



**Universidad
Zaragoza**

UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

Trabajo Fin de Máster

Máster en Ingeniería Industrial

Validación de una herramienta de simulación de flujo viscoso transitorio en lámina libre

Autor:

Daniel Galindo Usón

Directores:

**Pilar García Navarro
Javier Fernández Pato**

ESCUELA DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA
2018



Escuela de
Ingeniería y Arquitectura
Universidad Zaragoza



DECLARACIÓN DE AUTORÍA Y ORIGINALIDAD

(Este documento debe acompañar al Trabajo Fin de Grado (TFG)/Trabajo Fin de Máster (TFM) cuando sea depositado para su evaluación).

D./D^a. _____,

con nº de DNI _____ en aplicación de lo dispuesto en el art.

14 (Derechos de autor) del Acuerdo de 11 de septiembre de 2014, del Consejo de Gobierno, por el que se aprueba el Reglamento de los TFG y TFM de la Universidad de Zaragoza,

Declaro que el presente Trabajo de Fin de (Grado/Máster)
_____, (Título del Trabajo)

es de mi autoría y es original, no habiéndose utilizado fuente sin ser citada debidamente.

Zaragoza, _____

Fdo: _____

Validación de una herramienta de simulación de flujo viscoso transitorio en lámina libre

Resumen

Los desbordamientos de tanques de almacenamiento sobre tierra y las fugas de tuberías que transportan petróleo crudo y productos del petróleo ocurren con frecuencia. Los hidrocarburos derramados representan amenazas ambientales contaminando el suelo circundante y el agua subterránea subyacente. Predecir el destino y el transporte de estos productos químicos es necesario para la evaluación del riesgo ambiental y para el diseño de medidas correctivas.

El presente trabajo discute la formulación y validación de un modelo de simulación de flujo viscoso de superficie para predecir el comportamiento de vertidos de petróleo teniendo en cuenta la infiltración en el suelo y la evaporación. El flujo superficial se simula adaptando un modelo de flujo transitorio de superficie libre promediado en la vertical (shallow water) con la reología adecuada. La infiltración se simula utilizando una versión del modelo de Green y Ampt, que se ha modificado para tener en cuenta las propiedades del crudo. Los flujos de infiltración y evaporación se han incorporado en la ecuación de continuidad global del volumen de fluido derramado. Este modelo se resuelve mediante una técnica de volúmenes finitos especialmente adaptada al cálculo realista sobre geometrías irregulares.

El modelo se ha verificado comparando sus predicciones con soluciones analíticas y resultados de literatura especializada. El estudio de verificación demuestra la aplicabilidad del modelo y ha permitido usarlo para reproducir un caso real de un derrame de petróleo. Este caso de estudio es útil para evaluar los posibles riesgos de una fuga puntual en un oleoducto en función de la topografía de los terrenos colindantes.

Índice general

1. Introducción y objetivos	1
2. Modelos de flujo viscoso transitorio en lámina libre	3
2.1. Descripción del problema	3
2.2. Ecuaciones que gobiernan el flujo viscoso transitorio en lámina libre	3
2.2.1. Ecuaciones de aguas poco profundas 2D (SW)	4
2.2.2. Modelo difusivo 2D (ZI)	5
2.2.3. Comparación entre las ecuaciones de los modelos SW y ZI	6
2.3. Formulación de los términos fuente	6
2.3.1. Infiltración	6
2.3.2. Evaporación	7
2.3.3. Variación del fondo	9
2.3.4. Pendiente de fricción sobre el fondo	9
2.4. Discretización en volúmenes finitos	10
3. Validación con soluciones exactas	13
3.1. Casos flujo axial	14
3.1.1. Casos test con aceite	14
3.1.2. Influencia de la temperatura sobre la viscosidad del petróleo	16
3.1.3. Comparación entre el modelo SW y el modelo ZI	18
3.2. Casos flujo radial	20
4. Caso real: Marshall (Michigan, USA)	25

4.1. Simulaciones realizadas y análisis de resultados	27
5. Conclusiones	31
Bibliografía	32
A. Anexo I: Obtención de las soluciones analíticas para flujo viscoso transitorio en lámina libre	35
A.1. Flujo viscoso transitorio en lámina libre sobre superficies horizontales	35
A.1.1. Flujo axial (line source) sobre superficies horizontales	35
A.1.2. Flujo radial (point source) sobre superficies horizontales	44
B. Anexo II: Propiedades de las ecuaciones de las aguas poco profundas 2D	53
C. Anexo III: Análisis de sensibilidad de los parámetros del modelo de infiltración de Green–Ampt	55
D. Anexo IV: Proceso de simulación con la herramienta	57
D.1. Generación de la malla	57
D.1.1. Malla cuadrada	58
D.1.2. Malla triangular Delaunay	58
D.1.3. Malla triangular Delaunay con zonas de refinamiento	59
D.1.4. Ficheros de entrada para la malla generada	60
D.2. Ficheros necesarios para la simulación	61
D.3. Lanzamiento de la simulación con la herramienta	63
E. Anexo V: Programas informáticos auxiliares	65
E.1. Matlab	65
E.2. Gnuplot	66
E.3. Paraview	67
E.4. QGIS	68

Índice de figuras

2.1.	Sistema de coordenadas utilizado en las ecuaciones de aguas poco profundas.	4
2.2.	Avance del frente mojado según el modelo de Green-Ampt.	7
2.3.	Izquierda: Porcentaje de masa evaporada frente al tiempo para una temperatura de $20^{\circ}C$. Derecha: Calado evaporado frente al tiempo para una temperatura de $20^{\circ}C$	8
2.4.	Izquierda: Parámetros de una celda de cálculo. Derecha: Elevación y calado asociadas a las celdas de cálculo.	10
3.1.	Tipos de comportamiento reológico del fluido	13
3.2.	Flujo axial. Izquierda: Condición inicial de un volumen constante. Derecha: Condición inicial de un caudal constante.	14
3.3.	Calado de los casos 1 y 2 para el instante de tiempo, $t=100s$	15
3.4.	Calado de los casos 3 y 4 para diferentes instantes de tiempo. Izquierda: esfuerzo de fricción turbulento sobre el fondo . Derecha: esfuerzo de fricción viscoso sobre el fondo	16
3.5.	Izquierda: Variación de la viscosidad del petróleo con la temperatura. Derecha: Valores de la viscosidad del petróleo para algunas temperaturas.	16
3.6.	Solución analítica con derrame a caudal constante en el instante $t=100s$ para diferentes temperaturas.	17
3.7.	Derrame a caudal constante para $T = 40^{\circ}C$. Izquierda: esfuerzo de fricción turbulento sobre el fondo ($n_{Man} = 0,007sm^{1/3}$). Derecha: esfuerzo de fricción viscoso sobre el fondo ($\tau_{yield} = 0,2Pa \cdot s$).	17
3.8.	Derrame a caudal constante para $T = 80^{\circ}C$. Izquierda: esfuerzo de fricción turbulento sobre el fondo ($n_{Man} = 0,007sm^{1/3}$). Derecha: esfuerzo de fricción viscoso sobre el fondo ($\tau_{yield} = 0,2Pa \cdot s$).	18

