Williams III, W.M. Drennan, K.K. Kahma, and S.A. Kitaigorodskii, *Enhanced dissipation of kinetic energy beneath surface waves*, Nature **359** (1992), 219–220.
- [4] H.P. Foote R.C. Arnett C.R. Cole Ahlstrom, S.W and R.J. Serne, *Multicomponent mass transport model: Theory and numerical implementation*, Tech. Report BNWL 2127, Pacific Northwest Labs., Batelle, Richland, WA, 1977.
- [5] S. Ahlstrom, *A mathematical model for predicting the transport of oil slicks in marine waters*, Tech. report, Batelle Laboratories, Richland, Washington, 1975, 72 pp.
- [6] A. H. Al-Rabeh, H. M. Cekirge, and N. Gunay, *A stochastic simulation model of oil spill fate and transport*, Appl. Math. Modelling **13** (1989), 322–329.
- [7] C.M. Allen, *Numerical simulation of contaminant dispersion in estuary flows*, Proc. R. Soc. Lon. **A381** (1982), 179–194.
- [8] Am. Petr. Inst., *Trayectoria analysis for the Exxon Valdez: Hindcast study*, Washington, EE.UU., Oil Spill Conf., 1991.
- [9] E. Anderson, E. Howlett, K. Jayko, V. Kolloru, M. Reed, and M. Spaulding, *The*

Bibliografía

- worldwide oil spill model (WOSM)*, 16th Annual Arctic and Marine Oilspill Program (AMOP) (Edmonton, Alberta, CANADA), AMOP, 1993, pp. 627–646.
- [10] Inc. Applied Science Associates, *Technical manual oilmap for windows*, 1996.
- [11] K. Aravamudan, K. Raj, and G. Marsh, *Simplified models to predict the break-up of oil on rough seas*, Proceedings Oil Spill Conference (Atlanta, Georgia, USA), no. 165, 1981, pp. 45–52.
- [12] R. Aris, *On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube*, Proc. Roy. Soc. London, A **235** (1956), 67–77.
- [13] E. Adams Baptista, A.E. and K. D. Stolzenbach, *Eulerian-lagrangian analysis of pollutant transport in shallow water*, Tech. Report MIT-EL 84-008, R.M. Parsons Laboratory, Department of Civil Engineering, M.I.T., Cambridge, USA, June 1984.
- [14] D. Bedborough, J. Davies, J. Dickinson, M. Hall, R. Hepworth, P. Kingston, J. Miles, P. Monaghan, R. Tulloch, and M. Usher, *The environmental impact of the wreck of the braer*, Tech. report, Edinburgh, UK, 1994.
- [15] P.C. Blokker, *Spreading and evaporation of petroleum products on water*, Proceedings of the 4th International Harbor Conference (Antwerp, Belgium), 1964, pp. 911–919.
- [16] R. Bouwmeester and R.B. Wallace, *Dispersion of oil on a water surface due to wind and wave action*, Tech. report, Michigan State University, East Lansing, Mich. EE.UU., 1986, Quiza es de una conferencia de oil. Ad'o 1986, creo.
- [17] K. Bowden and R.E. Lewis, *Dispersion in flow from a continuous source at sea*, Water Res. **7** (1973), 1705–1722.
- [18] K. F. Bowden, *Horizontal mixing in the sea due to a shearing current*, J. Fluid Mech. **21** (1965), no. part 2, 83–95.
- [19] L.R. Brown, J. N. Abramowitz, C. Bright, C. Flavin, G. Gardner, H. Kane, A. Platt, S. Postel, and D. Rodman, *La situación del mundo*, Ed. Icaria, 1997, 385 pp.
- [20] G. Christodoulou, J. Connor, and B. Pearce, *Mathematical modeling of dispersion in stratified waters*, Tech. Report MITSG 76-14, M.I.T., Cambridge, Massachusetts,

1976.

- [21] C. Core, *Oil spill in pack ice*, Tech. Report Environment Canada Report EE-15, Ottawa, 1980.
- [22] G. Csanady, *Accelerated diffusion in the skewed shear flow of lake currents*, J. Geophys. Res. **71** (1966), no. 2, 411–420.
- [23] G. T. Csanady, *Turbulent diffusion in the environment*, D. Reidel, Dordrecht, 1972, 249 pp.
- [24] T. Csanady, *Vortex pair model of langmuir circulation*, Journal of Marine Research **5** (1994), no. 2, 559–581.
- [25] Csanady, G.T., *Turbulent diffusion in lake huron*, J. Fluid Mech. **17** (1963), 360–384.
- [26] G. C. Van Dam, *Mixing and transport in the environment*, ch. 14, pp. 269–293, John Wiley Sons Ltd, 1994.
- [27] A. Davis and J.E. Jones, *The influence of wind and wind wave turbulence upon tidal currents: Taylor's problem in three dimensions with wind forcing*, Continental Shelf Research **16** (1996), no. 1, 25–99.
- [28] G. Delvigne and J.M. Lamber, *Simplified laboratory measurement of oil dispersion coefficient -application in computations of natural oil dispersion*, Proceedings of the 17th Artic and Marine Oil Spill Program (AMOP) Technical Seminar (Vancouver, British Columbia, Canada), June 8-10 1994.
- [29] G.A.L. Delvigne and C.E. Sweeney, *Natural dispersion of oil*, Oil Chem. Poll. **4** (1988), 281–310.
- [30] Delvigne, G.A.L., *On scale modeling of oil droplet formation from spilled oil*, 1991, pp. –.
- [31] K. Dimou and E. Adams, *Application of a 2-d particle tracking model to simulate entrainment of winter flounder larvae at the millstone nuclear power station*, Tech. Report MIT-EL 89-002, Energy Laboratory, M.I.T., Cambridge, MASS., USA, November 1989, 138 pp.

