

COMPARACION DE ESQUEMAS PARA EL TRANSPORTE DE METALES Y SEDIMENTOS EN RIOS

Ana M. Alvarez, Alfredo E. Trento

*Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Universidad Nacional del Litoral, CC 217, (3000)
Santa Fe, Argentina, talva@fich1.edu.ar*

Palabras Clave: metales, finos, ríos.

Resumen. Se presenta un modelo matemático unidimensional para el transporte de metales pesados (MP) y sedimentos finos en cursos fluviales. Se compone de un sistema de tres ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (EDDP), una para el balance de las concentraciones de MP en agua, la segunda para las concentraciones de MP en el lecho y la última para la concentración de sedimentos suspendidos. Se admite la hipótesis de equilibrio instantáneo, que permite expresar los coeficientes de partición según las concentraciones de cada fase.

Se empleó un esquema numérico de tercer orden en diferencias finitas para aproximar la solución del sistema de EDDP.

El propósito del trabajo consistió en verificar la importancia de considerar el modelo completo de 3 ecuaciones, respecto de modelos simplificados que consideran sólo dos y/o una EDDP.

Se realizaron experimentos numéricos para un canal regular con flujo uniforme. Se plantearon tres escenarios: con condiciones erosivas, de equilibrio y con depositación de finos. Se analizaron resultados de ensayos con distintos coeficientes de transferencia de MP en el lecho y espesor de la capa activa.

Los resultados obtenidos muestran la importancia de considerar el transporte de finos, para los distintos escenarios considerados. En particular, se destaca que para condiciones sedimentológicas alejadas del equilibrio, se hace imprescindible considerar las variaciones espaciales y temporales de la concentración de finos. Los esquemas de una EDDP no resultan adecuados para tiempos mayores al de traslado.

1 INTRODUCCION

Los sedimentos finos, limos y arcillas, tanto de fondo como suspendidos, tienen una primordial importancia en los procesos de transporte de metales pesados (MP), debido a su capacidad de sorber otras sustancias. Walling et al. (2003) enfatizan que el conocimiento de la distribución de los sedimentos en la cuenca de un río es un prerequisite esencial para entender el transporte y almacenamiento de sedimentos asociados a contaminantes y nutrientes, debido a que los cursos de agua son habitualmente el destino final de los residuos tóxicos generados por las múltiples actividades humanas. La contaminación de sedimentos es considerada por varios organismos ambientales internacionales como el mayor riesgo en los ambientes acuáticos, en virtud de que estos elementos persisten en el medio como micropoluentes con elevada toxicidad (USDHHS, 2004). De tal modo los sedimentos además de transportar metales, los acumulan en el ambiente acuático (Zago et al., 2001). En el caso del cromo (Cr), estudios con trazadores aplicados a un curso fluvial determinaron que hasta el 76% se había depositado en los sedimentos de fondo de zonas “muertas” del río (Johansson et al., 2001).

El desarrollo de las ecuaciones específicas de los modelos matemáticos que representan el transporte de sedimentos finos y metales asociados, fue ampliamente realizado por Thomann and Mueller (1987), Schnoor (1996) y Chapra (1997), entre otros. Los parámetros más relevantes de los procesos de transporte son los coeficientes de partición de metales (sedimento/agua), cuya determinación es importante pues están relacionados con las variaciones granulométricas y concentraciones de los sedimentos suspendidos y de fondo y otras variables de estado. En trabajos anteriores (Trento y Alvarez, 2006) se analizaron los antecedentes sobre modelos matemáticos y numéricos referidos a esta temática.

Se presenta un modelo matemático compuesto de tres ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (EDDP), cuyas variables dependientes son las concentraciones de MP en agua (CT_w), en el lecho (r) y de los sedimentos finos (S_w). Los dos modelos simplificados consideran: a) como variables dependientes CT_w y r con S_w constante, y b) sólo la variable CT_w con r y S_w constantes.

Las simplificaciones en muchas ocasiones se asumen por la necesidad de evitar complicaciones con parámetros difíciles de evaluar, por ejemplo tensiones de corte o velocidades de sedimentación. En otros casos debido a la falta de información sedimentológica. En cualquier caso, es importante ser conscientes de los errores que seguramente se presentarán, provenientes de las simplificaciones y supuestos realizados. Así, la elección de un modelo u otro será una situación de compromiso entre el fenómeno que se desea representar, el modelo utilizado, y la calidad de los resultados esperables.

El objetivo de este trabajo es verificar la importancia de considerar el modelo completo de 3 ecuaciones, respecto de sistemas simplificados que consideran sólo dos y/o una EDDP.

Este trabajo fue realizado en el marco de los Proyectos de Investigación CAI+D 2006: “Transporte de Sedimentos Finos y Metales Tóxicos en Cursos Fluviales”, PI 24-136, subsidiado por la Universidad Nacional del Litoral (Santa Fe) y del PICT Raíces: “Transporte de Cromo y Sedimentos Finos en el Río Salado (Santa Fe)”, subsidiado por la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica de Argentina.