3.9.	Derrame a caudal constante para $T = 20^{\circ}C$. Izquierda: esfuerzo de fricción turbulento sobre el fondo . Derecha: esfuerzo de fricción viscoso sobre el fondo.	19
3.10.	Entrada de caudal a través de una esquina del dominio.	20
3.11.	Izquierda: Malla cuadrada (MC). Derecha: Malla triangular Delaunay (TD).	21
3.12.	Arriba: Calado $h [m]$ para los dos modelos de fricción en el instante $t = 2400s$ con malla cuadrada. Centro: Perfil longitudinal de la solución proporcionada por ambos modelos. Abajo: Solución analítica.	22
3.13.	Arriba: Calado $h [m]$ para los dos modelos de fricción en el instante $t = 2400s$ con malla triangular. Centro: Perfil longitudinal de la solución proporcionada por ambos modelos. Abajo: Solución analítica.	23
4.1.	Izquierda: Situación del punto de rotura del oleoducto. Derecha: Vista real ampliada del punto de rotura.	25
4.2.	Hidrograma de las roturas producidas en la línea.	25
4.3.	Representación gráfica del MDT junto con la extensión final de la mancha de petróleo (negro) y el punto de rotura (amarillo).	26
4.4.	Izquierda: Mapa de elevaciones del terreno. Derecha: Representación tridimensional de la topografía y de la malla de cálculo.	26
4.5.	Resultados numéricos de calado, $h[m]$, para diferentes instantes de tiempo. De arriba a abajo y de derecha a izquierda: $t = 8h, 18h, 22h$ y $30h$	28
4.6.	Tasa de infiltración $f_{inf}[m/s]$ (izquierda) e infiltración acumulada $F_{inf}[m]$ (derecha) para diferentes instantes de tiempo. De arriba a abajo: $t = 8h, 18h, 22h$ y $30h$	29
A.1.	Tipos de comportamiento del fluido.	36
A.2.	Flujo axial. Izquierda: derramamiento de un volumen cte. Derecha: derramamiento de un caudal cte.	37
A.3.	Valores de la función $\phi(y)$ para $\alpha = 0, 1, 2$ y diferentes valores de n	39
A.4.	Longitud adimensional $x_N^*(t)$ en función de t para diferentes valores de n	40
A.5.	Espesor de lámina adimensional $h^*(x, t)$, con $n=1$ para diferentes instantes de tiempo, en función de x	41
A.6.	Espesor de lámina adimensional $h^*(x, t)$, para $t=10$ s y para los diferentes índices n , en función de x	41
A.7.	Longitud dimensional $x_N(t)$, con $n=1$ en función del tiempo.	43

A.8.	Espesor de lámina dimensional $h(x, t)$, con $n=1$ para diferentes instantes de tiempo.	43
A.9.	Espesor de lámina dimensional $h(x, t)$, para $t=10$ s y diferentes n	44
A.10.	Flujo radial. Izquierda: derramamiento de un volumen cte. Derecha: derramamiento de un caudal cte.	45
A.11.	Valores de la función $\psi(z)$ para $\alpha = 0, 1, 2$ y diferentes valores de n	47
A.12.	Radio adimensional $r_N^*(t)$ en función de t para diferentes valores de n	48
A.13.	Espesor de lámina adimensional $h^*(x, t)$, con $n=1$ para diferentes instantes de tiempo, en función de x	49
A.14.	Espesor de lámina adimensional $h^*(x, t)$, para $t=10$ s y para los diferentes índices n , en función de x	49
A.15.	Longitud adimensional $r_N^*(t)$, con $n=1$ en función del tiempo.	50
A.16.	Espesor de lámina dimensional $h(r, t)$, para $n=1$, para diferentes instantes de tiempo.	51
A.17.	Espesor de lámina dimensional $h(r, t)$, para $t=10$ s, y para los diferentes índices n	51
C.1.	Comparación de los casos con volumen estancado de aceite y suelo permeable.	56
D.1.	Etapas del proceso de simulación.	57
D.2.	Malla cuadrada.	58
D.3.	Creación de direcciones preferenciales de flujo con malla cuadrada.	58
D.4.	Condición de Delaunay.	59
D.5.	Malla triangular Delaunay.	59
D.6.	Malla triangular con una zona de refinamiento.	59
D.7.	Fichero de entrada .txt.	60
D.8.	Fichero de entrada .inicial.	60
D.9.	Fichero de entrada .cond.	61
D.10.	Fichero de entrada .inlet.	61
D.11.	Fichero de entrada .outlet.	62
D.12.	Fichero de entrada .mud.	62
D.13.	Modelos de fricción disponibles en la herramienta de simulación.	62

D.14.	Fichero de infiltración.	63
D.15.	Fichero de evaporación.	63
D.16.	Arquitectura CPU vs GPU.	63
D.17.	Proceso interno de simulación en la herramienta.	64
E.1.	Script de Matlab para calcular las soluciones analíticas.	66
E.2.	Entorno visual del espacio de trabajo de Matlab.	66
E.3.	Script de Gnuplot para realizar representaciones gráficas.	67
E.4.	Interfaz gráfica de Paraview.	68
E.5.	Representación conjunta del ráster con el alcance del derrame y el punto de rotura (en amarillo).	69
E.6.	Información contenida en un raster.	69
E.7.	Establecimiento de las diferentes zonas del dominio con QGIS.	70

Índice de tablas

2.1. Vectores de variables que conforman el sistema de ecuaciones del modelo SW y del modelo ZI.	6
3.1. Casos realizados para la validación del flujo axial.	14
3.2. Tamaño del dominio en función del tipo de derrame.	15
3.3. Condiciones iniciales y condiciones de contorno impuestas según tipo de derrame.	15
3.4. Propiedades del petróleo y configuración del derrame con el modelo SW y el ZI.	19
3.5. Valor del parámetro característico de cada tipo de esfuerzo de fricción sobre el fondo para el modelo SW y el ZI.	19
4.1. Valor de los parámetros obtenidos para el modelo de infiltración de Green-Ampt.	27
A.1. Valores de η_N en función de n, para $\alpha = 0$, $\alpha = 1$ y $\alpha = 2$	39
A.2. Parámetros caso test derrame aceite sobre superficie horizontal e impermeable.	42
A.3. Valores de ξ_N en función de n, para $\alpha = 0$, $\alpha = 1$ y $\alpha = 2$	47
C.1. Valor de los parámetros del modelo de infiltración de <i>Green – Ampt</i> una vez se ha calibrado.	55
C.2. Condiciones iniciales y condiciones de contorno impuestas.	55

1 Introducción y objetivos

La simulación numérica se ha convertido en los últimos años en una herramienta indispensable para la predicción y gestión de riesgos hidráulicos y medioambientales. La razón principal es el aumento de la potencia computacional de los ordenadores personales, que permiten realizar cálculos complejos en tiempos razonablemente cortos. Para un correcto uso de estas herramientas, es necesario validar los modelos numéricos mediante la comparación de los resultados que proporcionan con soluciones analíticas en casos test bien identificados [5, 6, 11]. Dicha validación permite garantizar una cierta fiabilidad en cálculos futuros donde resulta inviable obtener soluciones exactas como, por ejemplo, ondas de avenida en ríos, roturas de presa, fugas de oleoductos, etc.

En este trabajo se pretende evaluar la capacidad de cálculo de un modelo distribuido de flujo transitorio viscoso en dos dimensiones que circula en régimen de lámina libre. Dicho modelo se encuentra integrado en una herramienta de simulación en desarrollo, la cual está impulsada por dos proyectos de investigación llevados a cabo por el Grupo Hidráulico Computacional (GHC) de la Universidad de Zaragoza. El primero de ellos se denomina *Desarrollo y validación de modelos de simulación avanzados con base física para procesos geofísicos e hidráulicos. SIMGEOAGUA* (CGL2015-66114-R) y compete al Ministerio de Ciencia e Innovación. El segundo proyecto se titula *Services for development of new software capabilities* (2016/0507) y se desarrolla en colaboración con la empresa Hydronia L.C.C (www.hydronia.com).