Bibliografía

- [32] ———, *Water pollution: Modeling, measuring and prediction*, pp. 251–264, Wrobel, L.C and Brebbia, C.A, 1991.
- [33] ———, *A random-walk, particle tracking model for well-mixed estuaries and coastal waters*, *Estuarine, Coastal and Shelf Science* **37** (1993), 99–110.
- [34] N.K. Dimou, *Simulation of estuary mixing using a two-dimensional random walk model*, Master's thesis, M.I.T., Cambridge, USA, 1989.
- [35] J.T. Park J.C. Buckingham Dodge, F.T and R.J. Magott, *Revision and experimental verification of the hazzard assesment computer systems. models for spreading, movement, dissolution and dissipation of insoluble chemicals spilled onto water*, Tech. Report Contract DTICG23-80-C-20026, Southwest Research Institute, San Antonio, Texas, 1983.
- [36] C. Ebbesmeyer and A. Okubo, *Variance relations between variable shear-diffusion and radially symmetric turbulent diffusion*, *Deep-Sea Res.* **22** (1975), 441–445.
- [37] H. El-Tahan and S. Venkatesh, *Behaviour of oil spills in cold and ice-infested waters-analysis of experimental data on oil spreading*, Proc. Of the Seventh Arctic and Marine Oil Spill Program Technical Simnar, 1994, pp. 337–354.
- [38] J. W. Elder, *The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow*, *J. Fluid Mech.* **5** (1959), 544 – 560.
- [39] J. Weiergang Ellegaard, A.C and H.M. Petersen, *A pc modeling system for the simulation of transport and fate of solutes ans suspended substances*, *Estuarine and Coastal Modeling*, 1991, pp. 188–201.
- [40] A. Elliot, *Shear diffusion and the spread of oil in the surface layers of the north sea*, *Dt. Hydrogr. Z.* **39** (1986), no. 3, 113–137.
- [41] A. Elliot, A.C. Dale, and R. Proctor, *Modelling the movement of pollutants in the UK shelf seas*, *Marine Pollution Bulletin* **24** (1992), no. 12, 614–619.
- [42] A. Elliot, N. Hurford, and C.J. Penn, *Shear diffusion and the spreading of oil slicks*, *Mar. Pollut. Bull.* **17** (1986), no. 7, 308–313.

Bibliografía

- [77] S. Leibovich, *A natural limit to the containment and removal of oil spills at sea*, Ocean Engng. **3** (1975), 29–36.
- [78] Leibovich, S., *Oil slick instability and the entrainment failure of oil containment booms*, J. Fluids Engng. (1976), 98–105.
- [79] M. Longuet-Higgins, *On wave breaking and the equilibrium spectrum of wind-generated waves*, Proc. Roy. Soc. (1969), no. A 310, 151.
- [80] D. Mackay and C. D. McAuliffe., *Fate of hydrocarbons discharged at sea*, Oil Chem. Pollut. **5** (1988), no. 1, 1–20.
- [81] D. Mackay, S. Paterson, and K. Trudel, *A mathematical model of oil spill behaviour*, Tech. report, Environmental Protection Service, Canada, 1980.
- [82] A. S. Monin and A. M. Yaglom, *Statistical fluid mechanics: Mechanics of turbulence*, vol. 1, The Mit Press, 1971.
- [83] Murray, S. P., *Turbulent diffusion of oil in the ocean*, Limn. Oceanogr. **17** (1972), no. 5, 651–660.
- [84] A. Naess, *The mixing of oil spills into the sea by breaking waves*, J. Petroleum Technology (1980), 1113–1122.
- [85] ———, *On the residence time of oil mixed into the water column by breaking waves*, Society Petroleum Engineers Journal (1982), 573–584.
- [86] NATO, *Modelling of solute transport with the random walk method*, Lisbon, Portugal, 1987.
- [87] A. Okubo, *Oceanic diffusion diagrams*, Deep-Sea Research **18** (1971), 789–802, En texfiles/autores.
- [88] ———, *Diffusion and ecological problems: Mathematical models*, Springer-Verlag, N.Y., 1980, 256 pp.
- [89] A. Okubo and H. H. Carter, *An extremely simplified model of the shear effect on horizontal mixing in a bounded sea*, J. Geophys. Res. **71** (1964), no. 22, 5267–5270.
- [90] Okubo, A. and H. H. Carter, *An extremely simplified model of the "shear effect" on*