2 MODELO MATEMATICO DE 3 ECUACIONES

El modelo de mayor grado de complejidad utilizado en este trabajo, corresponde a un sistema de tres EDDP, una para el balance de las concentraciones de MP en agua (CT_w) [$M_{MP} L^{-3}$], la segunda para la concentración de MP (sorbidos a los sedimentos del lecho r) [$M_{MP} M_s^{-1}$] y la última para la

concentración de sedimentos suspendidos, S_w [$M_s L^{-3}$], donde M_{MP} y M_s son las masas de MP y sedimentos respectivamente. Este modelo de tres ecuaciones se obtiene a partir del modelo matemático de seis EDDP propuesto por Schnoor (1996), bajo determinadas hipótesis de equilibrio instantáneo. Una descripción detallada del modelo matemático, sus hipótesis y el modelo numérico puede consultarse en Trento y Alvarez, 2006.

$$\frac{\partial CT_w}{\partial t} = -\frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (QCT_w) + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left(E_L A \frac{\partial CT_w}{\partial x} \right) + CT_w \left(-k_s f_{pw} - f_{dw} \frac{k_L}{h} \right) + r \left(\frac{k_L}{h Kp_b} + \frac{\alpha}{\gamma} S_b \right) + F_s + F_p \quad (1)$$

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \frac{Kp_b}{d(1+Kp_b S_b)} \left[-r \left(\frac{k_L}{Kp_b} + \frac{(Kp_b k_s S_w h)}{(1+Kp_b S_b)} \right) + CT_w \left(k_s h \frac{S_w Kp_w}{1+S_w Kp_w} + \frac{k_L}{1+S_w Kp_w} \right) \right] \quad (2)$$

$$\frac{\partial S_\omega}{\partial t} = -\frac{1}{A} \frac{\partial (QS_\omega)}{\partial x} + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left(E_L A \frac{\partial S_\omega}{\partial x} \right) + \frac{m_e}{h} - \frac{m_d}{h} \quad (3)$$

Con $Q=UA$ [$L^3 T^{-1}$] el caudal líquido, U [LT^{-1}] la velocidad media en la sección transversal, A [L^2] el área de la sección transversal, E_L [$L^2 T^{-1}$] el coeficiente de dispersión longitudinal, F_s y F_p [$M_{MP} L^{-3} T^{-1}$] las fuentes distribuidas de MP soluble y particulado en la columna de agua, x [L] la coordenada espacial y t [T] la coordenada temporal. Otras variables involucradas, además de los coeficientes de partición sedimento/agua para el lecho, Kp_b [$L^{-3} M_s^{-1}$] y para la columna de agua, Kp_w [$L^{-3} M_s^{-1}$], son: el coeficiente de transferencia de MP en el lecho, k_L [LT^{-1}], el coeficiente $\gamma = h/d$, con h [L] columna de agua y d [L] la capa activa del lecho, la concentración [$M_s L^{-3}$] de sedimentos en el volumen ambiental del lecho (S_b), la tasa constante [T^{-1}] de sedimentación (k_s), la tasa [T^{-1}] constante de resuspensión o erosión (α), las fracciones disueltas y particuladas de MP en agua $f_{d,w}$ y $f_{p,w}$, la tasa de erosión de los sedimentos de fondo m_e [$M_s L^{-2} T^{-1}$] y la tasa de depositación de los sedimentos suspendidos m_d [$M_s L^{-2} T^{-1}$], donde el subíndice s indica soluble, p particulada, w en agua y b en el lecho, M_s la masa de sedimentos finos y M_{MP} la de metales pesados y entre corchetes se indican las dimensiones respectivas.

Se asume que la distribución entre la fase particulada y la disuelta en agua es instantánea (Johansson et al., 2001), debido a que se verifica equilibrio instantáneo, esto implica que las escalas de tiempo de las cinéticas de sorción de los metales pesados son sustancialmente mayores que las escalas de los otros procesos: la advección y la dispersión.

En los sedimentos del lecho el intercambio de metales pesados con el agua se asume que ocurre sólo en la fase disuelta, y es representado como un mecanismo difusivo en la interfase agua y lecho, dado por el gradiente de concentración.

A partir del Modelo de tres ecuaciones se puede obtener el de dos ecuaciones, bajo hipótesis de estacionariedad en la concentración de sólidos, esto es: $\partial S_w / \partial t = 0$, resultando un modelo matemático compuesto por las ecuaciones (1) y (2), con $S_w = S_w(x)$. En caso de equilibrio sedimentológico $S_w = \text{constante}$, de lo contrario S_w puede presentar variaciones espaciales según domine la erosión o la depositación de sedimentos.

Si además se admite $\partial r / \partial t = 0$, entonces $r = \text{constante}$ y el modelo se reduce a 1 sola EDDP, ecuación (1).

El modelo numérico se desarrolló a partir del algoritmo QUICKEST (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms), propuesto por Leonard (1979), para aproximar las ecuaciones de advección-dispersión (1) y (3), considerando los procesos asociados al transporte de MP, advección, dispersión, intercambio de metales y sedimentos entre la columna de agua y los sedimentos del lecho, erosión-resuspensión y depositación. La ecuación (2) se resolvió con un esquema en diferencias de primer orden. Los detalles del esquema de discretización pueden consultarse en Alvarez y Trento (2004).

3 APLICACIONES

Se consideró un canal ideal, de sección transversal trapezoidal constante, cuya geometría se corresponde, en promedio, con la del tramo de 60 km de longitud del río Salado, donde se pretende en un futuro aplicar los modelos. El canal se definió con una base de fondo de 35 m, y talud $z = 4$. Se adoptó un caudal de $10 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, un tirante normal $h = 1 \text{ m}$, pendiente de fondo $S_f = 6 \cdot 10^{-4}$ y velocidad del escurrimiento $U = 0.26 \text{ ms}^{-1}$. En todos los casos se consideró un escurrimiento uniforme. El coeficiente de dispersión fue $E_L = 10 \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$, calculado con una fórmula empírica. La concentración de sólidos del lecho S_b se adoptó en 0.4 kg l^{-1} .

La longitud del canal se discretizó mediante 600 elementos computacionales de longitud $\Delta x = 100 \text{ m}$ y se utilizó un $\Delta t = 120 \text{ s}$, en todos los casos.