El fundamento matemático del modelo está basado en las ecuaciones bidimensionales de aguas poco profundas (Shallow Water Equations) [12, 17] que conforman un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales de tipo hiperbólico. Este modelo matemático proporciona una resolución detallada y precisa de los frentes de onda. En el caso de flujos viscosos, la correcta modelización de los términos fuente es uno de los puntos clave a la hora de obtener resultados fiables y precisos. Por lo tanto, resulta especialmente relevante el modelo reológico elegido para el término fuente de fricción [13]. Adicionalmente, se considerarán otros términos fuente de masa para tener en cuenta los procesos de infiltración [7] y evaporación [10] del fluido.

La discretización de las ecuaciones matemáticas está basada en el método de los volúmenes finitos y garantiza una correcta conservación de la masa [12, 13]. El modelo es capaz de trabajar con cualquier tipo de malla de cálculo (triangular o rectangular), por lo que en cada caso se elegirá una malla adecuada a las características del problema.

Dentro de los objetivos principales de este trabajo, se encuentra la realización de una revisión bibliográfica especializada, con el propósito de encontrar casos con solución exacta o datos experimentales. Mediante la comparación con dichas soluciones o datos de campo,

se pretende validar los resultados numéricos generados por el modelo. Otro objetivo es el de evaluar la sensibilidad del modelo a la malla de cálculo empleada (cuadrada o triangular) y a las condiciones de contorno.

Adicionalmente, se presenta la simulación de un caso real consistente en la rotura puntual de un oleoducto superficial de petróleo en la localidad de Marshall (Michigan, USA), que tuvo lugar el 25 de julio de 2010 y que generó una mancha de inundación de petróleo de la cuál se disponen de datos experimentales con los que comparar.

2 Modelos de flujo viscoso transitorio en lámina libre

2.1 Descripción del problema

Se plantea modelar flujos transitorios viscosos en lámina libre. En los flujos viscosos [5] es muy importante utilizar una reología adecuada para obtener resultados fiables y precisos. En general, las ecuaciones que modelan este tipo de flujos no tienen solución exacta, por lo que es necesario recurrir a métodos numéricos para obtener soluciones aproximadas.

2.2 Ecuaciones que gobiernan el flujo viscoso transitorio en lámina libre

Las ecuaciones generales que modelan un flujo transitorio incompresible son las siguientes:

- *Ecuación de conservación de la masa:*

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (2.1)$$

donde u es la componente de la velocidad en la dirección x , v es la componente de la velocidad en la dirección y , y w es la componente de la velocidad en la dirección z .

- *Ecuación de cantidad de movimiento para las componentes x , y , z :*

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial z} + \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} = 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uv)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v^2)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho vw)}{\partial z} + \frac{\partial P}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial z} = 0 \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u w)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v w)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w^2)}{\partial z} + \rho g + \frac{\partial P}{\partial z} - \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} = 0 \quad (2.4)$$

donde ρ es la densidad, g es la aceleración de la gravedad, t el tiempo, P es la presión, y los términos τ_{ij} son esfuerzos de fricción.

Resolver directamente estas ecuaciones es un proceso muy complejo en presencia de una superficie libre que puede cambiar con el tiempo. Por esta razón, en algunas situaciones complejas, las ecuaciones se integran en la dimensión que representa la profundidad del dominio del flujo, y se imponen las condiciones de contorno adecuadas, dando lugar a las ecuaciones de aguas poco profundas en 2D [17].

2.2.1 Ecuaciones de aguas poco profundas 2D (SW)

Al integrar en la vertical las componentes de (2.2), (2.3) y (2.4), no se resuelve la componente vertical de la velocidad w , y se definen variables promedio en el plano \bar{u} y \bar{v} (por comodidad en la notación, de aquí en adelante se escribirán u y v), tal y como se muestra en la Figura 2.1. Estas ecuaciones son aplicables bajo las siguientes hipótesis:

- La velocidad vertical del fluido es despreciable.
- El gradiente de presión vertical se puede considerar hidrostático.
- El gradiente de presión horizontal es debido al desplazamiento de la superficie de la lámina libre del fluido.

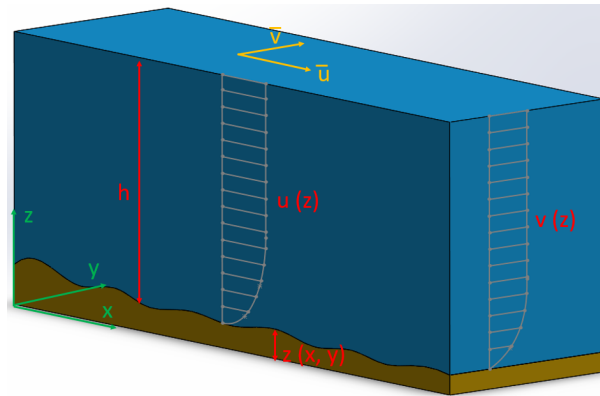


Figura 2.1: Sistema de coordenadas utilizado en las ecuaciones de aguas poco profundas.

Aplicando estas hipótesis, las ecuaciones de las aguas poco profundas para un flujo bidimensional quedan de la siguiente forma:

- *Conservación masa:*

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0 \quad (2.5)$$

donde u y v son las velocidades promediadas (m/s) en z , longitudinal y transversal, respectivamente y $h(m)$ el calado. Si, además, se tienen en cuenta las pérdidas másicas por infiltración y evaporación, en la parte derecha de la ecuación (2.5) se añaden restando f_{inf} , que es el término fuente que modela la infiltración, y f_{evap} que tiene en cuenta la evaporación:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = -(f_{inf} + f_{evap}) \quad (2.6)$$

- *Cantidad de movimiento en dirección x:*

$$\frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial\left(hu^2 + g\frac{h^2}{2}\right)}{\partial x} + \frac{\partial(huv)}{\partial y} = gh(S_{0x} - S_{fx}) \quad (2.7)$$

- *Cantidad de movimiento en dirección y:*

$$\frac{\partial(hv)}{\partial t} + \frac{\partial(huv)}{\partial x} + \frac{\partial\left(hv^2 + g\frac{h^2}{2}\right)}{\partial y} = gh(S_{0y} - S_{fy}) \quad (2.8)$$

donde S_{0x} y S_{0y} representan la pendiente de fricción en las direcciones x e y , respectivamente, y S_{fx} y S_{fy} modelan la fricción sobre el fondo en la dirección x e y .

2.2.2 Modelo difusivo 2D (ZI)

En ocasiones, los términos de aceleración del sistema de ecuaciones SW son de un orden de magnitud muy inferior al resto. En este caso, resulta aceptable simplificar el modelo despreciando todas las aceleraciones menos la de la gravedad en (2.7) y (2.8). A este modelo se le conoce como *modelo difusivo* o *cero inercia* [8, 14], y está formado por las siguientes ecuaciones:

- *Conservación masa:*

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = -(f_{inf} + f_{evap}) \quad (2.9)$$

- *Cantidad de movimiento en dirección x:*

$$\frac{\partial h}{\partial x} = gh(S_{0x} - S_{fx}) \quad (2.10)$$

- *Cantidad de movimiento en dirección y:*

$$\frac{\partial h}{\partial y} = gh(S_{0y} - S_{fy}) \quad (2.11)$$

2.2.3 Comparación entre las ecuaciones de los modelos SW y ZI

Las ecuaciones que conforman los modelos *SW* (2.5, 2.7, 2.8) y *ZI* (2.9, 2.10, 2.11) se pueden reescribir en un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales [7] de la forma:

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{F}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial y} = \vec{S} \quad (2.12)$$

El sistema (2.12) contiene diferentes términos. El primero de ellos, es la derivada local del vector \vec{U} y representa la variación de las variables conservadas respecto al tiempo. Los términos segundo y tercero representan la variación del flujo a lo largo de la dirección x e y respectivamente y, finalmente, el vector \vec{S} recoge los términos fuente. En la Tabla 2.1 se muestra para cada modelo los vectores que conforman este sistema de ecuaciones, donde $q_x = hu$ y $q_y = hv$ son los caudales unitarios en la dirección x e y en $[m^2/s]$, respectivamente.