- horizontal mixing in a bounded sea*, **71** (1966), no. 22, 5267–5270.
- [91] The ASCE Task Committee on Modeling of Oil Spills of the Water Resources Engineering Division, *State-of-the-art review of modelling transport and fate of oil spills*, J. Hydr. Engrg. **122** (1996), no. 11, 594–609.
- [92] R. V. Ozmidov, *Diffusion of contaminants in the ocean*, Kluwer Academic Press, Dordrecht, 1990.
- [93] J. Payne and C. Phillips, *Petroleum spills in the marine environment -the chemistry and formation of water-in-oil emulsions and tar balls*, 1985, Lewis, Chelsea, Michigan.
- [94] H. Peterson, *Fate and effects of bunker c oil spilled by the USNC potomac in melville bay -greenland-1977*, Proceedings of the Conference on Assessment of Ecological Impacts of Oil Spills, American Institute of Biological Sciences, Washington, D.C., 1978.
- [95] M. Reed and E. Gundlach, *Hindcast of the amoco cadiz event with a coastal zone oil spill model*, Oil Chem. Poll. **5** (1989), 451–476.
- [96] OSIR (Oil Spill Intelligence Report), *Spilled oil from tanker remains trapped in snow and ice off swedish coast*, Tech. Report Vol.10, No. 4, Cutter Information Corporation, Arlington, Massachussets, 1987.
- [97] M. Rijkswaterstaat, *Oil recovery operation in the north sea involving the oil tanker katina*, Tech. Report N-R-82.23, The Netherlands, 1982.
- [98] R. Robertson, *A montecarlo model of oil dispersion due to wave motion*, Ph.D. thesis, University of Rhode Island, 1982.
- [99] S. Ross and D.F. Dickens, *Field research spills to investigate the physical and chemical fate of oil in pack ice*, Tech. Report No.0.62, ESRF Report, 1987.
- [100] S.L. Ross and Energetic Engineering, *In site burning of uncontained oil slicks*, Tech. report, Env. Canada Report EE60, 1985.
- [101] Saffman, P. G., *The role of wind shear in horizontal diffusion of ambient particles.*, Quart. J. Roy. Meteorol. Soc. **91** (1962), 318–329.
- [102] Sebastiao, P. and G. Soares, *Modeling the fate of oil spills at sea*, Spill Science Tech-

Bibliografía

- nology Bulletin 2 (1995), no. 2/3, 121–131.
- [103] M. Spaulding, E. Anderson, E. Howlett, D. Mendelsohn, and T. Opishinski, *Application of OILMAP and SIMAP to predict the transport and fate of the north cape spill, narragansett, RI*, Proceedings of the 19th Arctic and Marine Oilspill Program (AMOP) Technical Seminar, vol. 1, 1996, pp. 745–774.
- [104] M. Spaulding, A. Odulo, and V.S. Kolluru, *A hybrid model to predict the entrainment and subsurface transport of oil*, Tech. report, Spaulding Environmental Associates, Inc (SEA), 682 Kingstown Road, Wakefield, RI 02879, 1991.
- [105] M.L. Spaulding, *State-of-the-art review of oil spill trajectory and fate modeling*, Oil and Chemical Pollution 4 (1988), 39–55.
- [106] V.S. Kolluru Spaulding, M.L., E. Anderson, and E. Howlett, *Application of three-dimensional oil spill model (WOSM/OILMAP) to hindcast the braer spill*, Spill Science Technology Bulletin 1 (1994), no. 1, 23–35.
- [107] S.K. Srinivasan and R. Vasudevan, *"introduction to random differential equations and their applications"*, American Elsevier Publishing Company, Inc., 1971.
- [108] K. Stolzenbach, O Madsen, E. Adams, A. Pollack, and C. Cooper, *A review and evaluation of basic techniques for predicting the behaviour of surfacs oils slicks*, Tech. report, Report No. 222, Dept. of Civil Eng., MIT, Cambridge, Massachusetts, EE.UU., 1977.
- [109] B. M. Summer, *Mean velocity and longitudinal dispersion of heavy particles in turbulent open-channel flow*, J. Fluid Mech. 65 (1974), no. 1, 11–28.
- [110] Taylor, G., *Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube*, Proc. R. Soc. Lon. A, 219 (1953), 186–203.
- [111] Taylor, G. I., *The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe*, Proc. R. Soc. Lon. A, 223 (1954), 446–468.
- [112] S. Thorpe, *Vertical dispersion of oil droplets in strog winds; the braer oil spill*, Mar. Pollut. Bull. 30 (1995), no. 11, 756–758.