Se adoptó una profundidad de la capa activa $d = 3 \text{ cm}$, el coeficiente de transferencia de MP del lecho $k_L = 4 \cdot 10^{-5} \text{ cm s}^{-1}$, la tasa de sedimentación $k_s = 4 \cdot 10^{-6} \text{ s}^{-1}$ y los coeficientes de partición en el lecho y la columna de agua $1 \cdot 10^4$ y $4 \cdot 10^4 \text{ kg}^{-1}$, respectivamente.

A partir de la ecuación de Manning, para el radio hidráulico $\approx h$, se calculó la tensión de corte del lecho (τ_0), ecuación (4):

$$\tau_0 = \rho_w g U^2 n^2 h^{-(1/3)} \quad (4)$$

con $g = 9.81 \text{ ms}^{-2}$, ρ_w la densidad del agua y $n = 0.026$ el coeficiente de Manning. Así resulta $\tau_0 = 0.45 \text{ Nm}^{-2}$. Las tensiones de corte críticas para erosión y depositación se fijaron, para todo el sistema, en $\tau_e = 0.50 \text{ Nm}^{-2}$ y $\tau_d = 0.10 \text{ Nm}^{-2}$, respectivamente. Estas tensiones, parámetros del modelo de transporte de sedimentos, son de difícil definición y por lo tanto es complicado asignarles un valor (Sandford y Maa, 2001). En este caso se adoptaron teniendo en cuenta las condiciones particulares de los primeros cm del lecho del tramo de río Salado, en base a estudios antecedentes (Trento y Alvarez, 2006). De tal modo las tasas de erosión (m_e) y depositación (m_d) resultantes son nulas, porque $\tau_d < \tau_0 < \tau_e$.

Se consideraron condiciones iniciales nulas para las concentraciones totales de MP en agua, es decir: $CTW(x,0) = 0 \text{ mg}_{\text{MPL}}^{-1}$ y para el lecho, $r(x,0) = 10 \text{ mg}_{\text{MP}} \text{ kg}^{-1}$. Las condiciones de borde de aguas arriba fueron $CTW(0,t) = 0.1 \text{ mg}_{\text{MPL}}^{-1}$ y $Sw(0,t) = 0.12 \text{ kg m}^{-3}$, respectivamente, mientras que en el borde de aguas abajo se consideró gradiente nulo de concentraciones.

También, para esta situación de equilibrio sedimentológico se realizaron corridas del modelo de 3 ecuaciones con distintos coeficientes de transferencia de MP en el lecho ($k_L = 4 \cdot 10^{-4} \text{ cms}^{-1}$ y $k_L = 4 \cdot 10^{-6} \text{ cms}^{-1}$) y variaciones del espesor de la capa activa ($d = 1 \text{ cm}$ y $d = 5 \text{ cm}$).

Posteriormente, para analizar resultados del modelo en condiciones de no equilibrio, se adoptó un n de Manning = 0.03, determinándose $\tau_0 = 0.60 \text{ Nm}^{-2}$, resultando éste mayor que la tensión crítica para erosión τ_e , representando condiciones de erosión en todo el canal.

Finalmente, la situación de depositación en los 60 km se representó para n de Manning = 0.012, ya que la tensión en el lecho resultó $\tau_0 = 0.08 \text{ Nm}^{-2}$, menor que la tensión crítica de depositación τ_d .

4 RESULTADOS

4.1 Análisis de resultados con diferentes modelos

La [Figura 1](#) muestra los resultados obtenidos para CT_w con el modelo de 3 ecuaciones considerando S_w constante en el tiempo y en el espacio, para $t = 30, 60, 150$ y 360 días. Puede apreciarse que para tiempos mayores a 1 año, la concentración de MP en agua llega a una situación final de equilibrio alcanzando los valores del borde de aguas arriba, el que simula una fuente de MP permanente. Estos resultados se corresponden con los que se obtendrían con un modelo de 2 ecuaciones pues, a los efectos prácticos, en este caso particular $S_w = \text{constante}$.

En la misma [Figura 1](#) se graficaron los resultados obtenidos con el modelo de 1 ecuación. Se evidencia que al utilizar la ecuación (1) con r y S_w son constantes en tiempo y espacio, el perfil de CT_w resulta el mismo para tiempos superiores al tiempo de traslado (64 hs). En tal caso las curvas para todos los tiempos analizados son coincidentes. Se destaca también que el error cometido al utilizar una sola ecuación aumenta con el tiempo, registrándose el mayor error para la situación final de equilibrio.