Modelo SW	Modelo Difusivo
$\vec{U} = (h, q_x, q_y)^T$	$\vec{U} = (h, 0, 0)^T$
$\vec{F} = \left(q_x, \frac{q_x^2}{h} + \frac{1}{2}gh^2, \frac{q_x q_y}{h} \right)^T$	$\vec{F} = (q_x, h, 0)^T$
$\vec{G} = \left(q_y, \frac{q_x q_y}{h}, \frac{q_y^2}{h} + \frac{1}{2}gh^2 \right)^T$	$\vec{G} = (q_y, 0, h)^T$
$\vec{S} = \vec{S}_M + \vec{S}_{PF}$	$\vec{S} = \vec{S}_M + \vec{S}_{PF}$

Tabla 2.1: Vectores de variables que conforman el sistema de ecuaciones del modelo SW y del modelo ZI.

donde

$$\vec{S}_M = (-(f_{inf} + f_{evap}), 0, 0)^T, \quad \vec{S}_{PF} = (0, gh(S_{0x} - S_{fx}), gh(S_{0y} - S_{fy}))^T \quad (2.13)$$

2.3 Formulación de los términos fuente

Los términos fuente permiten modelar los efectos que causan la pendiente del fondo [7], la fricción sobre el mismo, la infiltración y la evaporación.

2.3.1 Infiltración

Para modelar la infiltración se ha utilizado el modelo de Green-Ampt [3, 15], que asume las hipótesis siguientes:

- Para que haya infiltración es necesario que exista un calado h sobre el fondo. Resulta necesario especificar este dato, ya que el modelo superficial de flujo contempla la posibilidad de que las celdas de cálculo se encuentren secas o mojadas.

- Suelo homogéneo con un contenido inicial de humedad θ uniforme en profundidad.
- Frente mojado vertical de avance plano. El frente mojado está determinado por una transición brusca que separa el suelo en dos regiones. La región superior se encuentra totalmente saturada y contiene una cantidad de humedad igual a la porosidad $\theta_s[m^3/m^3]$, mientras que la región inferior solamente contiene la cantidad de humedad inicial del suelo $\theta_i[m^3/m^3]$ (ver Figura 2.2).

Aplicando la Ley de Darcy bajo estas hipótesis [1] se llega a que la tasa de infiltración, $f_{inf}(t)[m/s]$ es de la forma:

$$f_{inf}(t) = K_s \left(1 + \frac{\Psi \Delta \theta}{F_{inf}(t)} \right) \quad (2.14)$$

donde $K_s[m/s]$, es la conductividad hidráulica saturada, $\Psi[m]$, el potencial de succión, y $\Delta \theta[m^3/m^3]$ es la diferencia entre θ_s y θ_i . Estos parámetros son los que caracterizan cada suelo. Mediante la relación entre la tasa de infiltración y la infiltración acumulada, $F_{inf}(t)[m]$:

$$f_{inf}(t) = \frac{dF_{inf}(t)}{dt} \quad (2.15)$$

se puede integrar la ecuación (2.14) con la condición $F_{inf}(t = 0) = 0$, llegando a:

$$K_s t = F_{inf}(t) - \psi \Delta \theta \ln \left[1 + \frac{F_{inf}(t)}{\Psi \Delta \theta} \right] \quad (2.16)$$

La ecuación (2.16) se resuelve para cada instante de tiempo mediante un método iterativo [7] obteniéndose la infiltración acumulada, $F_{inf}(t)[m]$. Sustituyendo esta variable en (2.14) es posible calcular la tasa de infiltración, $f_{inf}(t)[m/s]$, en dicho instante.

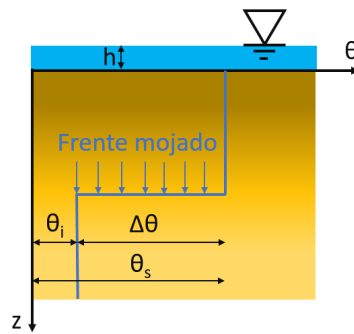


Figura 2.2: Avance del frente mojado según el modelo de Green-Ampt.

2.3.2 Evaporación

La evaporación es un fenómeno complejo que juega un papel importante en los derrames de petróleo. Los experimentos realizados en [10] permiten llegar a la conclusión de que el

porcentaje de masa evaporada de petróleo frente al tiempo para una temperatura constante se puede expresar con una curva de la forma:

$$\%m_{evap}(t, T = cte) = a \ln(t) \quad (2.17)$$

donde a es el coeficiente que ajusta dicha curva a las medidas experimentales. En este trabajo, se ha tomado como punto de partida un estudio presentado en [9] en el que se midió el porcentaje de masa evaporada del petróleo frente al tiempo para una temperatura controlada a 20°C , tal y como se muestra en la parte izquierda de la Figura 2.3. La ecuación (2.17) puede dar lugar a una curva análoga para el calado $h_{evap}(t, T = cte)$ (2.3), obtenida mediante una sencilla transformación:

$$h_{evap}(t, T = cte) = \frac{V_{evap}(t, T = cte)}{A_{mancha}(t)} = \frac{m_{evap}(t, T = cte)/\rho}{A_{mancha}(t)} = \frac{\%m_{evap}(t)m_{total}}{\rho A_{mancha}(t)} \quad (2.18)$$

Una vez transformada la curva de masa evaporada se puede obtener la tasa de evaporación, $f_{evap}(t, T = cte)$, como sigue:

$$f_{evap}(t, T = cte) = \frac{dh_{evap}(t, T = cte)}{dt} \quad (2.19)$$

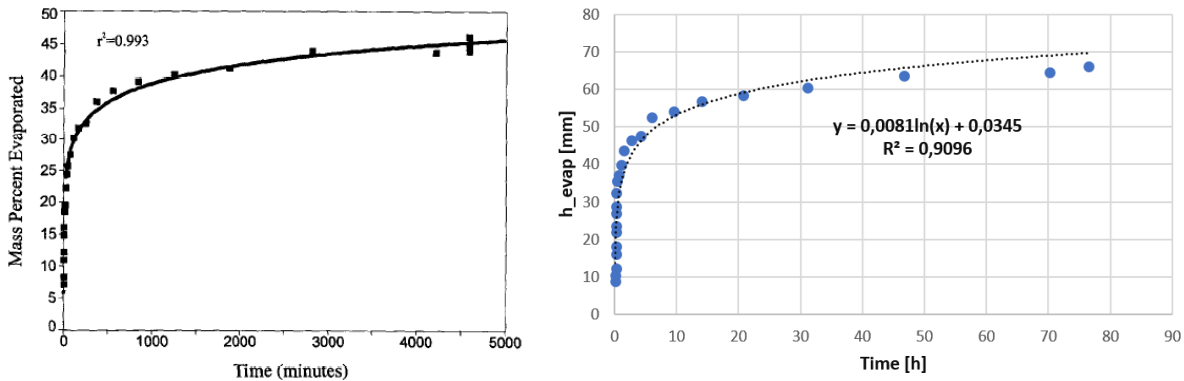


Figura 2.3: Izquierda: Porcentaje de masa evaporada frente al tiempo para una temperatura de 20°C . Derecha: Calado evaporado frente al tiempo para una temperatura de 20°C .