- [43] A.J. Elliot, *Eurospill: Oceanographic processes and european shelf databases*, Marine Pollution Bulletin **22** (1991), no. 11, 548–553.
- [44] R. Proctor And. J. Elliot and R. A. Flather, *Forecast and hindcast simulations of the braer oil spill*, Mar. Pollut. Bull. **28** (1994), no. 4, 219–229.
- [45] A.J. Elliot and N. Hurford, *Shear diffusion and the spreading of oils slicks*, Oil Chemical Pollution (1989), no. 5, 347–363.
- [46] M.H. Fallah and R.M. Stark, *A probabilistic approach for dispersion of oil at sea*, Ocean Engng. **3** (1976), 145–156.
- [47] D. Farmer and M. Li, *Oil dispersion by turbulence and coherent circulations*, Ocean Engng. **21** (1994), no. 6, 575–586.
- [48] J. A. Fay, *Oil on the sea*, ch. The Spread of Oil Slicks on a Calm Sea, pp. 53–63, Hoult, D.P., 1969.
- [49] ITOPF (Int. Tanker Owners Poll. Federation), *Response to spills*, 1993.
- [50] F. Fischer, E. List, R. Koh, J.Imberger, and N. Brooks, *Mixing in inland and coastal waters*, London Academic Press, 1979.
- [51] H. B. Fischer, *On the tensor form of the bulk dispersion coefficient in a bounded skewed shear flow*, J. Geophys. Res. **83** (1978), no. 5, 2373–2375.
- [52] W. D. Forrester, *Distribution of suspended oil particles following the grounding of the tanker arrow*, J. Mar. Res. **28-29** (1971), 151–170.
- [53] Gardiner, C.W., *Handbook of stochastic methods*, Springer-Verlag, N.Y., 1985, 443 pp.
- [54] D. Grisolia-Santos, *Oil turbulent dispersion*, Dpto. Fisica. Universidad de Las Palmas de G.C. Spain. 30 pp. Unpublished, 1994.
- [55] J.C. Huang and F.C. Monastero, *Review of the state-of-the-art of oil spill simulation model*, Final report, Raytheon Ocean System, East Providence, Rhode Island, EE.UU., 1982.
- [56] J. R. Hunter, *An interactive computer model of oil slick motion*, Proceedings Oceanol-

Bibliografía

- ogy International (Brighton), Marine Science Laboratories, Anglesey, Wales, U.K., 1980, pp. 42–50.
- [57] J.R. Hunter, *Numerical modelling: Applications to marine systems*, pp. 257–269, Elsevier Sciences, 1987, The Application of Lagrangian Particle-Tracking Techniques to Modelling of Dispersion in the Sea.
- [58] ———, *Numerical modelling: Applications to marine systems*, ch. The Application of Lagrangian Particle-Tracking Techniques to Modelling of Dispersion in the Sea, pp. 257–269, Elsevier Science Publishers B.V. (North Holland), 1987.
- [59] T. Ichiye, *Upper ocean boundary-layer flow determined by dye diffusion*, Phys. Fluids Suppl. (1967), no. S270.
- [60] T. Ichiye, H. Lida, and B. Plutchak, *Analysis of diffusion of dye patches in the ocean*, Tech. Report CU-8-64 to ONR and Nğ CU-9-64 to AEC, 1964, Unpublished manuscript.
- [61] O. Jansen, *Dispersion of oil from drifting oil slicks*, Tech. report, AMOP, Canada, June 14-16 1983, 40 pp.
- [62] P. Jeffery, *Large scale experiments on the spreading of oil at sea and disappearance by natural factors*, Proc. Of the Joint Conf. On Prevention and Control of Oil Spills, 1973, pp. 469–474.
- [63] A. D. Jenkins, *Simulation of turbulent dispersion using a simple random model of the flow field*, Appl. Math. Modelling 9 (1985), 239–245.
- [64] O. Johansen, *Dispersion of oil from drifting slicks*, Spill Technology Newsletter 7 (1982), no. 6, 134–149.
- [65] ———, *Drift of submerged oil at sea*, Tech. Report p 319/1, Continental Shelf Institute, Trondheim, Norway, 1985.
- [66] O. Johansen, *A particles in fluid concept for modelling of dispersion of hydrocarbons from produced water discharges*, Project Note 28252, OCEANOR, Trondheim, Norway, 1992.

- [67] N. G. Van Kampen, *Stochastic processes in physics and chemistry*, North-Holland, Amsterdam, Holland, 1981.
- [68] C.M. Allen K.J. Beven Adn P.A. Carling Kelsey, A., *Transport and mixing in the environment*, ch. 22, pp. 419–439, John Wiley and Sons, 1994.
- [69] Kinzelbach, W, *The random walk method in pollutant transport simulation*, Groundwater Flow and Quality Modelling, D. Reidel, Dordrecht, 1988, pp. 227–245.
- [70] V. Kolluru, M.L. Spaulding, and E. Anderson, *A three dimensional subsurface oil dispersion model using a particle based approach*, Proceedings of the 17th AMOP Technical Seminar (Vancouver, British Columbia, Canada), Arctic Marine Oil Spill Program (AMOP), June 8-10 1994, pp. 867–894.
- [71] V. S. Kolluru, M. L. Spaulding, and E.L. Anderson, *Application and verification of worldwide oil spill model (WOSM) to selected spill events*, Proceedings of the 16th AMOP Technical Seminar (Environment Canada, Ontario, Canada), Arctic Marine Oil Spill Program (AMOP), 1993, pp. 647–667.
- [72] F. Krogh, *Computer simulation of oil spills state of the art regarding models and applied techniques*, Combating Oil Pollution in the Kuwait Action Plan Region, UNEP, Regional Seas Reports and Studies No. 44, 1984, pp. 155 – 185.
- [73] J. Galt G. Watabayashi Lehr, W. and J. Semershein, *Tracking the north cape oil spill*, NOAA/HAZMAT, AMOP, 1996, pp. 1479–1485.
- [74] W. J. Lehr and H.M. Cekirge, *Oil slick movements in the kuwait actino plan region*, Combating Oil Pollution in the Kuwait Action Plan Region, UNEP Regional Seas Report and Studies Nğ 44, 1984, pp. 147–153.
- [75] W. J. Lehr, R. J. Fraga, M. S. Belen, and H. M. Cekirge, *A new technique to estimate initial spill size using a modified fay-type spreading formula*, Mar. Pollut. Bull. 15 (1984), no. 9, 326–329.
- [76] William J. Lehr, *Progress in oil spread modeling*, Proceedings of the 19th Artic and Marine Oilspill Program (AMOP) Technical Seminar, 1996.