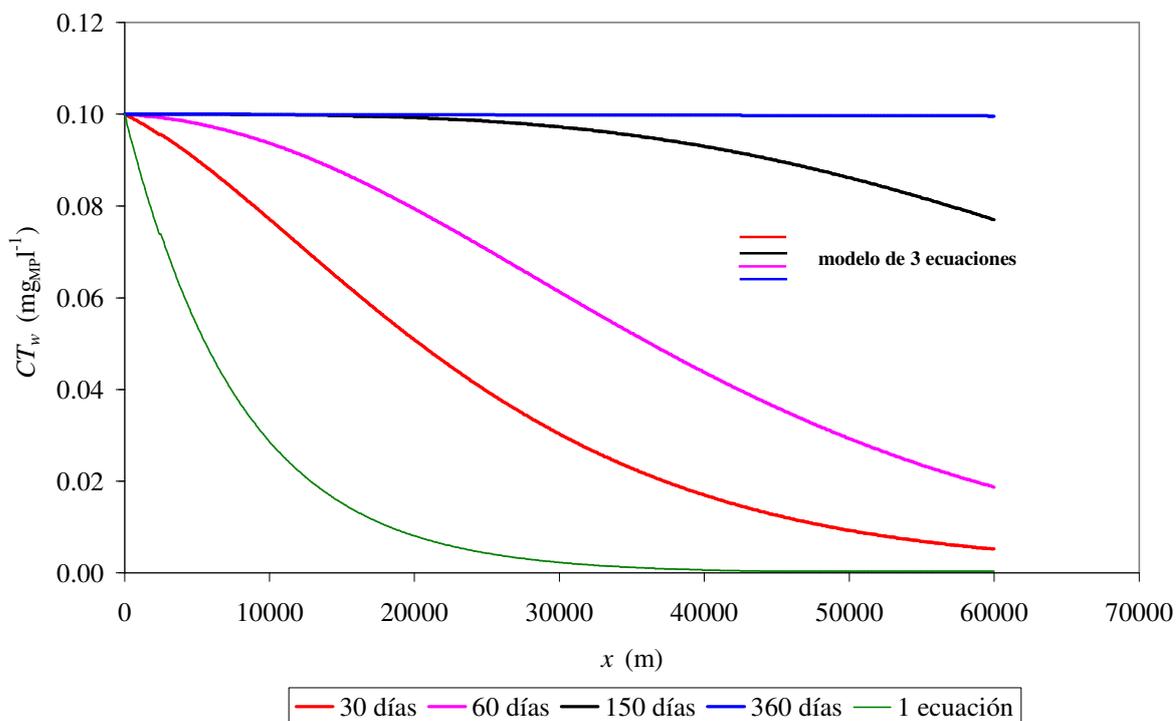


Figura 1: Concentración Total de MP en agua. Equilibrio sedimentológico.

En la [Figura 2](#) se observan los valores de CT_w , obtenidos con el modelo de dos (equilibrio sedimentológico) y tres ecuaciones (deposición y erosión) para el tiempo $t = 150$ días. Queda en evidencia el mayor error cometido, ya sea por defecto ($\approx 20\%$) y por exceso ($\approx 60\%$) al usar el modelo simplificado, en caso de existir erosión o deposición respectivamente.

Para condiciones similares a las ensayadas anteriormente, en la [Figura 3](#) y en la [Figura 4](#) se graficaron los perfiles longitudinales de r para $t = 150$ días y $t = 360$ días. Se aprecia que el modelo de dos ecuaciones (equilibrio sedimentológico) subestima los valores en el caso de deposición y los sobreestima en caso de erosión. Más aún, tal diferencia se acentúa en el caso de la deposición cuanto mayor es el tiempo considerado. Esto es así, porque el estado

final se alcanza entre los 90 y 120 días en el caso de erosión y para $t \approx 360$ días en el caso de equilibrio sedimentológico y depositación. En estos resultados se consideró como hipótesis que los efectos sedimentológicos del lecho no afectan el espesor de la capa activa, que se consideró constante.

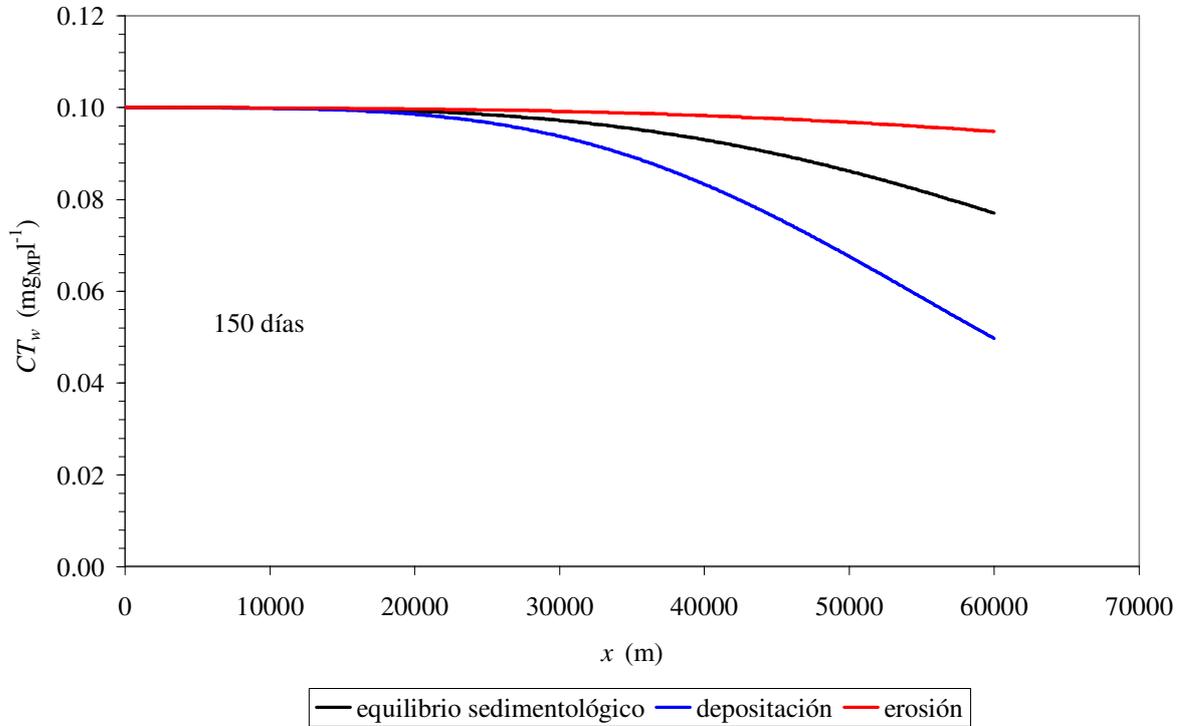


Figura 2: Concentración Total de MP en agua.