Ajustando con una línea de tendencia logarítmica la altura evaporada frente al tiempo se obtiene la ecuación de la parte derecha de la Figura 2.3. Derivando esta ecuación respecto al tiempo según (2.19), permite obtener la tasa de evaporación en función del tiempo y para $T = 20^{\circ}\text{C}$:

$$f_{evap}(t, T = 20^{\circ}\text{C}) \left[\frac{mm}{h} \right] = 0,0081 \frac{1}{t[h]} \quad (2.20)$$

2.3.3 Variación del fondo

El término fuente correspondiente a la variación del fondo en la dirección x , S_{0x} , y en la dirección y , S_{0y} , contiene las pendientes de fondo

$$S_{0x} = -\frac{\partial z}{\partial x}, \quad S_{0y} = -\frac{\partial z}{\partial y} \quad (2.21)$$

donde z es la elevación del terreno, que es un dato requerido por este tipo de modelos. En situaciones realistas, la pendiente del terreno suele ser el motor principal del movimiento del fluido.

2.3.4 Pendiente de fricción sobre el fondo

El término fuente correspondiente a la pendiente de fricción sobre el fondo en la dirección x , S_{fx} , y en la dirección y , S_{fy} , contiene las pendientes de fricción

$$S_{fx} = \frac{\tau_x}{\rho gh}, \quad S_{fy} = \frac{\tau_y}{\rho gh} \quad (2.22)$$

donde, τ_x y τ_y , son los esfuerzos de fricción sobre el fondo en la dirección x e y , respectivamente, y dependen del modelo de fricción [13].

En este trabajo, se han estudiado y aplicado dos modelos concretos de fricción (viscoso y turbulento):

- *Flujo viscoso:*

$$\tau_x = 3\mu(T)\frac{u}{h} + \tau_{yield_x}\frac{u}{|\vec{u}|}, \quad \tau_y = 3\mu(T)\frac{v}{h} + \tau_{yield_y}\frac{v}{|\vec{u}|} \quad (2.23)$$

donde $\mu(T)$ es la viscosidad dinámica, τ_{yield_x} y τ_{yield_y} son los esfuerzos umbrales (yield stress) en la dirección x e y , respectivamente, y representan el esfuerzo inicial que es necesario vencer para que el fluido comience a ponerse en movimiento y $|\vec{u}|$ representa el módulo de la velocidad.

- *Flujo turbulento:*

$$\tau_x = \rho gh \frac{n_{Man}^2 u \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{\frac{4}{3}}}, \quad \tau_y = \rho gh \frac{n_{Man}^2 v \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{\frac{4}{3}}} \quad (2.24)$$

donde, n_{Man} , es el coeficiente de Manning y modela la rugosidad del terreno.

2.4 Discretización en volúmenes finitos

Para resolver el sistema de ecuaciones (2.12) que modela el problema se recurre al método de los volúmenes finitos. Para introducir un esquema de volúmenes finitos [12], se divide el dominio del problema en celdas computacionales, cuyos parámetros se muestran en la Figura 2.4. Cada celda tiene una superficie, A_i , un número de paredes, N_w , de lado, $l_{w=1,\dots,N_w}$, con un vector normal asociado a cada pared, $\vec{n}_w = (n_x, n_y)$. Considerando para cada una de ellas un volumen de control, Ω , se integra el sistema de ecuaciones como sigue:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} \vec{U} d\Omega + \int_{\Omega} \left(\frac{\partial \vec{F}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial y} \right) d\Omega = \int_{\Omega} \vec{S} d\Omega \quad (2.25)$$

donde

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial \vec{F}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{G}}{\partial y} \right) d\Omega = \oint (\vec{F}n_x + \vec{G}n_y) dl_w \quad (2.26)$$

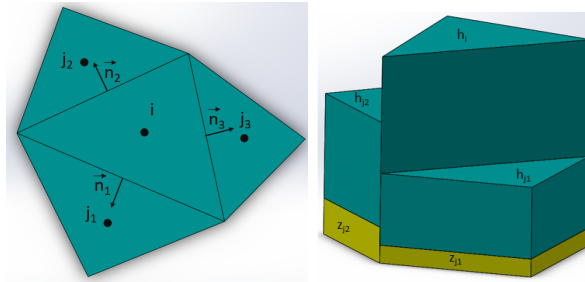


Figura 2.4: Izquierda: Parámetros de una celda de cálculo. Derecha: Elevación y calado asociadas a las celdas de cálculo.

Una vez integrada la ecuación (2.25), asumiendo un primer orden en el espacio y en el tiempo, se obtiene el siguiente esquema numérico explícito [12], en el que todos los términos se discretizan de forma descentrada, a excepción del término másico \vec{S}_{Mw} , que se discretiza de forma centrada.

$$\vec{U}_i^{n+1} = \vec{U}_i^n - \frac{\Delta t}{A_i} l_w \left[\sum_{w=1}^{N_w} \left(\delta(\vec{F}n_x + \vec{G}n_y) - \vec{S}_{PF} \right)_w \right] + \Delta t \vec{S}_{Mw} \quad (2.27)$$

$$\delta(\vec{F}n_x + \vec{G}n_y)_w = \sum_{m=1}^3 (\lambda \alpha \vec{e}_w)^m, \quad \vec{S}_{PFw} = \sum_{m=1}^3 (\beta \vec{e}_w)^m \quad (2.28)$$

donde λ_w representa los valores propios, \vec{e}_w los vectores propios del Jacobiano del sistema y α y β son las coordenadas de los flujos y fuentes en la base de vectores propios. Para más información, el lector puede consultar el Anexo II. La combinación de la ecuación (2.27) con las condiciones de contorno (CC) y condiciones iniciales (CI) adecuadas permite la definición

y resolución de cualquier problema de flujo transitorio en dos dimensiones.

De esta forma es posible calcular para cada celda el valor de las variables conservadas en el instante de tiempo siguiente, \vec{U}_i^{n+1} , como el valor de las variables conservadas en el instante de tiempo anterior, \vec{U}_i^n , menos las contribuciones que tienen lugar a través de las paredes de dicha celda por parte de los flujos (\vec{F} y \vec{G}) y términos fuente (\vec{S}).

Es necesario asegurar que el esquema numérico es estable, para lo cual es necesario calcular el paso de tiempo, ya que si es demasiado grande el esquema numérico se puede volver inestable. El paso de tiempo se calcula multiplicando el CFL por el $\min_{Mesh}(\Delta t_{i,w})$, el cual se calcula para todas las celdas y paredes de la malla. Para esquemas explícitos el CFL nunca es superior a la unidad, siendo habitual CFL=0.45 para malla cuadrada, y CFL=0.9 para malla triangular.

$$\Delta t = \text{CFL} \min_{Mesh}(\Delta t_{i,w}) \quad (2.29)$$

$$\Delta t_{i,w} = \frac{\min(\Delta x'_i, \Delta x'_j)}{\max_{m=1,2,3}(|\tilde{\lambda}_w^m|)}, \quad \Delta x'_i = \frac{S_i}{\max_{1,N_w}(l_w)} \quad (2.30)$$

En ocasiones la condición del CFL conduce a pasos de tiempo muy pequeños y eso puede hacer que el tiempo de cálculo de algunas simulaciones sea muy elevado. Para solucionar esto, existen diferentes estrategias como son la paralelización del código o la implementación en GPU.