- [113] Thorpe, S. A., *On the determination of k_v in the near-surface ocean from acoustic measurements of bubbles*, J. Physical Oceanography **14** (1984), 855–863.
- [114] A. Tompson and L. W. Gelhar, *Numerical simulation of solute transport in three-dimensional randomly heterogeneous porous media*, Water Resour. Res. **26** (1990), no. 10, 2541–2562.
- [115] A. Tompson, E. Vomvoris, and L. Gelhar, *Numerical simulation of solute transport in randomly heterogeneous porous media: Motivation, model development and application.*, Tech. Report Report No. 316, Ralph M. Parsons Laboratory. Hydrology and Water Resources Systems, February 1988, 114 pp.
- [116] W. Turrell, *Modelling the braer oil spill - a retrospective view*, Marine Pollution Bulletin **28** (1994), no. 4, 211–218.
- [117] ———, *Modelling the braer oil spill - a comment on proctor et al. (1994)*, Mar. Pollut. Bull. **30** (1995), no. 1, 92–93.
- [118] Uffink, G, *Modeling of solute transport with the random walk method*, Groundwater Flow and Quality Modelling, D. Reidel, Dordrecht, 1988, pp. 247–265.
- [119] S. Venkatesh, *The oil spill behaviour model of the canadian atmospheric environment service. part i: Theory and model evaluation*, Atmosphere-Ocean **26** (1988), no. 1, 93–108.
- [120] S. Venkatesh, V. R. Neralla, W. Hume, N. Parker, and B. Thomson, *The oil spill behaviour model of the canadian atmospheric environment service. part II: Evaluation of model guidance for emergency response*, Atmosphere-Ocean **26** (1988), no. 1, 109–117.
- [121] S. Wallis, *Mixing and transport in the environment*, ch. 5, pp. 89–111, John Wiley and Sons, 1994.
- [122] P.D. Yapa and H. T. Shen, *Modelling oil spills in rivers: A review*, J. Hydr. Res. (1994), 765–782.
- [123] Youssef, M., *The behavior of the near ocean surface water under the combined action*

Bibliografía

of waves and currents in shallow water, Ph.D. thesis, Ocean Engineering Department.
University of Rhode Island. USA, 1993, 181 pp.

Capítulo 6. Apéndices

6.1 Procesos de Wiener-Lévy

Este proceso estocástico es también conocido como *movimiento Browniano*, que describe el movimiento aleatorio de una partícula pequeña inmersa en un fluido o un gas. Un proceso $x(t)$ se dice que es de Wiener-Lévy, o más corrientemente, de Wiener si cumple que:

- (a) $x(t)$ tiene incrementos independientes entre si y estacionarios
- (b) Cada uno de los incrementos se distribuye según una gaussiana.
- (c) El valor medio de la función es cero, $E[x(t)] = 0 \forall t$.
- (d) $x(0) = 0$

Además de estas definiciones, otras propiedades relevantes del proceso son las siguientes:

- La varianza del incremento $x(t_2) - x(t_1)$ cuando $t_1 < t_2$ es proporcional a $t_2 - t_1$.
Esto es,

$$\text{Var}[x(t_2) - x(t_1)] = \sigma^2(t_2 - t_1)$$

donde $t_1 < t_2$ y σ^2 es un parámetro.

- Un proceso de Wiener es un proceso aleatorio gaussiano, ya que cada uno de los incrementos en el proceso de Wiener sigue una distribución normal.
- $\text{Cov}[x(t_1), x(t_2)] = \text{Var}[x(t_1)]$ si $t_1 < t_2$. Por lo tanto, no son procesos estacionar-

Evaluación del tensor \mathbb{B}

ios en la covarianza.

- La función de autocorrelación del proceso es simplemente $R(t_1, t_2) = \sigma^2 t_1$ si $t_1 < t_2$. Esta propiedad se deriva de la aplicación de (c).
- El proceso de Wiener también es un proceso de Markov, ya que los incrementos son independientes en el tiempo.
- Para un proceso de Wiener, la integral del proceso $z(t) = \int x(t)dt$ cumple que:

$$\begin{aligned} E[z(t)] &= 0 \\ \text{Var}[z(t)] &= \sigma^2 t^3 / 3 \end{aligned}$$

- Los procesos de Wiener-Lévy no son diferenciables.
- La distribución de probabilidad condicional de un proceso de Wiener:

$$f\{x(t) \mid x_0 = x_0\}, t_0 < t$$

satisface la ecuación diferencial de difusión:

$$\frac{\partial}{\partial t} f\{x(t) \mid x_0\} = \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} f\{x(t) \mid x_0\}$$