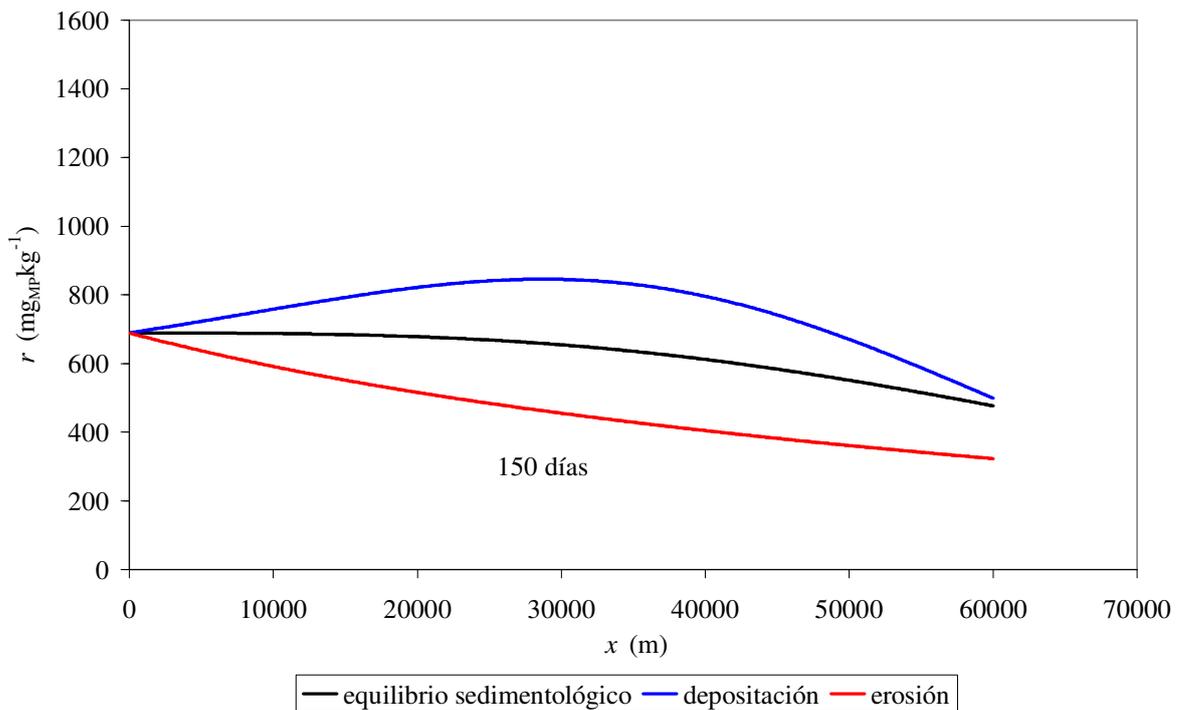


Figura 3: Concentración MP en sedimentos del lecho.

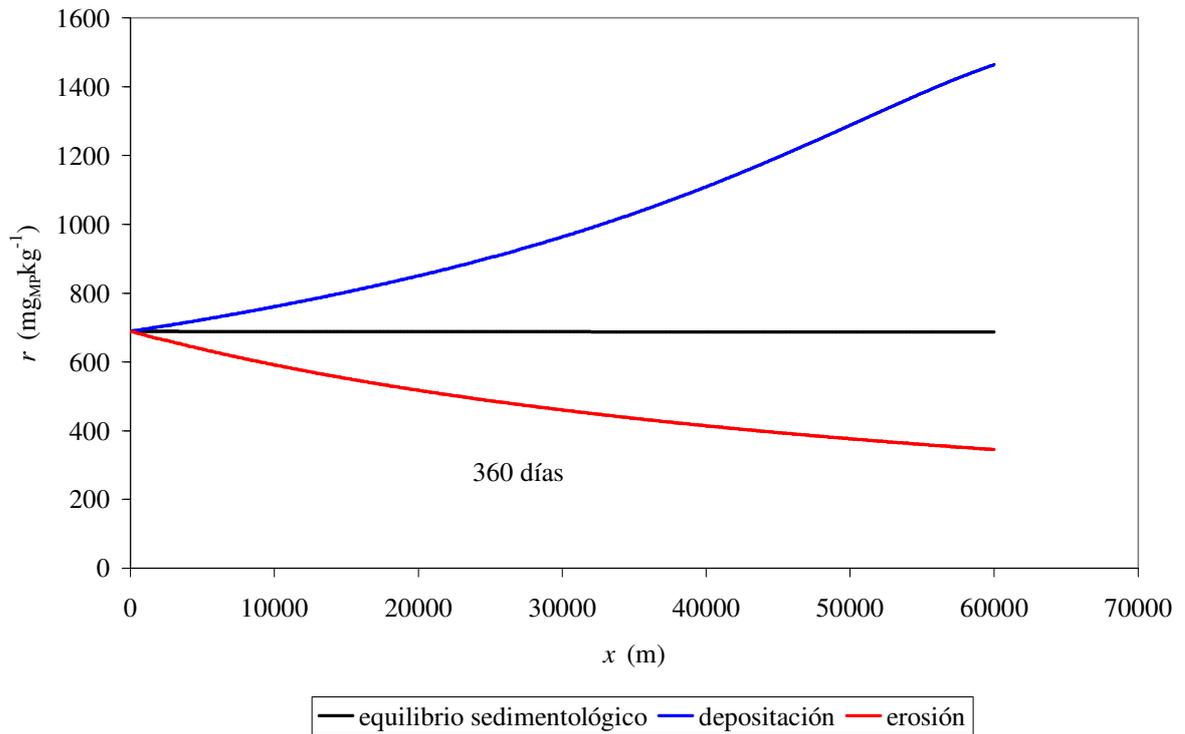


Figura 4: Concentración MP en sedimentos del lecho

La variación de S_w a lo largo de los 60 km se observa en la [Figura 5](#), para el modelo de 3 ecuaciones (considerando deposición, erosión y equilibrio, alternativamente). Para los dos primeros casos son evidentes las diferencias que resultan al utilizar el modelo simplificado respecto al más complejo.