3 Validación con soluciones exactas

Para validar la herramienta de simulación se han realizado una serie de casos test sobre un fondo plano impermeable sin considerar el fenómeno de evaporación, en los que se han comparado los resultados numéricos con las soluciones analíticas unidireccionales que se recogen en el Anexo I. Se han estudiado dos tipos de flujos, el axial, caracterizado por la evolución del mismo en una dirección predominante, y el radial, donde el flujo evoluciona de forma predominante a lo largo de todo el plano XY.

Se consideran dos tipos de derrame diferentes, que se diferencian en la forma de liberar el volumen del fluido disponible; y dos tipos de esfuerzo de fricción, turbulento y viscoso, que se calibran en cada caso con su parámetro característico. El esfuerzo de fricción sobre el fondo, τ , que contemplan las soluciones analíticas es de la forma:

$$\tau = m \left| \frac{\partial u}{\partial z} \right|^{n-1} \frac{\partial u}{\partial z} \quad (3.1)$$

donde m , es el índice de consistencia y n el índice de comportamiento del fluido. Cuando $n = 1$ se tiene fluido Newtoniano y m es igual a μ , cuando $n < 1$ se modelan fluidos pseudoplásticos, y si $n > 1$ se modelan fluidos dilatantes. En la Figura A.1 se muestran los diferentes tipos de comportamiento de un fluido, donde se representa el esfuerzo de fricción frente a la velocidad de deformación.

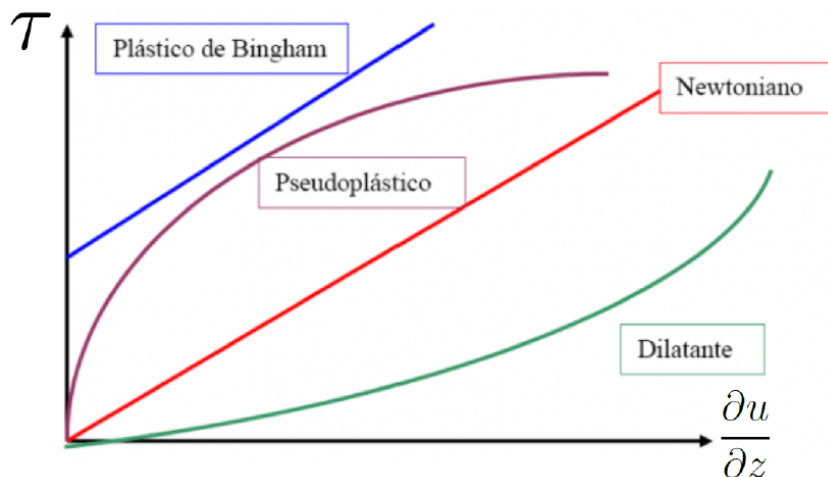


Figura 3.1: Tipos de comportamiento reológico del fluido

3.1 Casos flujo axial

El volumen derramado por unidad de anchura, $V(t)[L^3/L]$, para cualquier instante es proporcional al tiempo elevado al exponente α , siendo q una constante de dimensiones $[L^2/T^\alpha]$. Si $\alpha = 0$, se modela un derramamiento de un volumen constante; y si éste es diferente de cero ($\alpha \neq 0$), entonces ese mismo volumen es liberado de forma proporcional al tiempo elevado al exponente α . Es de la forma:

$$V(t) = \int_0^{x_N(t)} h(x, t) dx = qt^\alpha \quad (3.2)$$

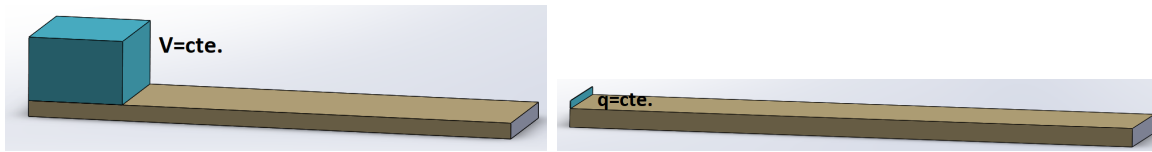


Figura 3.2: Flujo axial. Izquierda: Condición inicial de un volumen constante. Derecha: Condición inicial de un caudal constante.

La solución analítica para flujo axial del calado en función del tiempo y del alcance del derrame, $h(x, t)$, es:

$$h(x, t) = \eta_N^{\frac{n+1}{n+2}} \left[\left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left(\frac{m}{\rho g} \right) q^{n+1} \right]^{\frac{1}{2n+3}} t^{\frac{\alpha(n+1)-n}{2n+3}} \phi \left(\frac{\eta}{\eta_N} \right) \quad (3.3)$$

donde

$$\eta = \left[\left(\frac{2n+1}{n} \right)^n \left(\frac{\rho g}{m} \right) q^{n+2} \right]^{\frac{-1}{2n+3}} xt^{-\frac{\alpha(n+2)+n}{2n+3}} \quad (3.4)$$

3.1.1 Casos test con aceite

Con el fin de validar la herramienta para flujo axial se van a simular los casos de la Tabla 3.1, que contemplan los dos tipos de derrames diferentes y dos tipos de esfuerzos de fricción sobre el fondo. Cada caso se va a resolver tanto con malla cuadrada (MC), como con malla triangular Delaunay (TD). En la Tabla 3.2 se muestra el tamaño del dominio en función del tipo de derrame simulado.

Caso	Tipo derrame	Tipo esfuerzo fricción
1	Volumen constante	Turbulento ($n_{Man} = 0,003sm^{1/3}$)
2	Volumen constante	Viscoso ($\tau_{yield} = 1Pa \cdot s$)
3	Caudal constante	Turbulento ($n_{Man} = 0,0042sm^{1/3}$)
4	Caudal constante	Viscoso ($\tau_{yield} = 0,2Pa \cdot s$)

Tabla 3.1: Casos realizados para la validación del flujo axial.

Tipo derrame	Longitud [m]	Anchura [m]
Volumen constante	650	1
Caudal constante	150	1

Tabla 3.2: Tamaño del dominio en función del tipo de derrame.

Las condiciones iniciales (CI) y condiciones de contorno (CC) impuestas según el tipo de derrame se recogen en la Tabla 3.3. El aceite empleado tiene una densidad $\rho = 790\text{kg}/\text{m}^3$ y una viscosidad $\mu = 0,00476$ a la temperatura de trabajo [11]. Para el caso de volumen constante, se considerará un volumen inicial almacenado de $65\text{m}^3/\text{m}$ mientras que para el caso de entrada con caudal constante, se impondrá un caudal unitario $q = 0,10833\text{m}^3/\text{m}\cdot\text{s}$

Tipo de derrame	CI	CC
Volumen cte.	Para $t=0$: En $x \leq 30\text{m} \rightarrow h=2.166\text{m}$	Pared sólida todas las fronteras del dominio
Caudal cte.	Para $t=0$: h de toda las celdas es 0	Pared sólida todas las fronteras del dominio

Tabla 3.3: Condiciones iniciales y condiciones de contorno impuestas según tipo de derrame.