6.2 Evaluación del tensor \mathbb{B}

En este apéndice se determina la relación entre las componentes del tensor \mathbb{B} y las del tensor de dispersión \mathbb{K} para su uso en la ecuación discretizada del camino aleatorio (3.22). En un medio isotrópico, el tensor de difusión dependiente de la velocidad $K_{ij}(\mathbf{X})$ definido en la expresión (2.10) es:

$$K_{ij} = (l_L \tilde{v}_L) \delta_{ij} + (l_z \tilde{w} - l_L \tilde{v}_L) v_i v_j / V^2 \quad (160)$$

donde $v_i(\mathbf{X})$ es el vector velocidad y $V(\mathbf{X})$ es su módulo, \tilde{v}_L y \tilde{w} son las raíces cuadradas medias de las fluctuaciones de la componente horizontal y vertical de la velocidad y l_L y l_z son las longitudes de mezcla longitudinal y transversal respectivamente, según aparece en el fundamento teórico. $K_{ij}(\mathbf{X})$ está relacionado con $B_{ij}(\mathbf{X})$ a través de la expresión

$$K_{ij} = \frac{1}{2} B_{ik} B_{jk} = \frac{1}{2} \mathbb{B} \mathbb{B}^T \quad (161)$$

que ha aparecido en capítulos de la memoria.

Como K_{ij} es un tensor simétrico, se puede representar en su forma diagonalizada \mathbb{K}^* (Hildebrand, 1965 referenciado en Tompson, 1989) empleando la relación algebraica:

$$\mathbb{K} = \mathbb{R} \mathbb{K}^* \mathbb{R}^T \quad (162)$$

La matriz diagonal \mathbb{K}^* contiene los autovalores de \mathbb{K} , \mathbb{R} es la matriz de sus autovectores normalizados y colocados en columna y finalmente \mathbb{R}^T es la matriz traspuesta de \mathbb{R} . A partir de 6.160 los autovalores de \mathbb{K} son

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= l_L \tilde{v}_L \\ \lambda_3 &= l_z \tilde{w} \end{aligned} \quad (6.163)$$

El autovector normalizado correspondiente a λ_1 es:

$$\mathbf{e}_1 = (v_1/V, v_2/V, v_3/V) = (l_1, m_1, n_1) \quad (164)$$

que como se ve, corresponde a la dirección del vector \mathbf{v} . Los dos autovectores normalizados que restan, deben ser mutuamente ortogonales y estar en un plano perpendicular a \mathbf{v} . Su orientación en el plano es arbitrario, y se corresponde con las difusividades equivalentes en cualquiera de estas direcciones. Los autovectores están relacionados con los cosenos directores de l

a transformación que pasa del sistema de coordenadas \mathbf{X} al \mathbf{X}^* , donde la dirección marcada por X_1^* está alineada con el vector velocidad \mathbf{v} . Se puede observar en la siguiente figura:

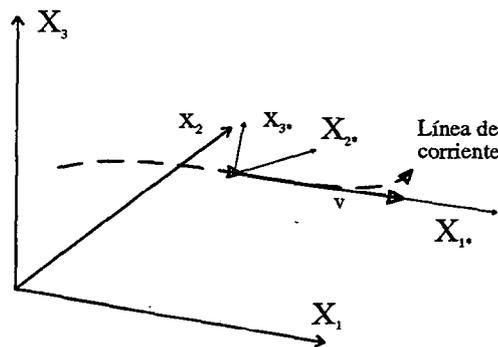


Figura 6.87. Relación entre el vector velocidad V , la línea de corriente y el sistema de ejes rotados X^*

De esta forma, la matriz \mathbb{R} es una matriz de rotación formada por los cosenos directores:

$$\mathbb{R} = \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \\ n_1 & n_2 & n_3 \end{bmatrix}$$

o lo que es lo mismo,

$$R_{ij} = \cos(X_i, X_j^*) \quad (165)$$

Si definimos la matriz:

$$A = \begin{bmatrix} \sqrt{l_L \tilde{v}_L} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{l_L \tilde{v}_L} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{l_z \tilde{w}} \end{bmatrix} = \mathbb{K}^{*1/2} \quad (166)$$

la ecuación 6.162 se puede escribir entonces como:

$$\mathbb{K} = \mathbb{R} \mathbb{A} \mathbb{A}^T \mathbb{R}^T \quad (167)$$

Reordenando 6.167:

$$\mathbb{K} = \mathbb{R} \mathbb{A} (\mathbb{R}\mathbb{A})^T \quad (168)$$

se puede concluir que a partir de 6.161:

$$\mathbb{B} = \sqrt{2}\mathbb{R}\mathbb{A} = \mathbb{R} \mathbb{B}^* \quad (169)$$

sin mas que definir \mathbb{B}^* como

$$\mathbb{B}^* = \begin{bmatrix} \sqrt{2l_L \tilde{v}_L} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2l_L \tilde{v}_L} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2l_z \tilde{w}} \end{bmatrix} = \sqrt{2}\mathbb{A} = \sqrt{2}\mathbb{K}^{*1/2} \quad (170)$$

y por tanto \mathbb{B}^* es la representación diagonal de la matriz B o su forma rotada en el sistema de coordenadas \mathbf{X}^* .