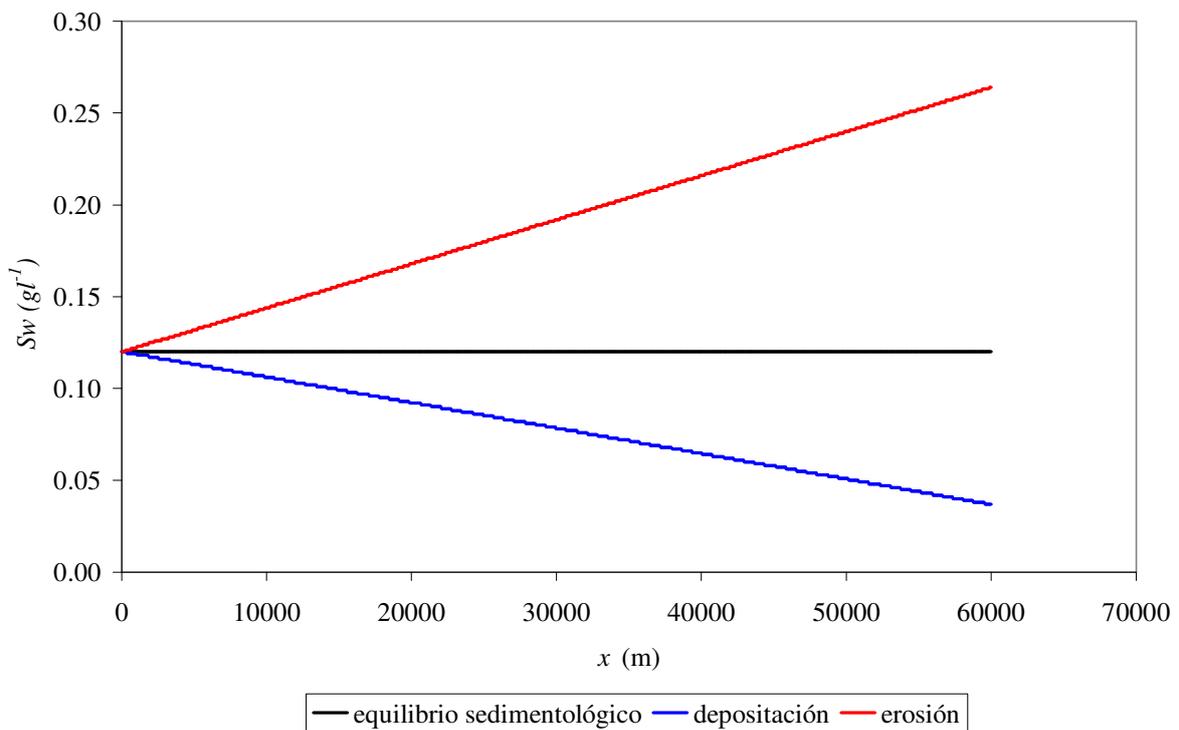


Figura 5: Concentración de sedimentos en agua.

4.2 Análisis de sensibilidad de parámetros

El ensayo realizado para un coeficiente de transferencia de MP entre el lecho y la columna de agua, k_L , mayor en un orden de magnitud respecto al adoptado en los ensayos de referencia iniciales, muestra que se alcanza la situación de equilibrio final más rápidamente, tanto para las concentraciones de MP en agua (Figura 6) como para las concentraciones de MP en los sedimentos del lecho (Figura 7). Lo contrario ocurre al disminuir en un orden k_L . Esto se debe a que k_L depende en forma directa del coeficiente de difusión molecular del MP considerado en los poros de la capa activa del lecho.