En la Figura 3.3 se presentan los calados de los casos 1 y 2 para un instante de tiempo, $t = 100\text{s}$, y se observa como aunque la solución numérica del modelo SW con MC y TD es muy similar, el alcance con el modelo SW utilizando TD sale idéntico al de la solución analítica. Tras calibrar el modelo de fricción turbulento se ha tomado un coeficiente de Manning, $n_{Man} = 0,003\text{sm}^{1/3}$, y para el modelo de fricción viscoso se ha tomado un esfuerzo umbral, $\tau_{yield} = 1\text{Pa}\cdot\text{s}$. El calado con el modelo de fricción viscoso se aproxima mejor a la solución analítica.

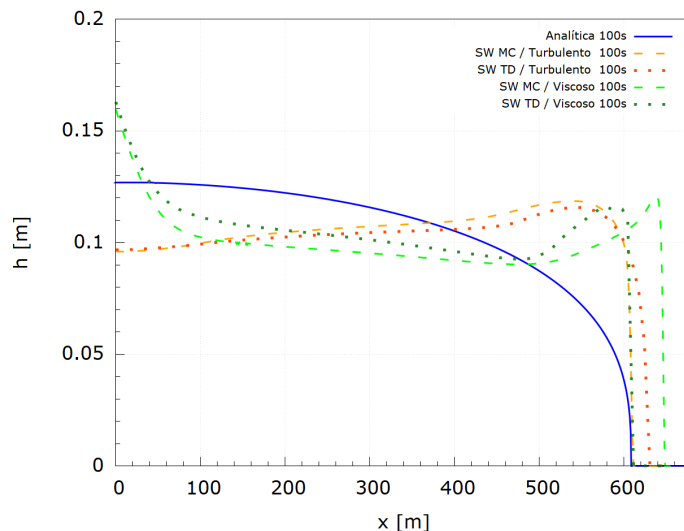


Figura 3.3: Calado de los casos 1 y 2 para el instante de tiempo, $t=100\text{s}$.

Los resultados de los casos 3 y 4 correspondientes al tipo de derrame a volumen constante se muestran en la Figura 3.4 para los instantes de tiempo, $t = 10\text{s}$, $t = 50\text{s}$ y $t = 100\text{s}$. El coeficiente de Manning utilizado para el modelo turbulento es 0.0042, y para el modelo

viscoso el $\tau_{yield} = 0,2Pa \cdot s$. El calado proporcionado por el modelo SW con MC y con TD es parecido, pero el modelo con TD se acerca en mayor medida a la solución analítica.

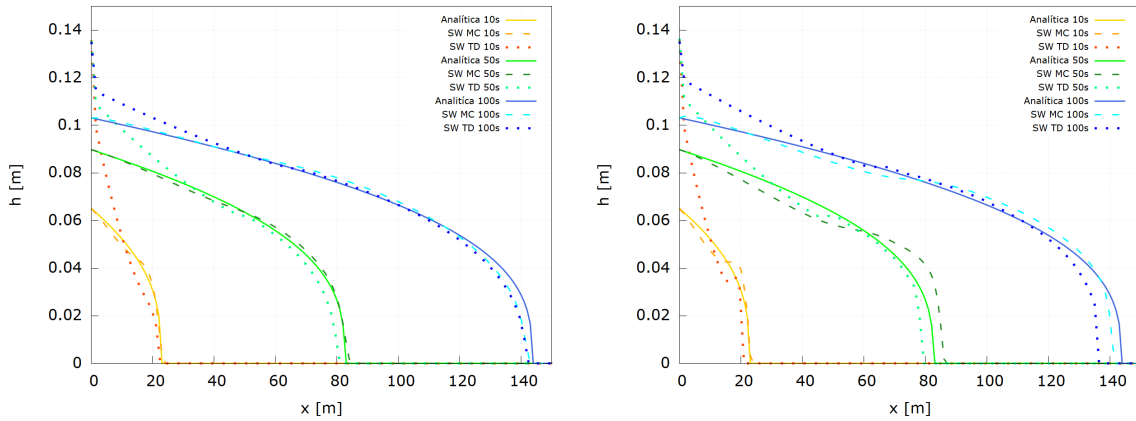


Figura 3.4: Calado de los casos 3 y 4 para diferentes instantes de tiempo. Izquierda: esfuerzo de fricción turbulento sobre el fondo . Derecha: esfuerzo de fricción viscoso sobre el fondo .

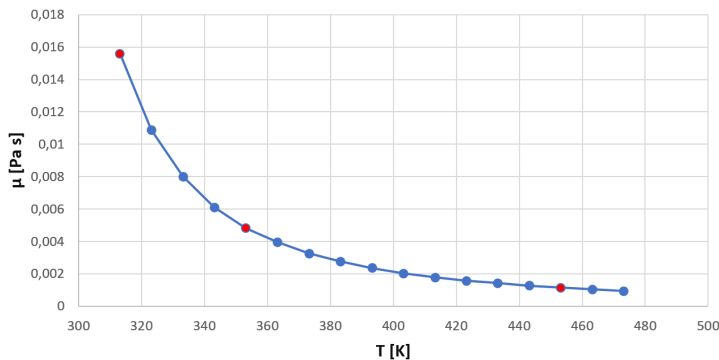
A la vista de los resultados mostrados tiene sentido calcular el número de Reynolds para ver en que tipo de régimen se encuentra el flujo. El cálculo se muestra a continuación:

$$Re = \frac{\rho u h}{\mu} = \frac{\rho q}{\mu} = \frac{790 \cdot 0,1083}{0,00476} \approx 18000 \quad (3.5)$$

Ante el resultado del cálculo del número de Reynolds se puede decir que el flujo se encuentra en régimen turbulento, lo cual justifica que con el esfuerzo de fricción turbulento sobre el fondo las soluciones analíticas concuerden con las numéricas.

3.1.2 Influencia de la temperatura sobre la viscosidad del petróleo

La viscosidad de los fluidos cambia con la temperatura, es un hecho que hay que tener en cuenta a la hora de realizar simulaciones cuando la temperatura no sea constante. En la parte izquierda de la Figura 3.5 se muestra la curva de variación de la viscosidad del petróleo con la temperatura para un rango amplio [2]. Los puntos marcados en color rojo se corresponden con los valores de la tabla de la parte derecha de la Figura 3.5. La densidad del petróleo se considera constante con la temperatura de forma que $\rho = 900,3 \text{ kg}/m^3$.



T [K]	T [°C]	$\mu(T)[Pa \cdot s]$
313.15	40	0,0156
353.15	80	0,0048
453.15	180	0,0012

Figura 3.5: Izquierda: Variación de la viscosidad del petróleo con la temperatura. Derecha: Valores de la viscosidad del petróleo para algunas temperaturas.

Se va a simular un derrame a caudal constante con un caudal por unidad de anchura de $q = 0,1083 \text{ m}^3/\text{ms}$ para $(0 < t < 600\text{s})$. La extensión del dominio es de 300 m de longitud por 1 m de anchura, y se ha utilizado una malla cuadrada. Para los tres valores de temperatura de la tabla de parte derecha de la Figura 3.5 se ha calculado la solución analítica para el instante $t=100 \text{ s}$ (ver Figura 3.6). En la Figura 3.6 donde se representan estas soluciones analíticas se observa como si aumenta la temperatura la viscosidad disminuye, y el alcance del derrame es mayor y el calado menor. De este hecho se deduce que la variación de temperatura debe ser tomada en cuenta ya que la extensión del derrame se ve afectada significativamente.