Evaluación del tensor \mathbb{B}

Para definir completamente \mathbb{B} a través de 6.169 es necesario simplemente encontrar los otros dos autovectores \mathbf{e}_2 y \mathbf{e}_3 para la matriz de rotación \mathbb{R} (ya que \mathbf{e}_1 se ha determinado previamente en 6.164). Hay muchas posibilidades para estos vectores puesto que corresponderán a los cosenos directores de los ejes rotados X_2^* y X_3^* . Una posibilidad para determinar una dirección \mathbf{n} perpendicular al primer autovector \mathbf{e}_1 es por ejemplo tomar:

$$\mathbf{n} = (-v_2/V, (v_1 + v_3)/V, -v_2/V) \quad (171)$$

que cuando se normaliza da $\mathbf{e}_2 = \mathbf{n}/|\mathbf{n}|$. El tercer autovector normalizado se obtendría sin más que hacer el producto vectorial $\mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2$. La matriz resultante $\mathbb{R} = R_{ij}$ está dada por

$$R = \begin{bmatrix} v_1/V & -v_2/\beta & -(v_2^2 + v_3^2 + v_1v_3)/\beta V \\ v_2/V & (v_1 + v_3)/\beta & [v_2(v_1 - v_3)]/\beta V \\ v_3/V & -v_2/\beta & (v_1^2 + v_2^2 + v_1v_3)/\beta V \end{bmatrix} \quad (172)$$

donde

$$\beta = \sqrt{V^2 + 2v_1v_3 + v_2^2} > 0 \text{ para } V > 0$$

Adviértase que \mathbb{R} será generalmente una función de la posición (en la medida que la dirección de \mathbf{v} puede variar en el espacio). La elección de \mathbf{e}_2 y \mathbf{e}_3 que se ha tomado, ha eliminado la posibilidad de cualquier singularidad de cálculo cuando se evalúen los componentes de R_{ij} siempre que se cumpla que el módulo de la velocidad sea distinto de cero, es decir, $V > 0$.

El desplazamiento difusivo general usado en la ecuación (3.36) estará dado por:

$$B_{ij}(X_{n-1})Z_{j,n}\sqrt{\Delta t} = R_{ik}B_{kj}^*Z_{j,n}\sqrt{\Delta t} \quad (173)$$

donde R_{ik} está dado por la expresión 6.172 y B_{kj}^* es la forma diagonalizada de B_{kj} dada por 6.170. Siguiendo el desarrollo anterior, se puede poner que $B_{ij} = R_{ij}B_{kj}^*$ donde B_{kj}^* está dado por $\sqrt{2K_{ij}^*}$ y entonces

$$B_{ij}(X_{n-1})Z_{j,n}\sqrt{\Delta t} = R_{ik}\sqrt{2K_{ij}^*}Z_{j,n}\sqrt{\Delta t} = R_{ik}Z_{k,n}\sqrt{2K_{ij}^*\Delta t} \quad (174)$$

donde R_{ik} se define como en 6.172. Esta expresión es correcta, salvo que los autovectores de la forma reducida de K_{ij}^* tienen dos grados de libertad (en vez de una como antes, cuando la matriz de rotación podría también tener un vector e_1 orientado arbitrariamente). En otras palabras, como l_L y l_z son linealmente independientes, e_1 no tiene que estar necesariamente alineado con v . Esto implica una mayor libertad para encontrar un R_{ik} , siendo la elección más obvia $R_{ik} = \delta_{ik}$. El uso de esta notación reduce 6.174 a:

$$d_i = \delta_{ik}Z_{k,n}\sqrt{2K_{ij}^*\Delta t} = Z_n\sqrt{2K\Delta t} \quad (175)$$

que es exactamente la que se usa en la ecuación 3.32.

6.3 Derivación de la ecuación de desplazamiento

Partamos de la ecuación de Fokker-Plank, dada por:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [a_x f] + \frac{\partial}{\partial y} [a_y f] + \frac{\partial}{\partial z} [a_z f] = \frac{\partial^2 [1/2b_x^2 f]}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 [1/2b_y^2 f]}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 [1/2b_z^2 f]}{\partial z^2}$$

Derivación de la ecuación de desplazamiento

Recordemos que la ecuación de advección-difusión para un soluto es:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [uc] + \frac{\partial}{\partial y} [vc] + \frac{\partial}{\partial z} [wc] = \frac{\partial}{\partial x} \left[K_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[K_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right]$$

Teniendo en cuenta que la concentración es igual a la probabilidad de densidad ($f = c$), la ecuación de Fokker-Planck se puede escribir como:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} [a_x c] - \frac{\partial}{\partial y} [a_y c] - \frac{\partial}{\partial z} [a_z c] - \frac{\partial^2 [1/2b_x^2 c]}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 [1/2b_y^2 c]}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 [1/2b_z^2 c]}{\partial z^2}$$