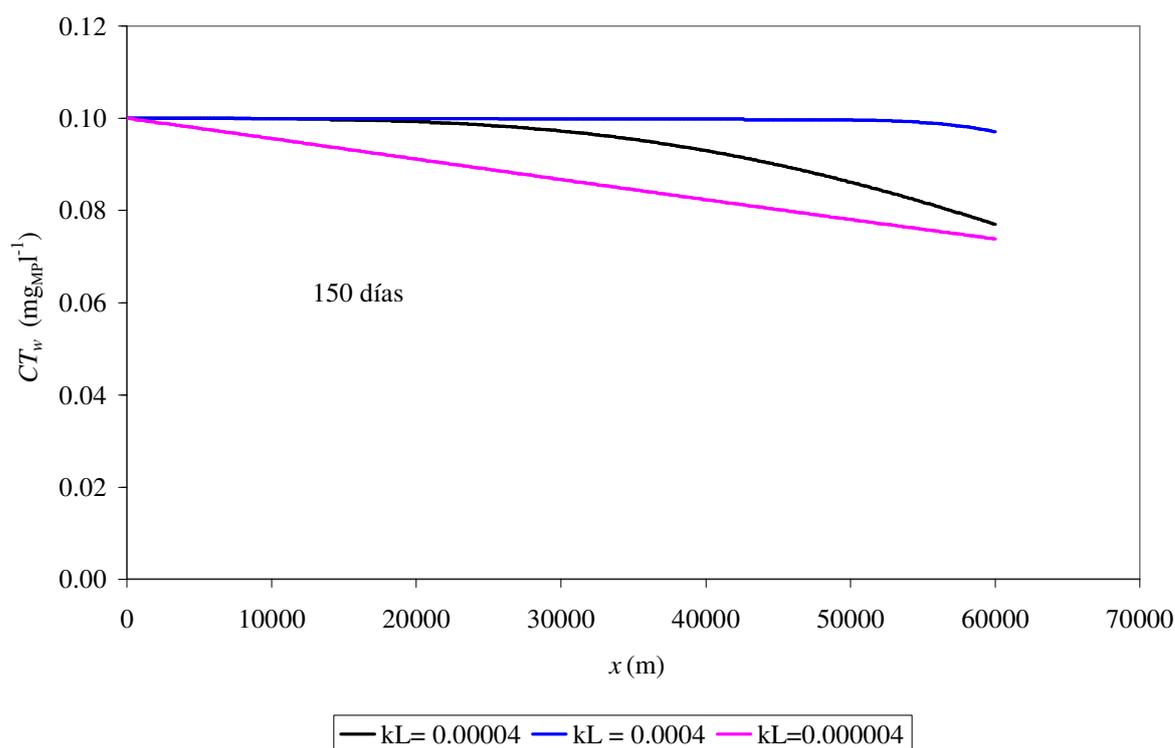


Figura 6: Concentración Total MP en agua. Variación del coeficiente de transferencia de MP en (cm s^{-1})

La variación del espesor de la profundidad crítica sólo se manifiesta en los valores de la concentración de MP en los sedimentos del lecho (r). En la Figura 8 se observa que cuanto mayor es la profundidad activa, más demora en alcanzarse la situación final de equilibrio, debido a que se necesita una mayor cantidad de masa de MP en el lecho para saturar la capa activa. Se destaca que el espesor d no influye en CT_w , para las condiciones de equilibrio sedimentológico ensayadas.

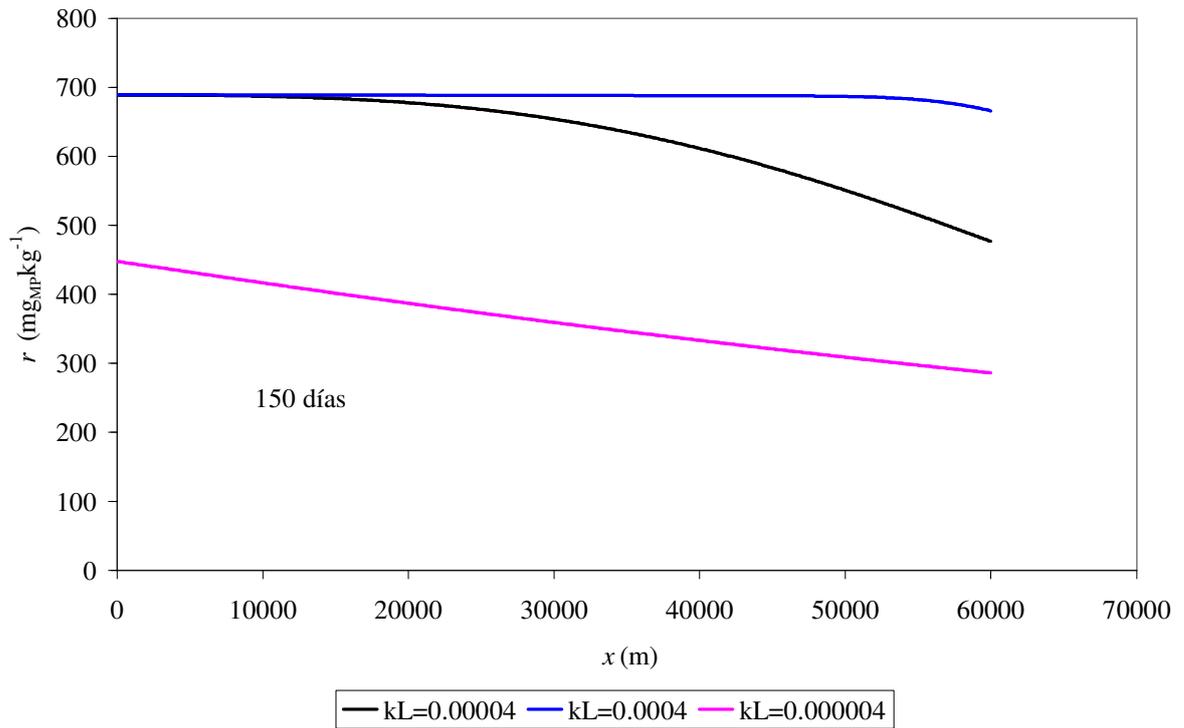


Figura 7: Concentración de MP en sedimentos del lecho. Variación del coeficiente de transferencia de MP (cm s^{-1})

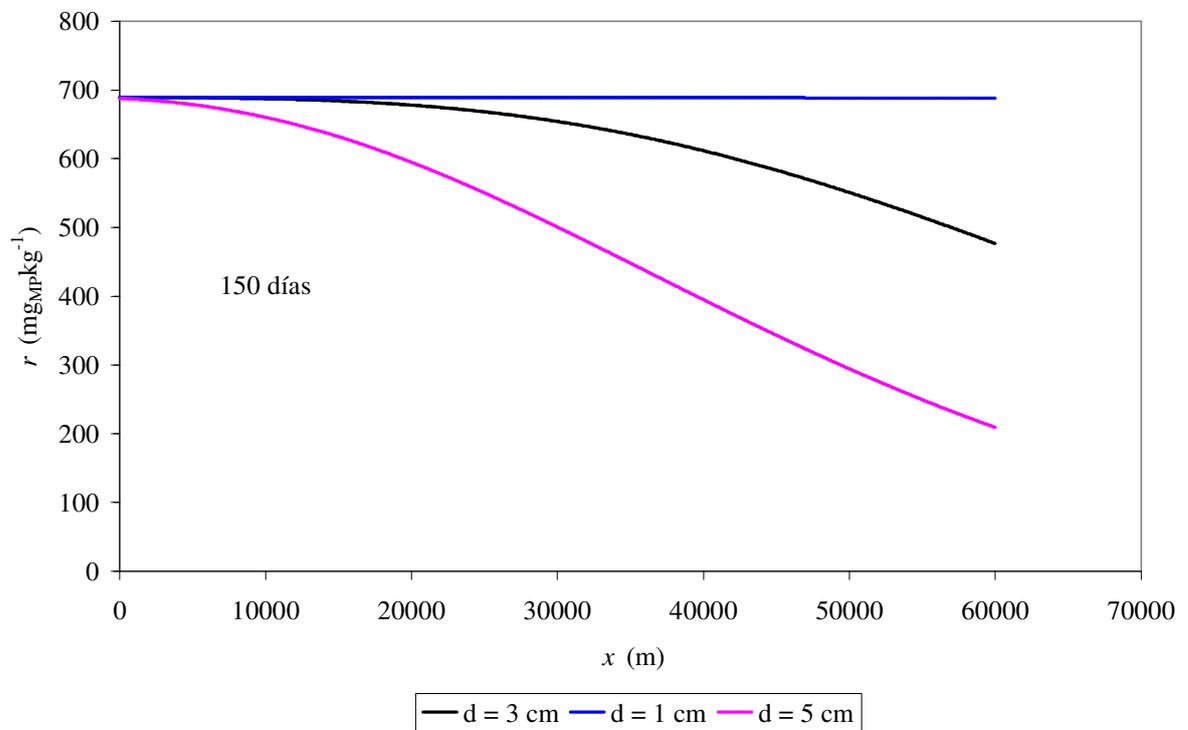


Figura 8: Concentración de MP en sedimentos del lecho. Variación de la profundidad crítica

5 CONCLUSIONES

Se verifica la importancia de emplear el modelo de 3 ecuaciones para representar adecuadamente la dinámica del transporte de los sedimentos finos asociada a la de los MP, si se quiere obtener una buena aproximación del fenómeno, tal como ocurre en la realidad.

El modelo de 2 ecuaciones sólo es válido si se cumplen condiciones de equilibrio sedimentológico.

El modelo de una ecuación subestima groseramente las concentraciones de MP en agua, para tiempos superiores al de traslado.

Se destaca la importancia de una correcta estimación del espesor de la capa activa debido a que es un factor determinante del tiempo en que el r alcanza su máximo valor.

El coeficiente k_L es un parámetro importante del modelo ya que su variación influye directamente sobre las variables de estado CT_w y r , pues está relacionado con la difusión molecular de los MP en la fase líquida del lecho, el espesor de la capa activa del mismo y la columna de agua.

Los resultados obtenidos muestran la necesidad de contar con información del sistema físico en estudio y de realizar experimentos de laboratorio que permitan determinar adecuadamente los parámetros básicos de los modelos.

6 REFERENCIAS

- A. M. T. Alvarez y A. Trento. Transporte de Metales Pesados en Cursos Fluviales, Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, XIV ENIEF, CD Rom: 1151-1165, 2004.
- S.C. Chapra. *Surface Water-Quality Modelling*, John Wiley and Sons Inc., Iowa., 1997.
- H. Johansson, M. Lindstrom and L. Hakanson. On the Modelling of the Particulate and Dissolved Fractions of Substances in Aquatic Ecosystems-Sedimentological and Ecological Interactions. *Ecological Modelling*, 137:225-240, 2001.
- B.P. Leonard. A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Comp. Methods in Applied Mech. and Eng.*, 19:59-98, 1979.
- L.P. Sandford and J.P. Maa. A unified erosion formulation for fine sediments. *Marine Geology*, 179:9-23, 2001.
- J.L. Schnoor. *Modelling trace metals. In: Environmental modelling-fate and transport of pollutants in water air and soil*, John Wiley and Sons Inc, Iowa , 684 pp., 1996.
- R.V. Thomman and J.A. Mueller. *Principles of surface water quality modeling and control*, Harper Collins Publishers, 1987.
- A. Trento y A. M. Alvarez. Un modelo numérico para el transporte de sedimentos finos y cromo en el río Salado. ENIEF 2006, XV Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, XXV:1413-1423. <http://www.cimec.org.ar/ojs/index.php/mc/issue/archive>, 2006.
- USDHHS. *Chromium Hexavalent Compounds*. U.S. Department of Health and Human Services, 11th Report on Carcinogenesis 2004 Summary. Public Health Service National Toxicology Program, 2004.
- D.E. Walling, P.N. Owens, J. Carter, G.J.L. Leeks, S. Lewis, A.A. Meharg and J. Wright. *Storage of sediment-associated nutrients and contaminants in river channel and floodplain systems*, Applied Geochemistry, 18:195–220, 2003.
- C. Zago, A.E. Giblin and A. Bergamasco. Changes in the metal content of surficial sediments of Boston Harbor since the cessation of sludge discharge. *Marine Environmental Research*, 51:5: 389-415, 2001.