Desarrollemos algunos términos la ecuación de Fokker-Planck:

$$-\frac{\partial}{\partial x} [a_x c] = -\frac{\partial a_x}{\partial x} c - a_x \frac{\partial c}{\partial x}$$

$$-\frac{\partial}{\partial y} [a_y c] = -\frac{\partial a_y}{\partial y} c - a_y \frac{\partial c}{\partial y}$$

$$-\frac{\partial}{\partial z} [a_z c] = -\frac{\partial a_z}{\partial z} c - a_z \frac{\partial c}{\partial z}$$

$$\frac{\partial^2 [1/2b_x^2 c]}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 b_x}{\partial x^2} b_x c + \left[\frac{\partial b_x}{\partial x} \right]^2 c + 2 \frac{\partial b_x}{\partial x} b_x \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{1}{2} b_x^2 \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^2 [1/2b_y^2 c]}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 b_y}{\partial y^2} b_y c + \left[\frac{\partial b_y}{\partial y} \right]^2 c + 2 \frac{\partial b_y}{\partial y} b_y \frac{\partial c}{\partial y} + \frac{1}{2} b_y^2 \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}$$

$$\frac{\partial^2 [1/2b_z^2 c]}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 b_z}{\partial z^2} b_z c + \left[\frac{\partial b_z}{\partial z} \right]^2 c + 2 \frac{\partial b_z}{\partial z} b_z \frac{\partial c}{\partial z} + \frac{1}{2} b_z^2 \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

Desarrollemos los términos advectivos:

$$-\frac{\partial}{\partial x} [uc] = -\frac{\partial u}{\partial x} c - u \frac{\partial c}{\partial x}$$

$$-\frac{\partial}{\partial y} [vc] = -\frac{\partial v}{\partial y} c - v \frac{\partial c}{\partial y}$$

$$-\frac{\partial}{\partial z} [wc] = -\frac{\partial w}{\partial z} c - w \frac{\partial c}{\partial z}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[K_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right] = \frac{\partial K_{xx}}{\partial x} \frac{\partial c}{\partial x} + K_{xx} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[K_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right] = \frac{\partial K_{yy}}{\partial y} \frac{\partial c}{\partial y} + K_{yy} \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left[K_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right] = \frac{\partial K_{zz}}{\partial z} \frac{\partial c}{\partial z} + K_{zz} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$$

Agrupando términos, queda:

Ecuación de Fokker-Planck:

Derivación de la ecuación de desplazamiento

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} = & c \left[-\frac{\partial a_x}{\partial x} - \frac{\partial a_y}{\partial y} - \frac{\partial a_z}{\partial z} \right] + c \left[+\frac{\partial^2 b_x}{\partial x^2} b_x + \left[\frac{\partial b_x}{\partial x} \right]^2 \right] + c \left[+\frac{\partial^2 b_y}{\partial y^2} b_y + \left[\frac{\partial b_y}{\partial y} \right]^2 \right] + \\ & + c \left[\frac{\partial^2 b_z}{\partial z^2} b_z + \left[\frac{\partial b_z}{\partial z} \right]^2 \right] + \frac{\partial c}{\partial x} \left[-a_x + 2\frac{\partial b_x}{\partial x} b_x \right] + \frac{\partial c}{\partial y} \left[-a_y + 2\frac{\partial b_y}{\partial y} b_y \right] + \\ & + \frac{\partial c}{\partial z} \left[-a_z + 2\frac{\partial b_z}{\partial z} b_z \right] + \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \left[\frac{1}{2} b_x^2 \right] + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \left[\frac{1}{2} b_y^2 \right] + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \left[\frac{1}{2} b_z^2 \right] \end{aligned}$$

Ecuación de Advección-Difusión:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} = & c \left[-\frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial w}{\partial z} \right] + \frac{\partial c}{\partial x} \left[-u + \frac{\partial K_{xx}}{\partial x} \right] + \frac{\partial c}{\partial y} \left[-v + \frac{\partial K_{yy}}{\partial y} \right] + \\ & + \frac{\partial c}{\partial z} \left[-w + \frac{\partial K_{zz}}{\partial z} \right] + \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} [K_{xx}] + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} [K_{yy}] + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} [K_{zz}] \end{aligned}$$

Por lo que los coeficientes de c , $\frac{\partial c}{\partial x}$, $\frac{\partial c}{\partial y}$, $\frac{\partial c}{\partial z}$, $\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}$, $\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}$ nos indican que:

$$\frac{1}{2} b_x^2 = K_{xx} \Rightarrow b_x = \sqrt{2K_{xx}}$$

$$\frac{1}{2} b_y^2 = K_{yy} \Rightarrow b_y = \sqrt{2K_{yy}}$$

$$\frac{1}{2} b_z^2 = K_{zz} \Rightarrow b_z = \sqrt{2K_{zz}}$$

$$-a_x + 2\frac{\partial b_x}{\partial x} b_x = -u + \frac{\partial K_{xx}}{\partial x}$$

Se sustituye K_{xx} en función de b_x :

$$b_x^2 = 2K_{xx} \Rightarrow K_{xx} = \frac{1}{2}b_x^2$$

Se obtendrán soluciones similares para el resto de las componentes, luego:

$$a_x = u + \frac{\partial K_{xx}}{\partial x}$$

$$a_y = v + \frac{\partial K_{yy}}{\partial y}$$

$$a_z = w + \frac{\partial K_{zz}}{\partial z}$$

$$b_x = \sqrt{2K_{xx}}$$

$$b_y = \sqrt{2K_{yy}}$$

$$b_z = \sqrt{2K_{zz}}$$