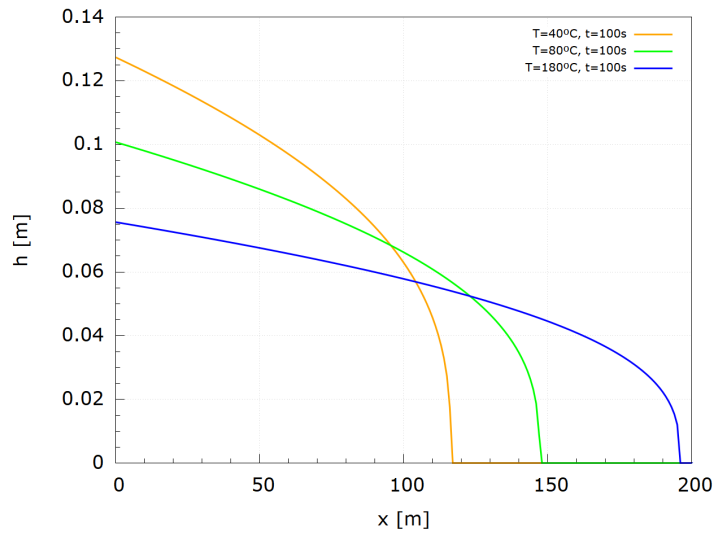


Figura 3.6: Solución analítica con derrame a caudal constante en el instante $t=100\text{s}$ para diferentes temperaturas.

Una vez comprobado este hecho se va a simular con el modelo SW el derrame a caudal constante de las soluciones analíticas de la figura 3.6 sobre el mismo dominio para una temperatura de $T = 40^\circ\text{C}$, con el esfuerzo de fricción turbulento y viscoso sobre el fondo. Como condiciones de contorno, se considerará que todas las paredes del dominio están cerradas. Tras calibrar los valores de los parámetros utilizados que caracterizan cada tipo de esfuerzo de fricción sobre el fondo, se obtienen los resultados de la Figura 3.7, donde se puede ver como ambos tipos de esfuerzo de fricción sobre el fondo se aproximan a la solución analítica para todos los instantes de tiempo.

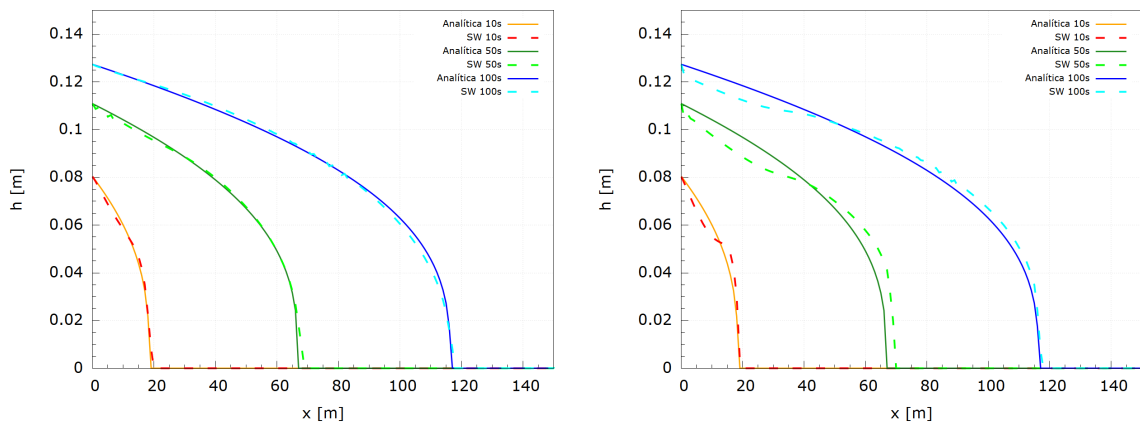


Figura 3.7: Derrame a caudal constante para $T = 40^\circ\text{C}$. Izquierda: esfuerzo de fricción turbulento sobre el fondo ($n_{Man} = 0,007 \text{ sm}^{1/3}$). Derecha: esfuerzo de fricción viscoso sobre el fondo ($\tau_{yield} = 0,2 \text{ Pa} \cdot \text{s}$).

A la vista de los resultados mostrados tiene sentido calcular el número de Reynolds para ver en que tipo de régimen se encuentra el flujo. Dicho cálculo se muestra a continuación:

$$Re = \frac{\rho u h}{\mu} = \frac{\rho q}{\mu} = \frac{900,3 \cdot 0,1083}{0,0156} \approx 6250 \quad (3.6)$$

Ante el resultado del cálculo del número de Reynolds se puede decir que el flujo se encuentra más próximo al régimen laminar que al turbulento. Esto se explica atendiendo al valor de la viscosidad del petróleo, la cual es bastante superior a la del aceite que se ha simulado anteriormente.

Se ha comprobado cómo si cambia la temperatura, la solución analítica se modifica de forma notable, pero una vez calibrado un tipo de esfuerzo de fricción sobre el fondo para una temperatura dada, surge la idea de comprobar si con ese parámetro característico de un tipo de esfuerzo de fricción determinado, la solución numérica del modelo SW puede aproximar la solución analítica para otra temperatura diferente, evitando así tener que volver a calibrar el parámetro característico del tipo de esfuerzo de fricción.

En la Figura 3.8 se muestran los resultados de la simulación del derrame a caudal constante a $80^{\circ}C$ para ambos tipos de esfuerzo de fricción sobre el fondo, cada uno con el parámetro que lo caracteriza calibrado en el caso anterior para $40^{\circ}C$. Una conclusión muy importante que se observa es cómo es necesario recalibrar el esfuerzo turbulento ya que difiere mucho de la solución analítica para $80^{\circ}C$, mientras que con el esfuerzo de fricción viscoso la solución numérica se corresponde con la analítica con el mismo valor de esfuerzo umbral, a pesar de que la temperatura haya cambiado.

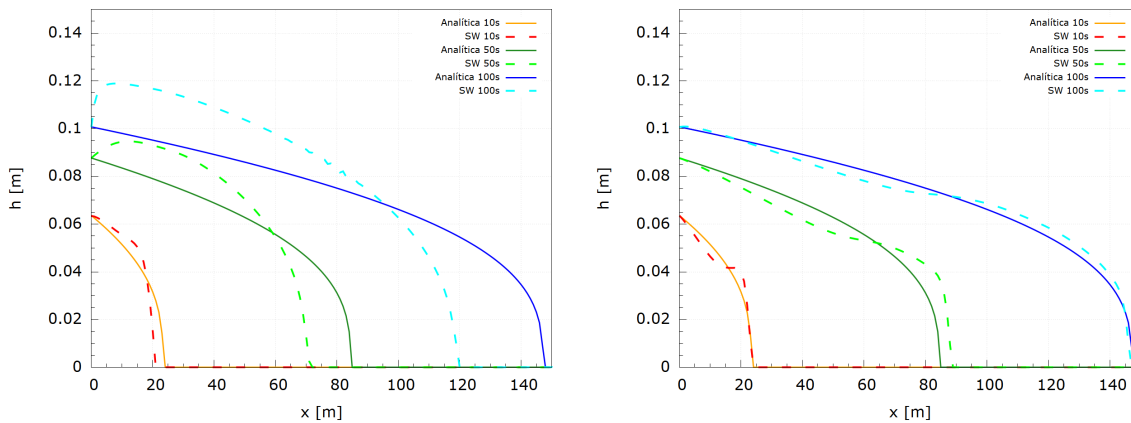


Figura 3.8: Derrame a caudal constante para $T = 80^{\circ}C$. Izquierda: esfuerzo de fricción turbulento sobre el fondo ($n_{Man} = 0,007sm^{1/3}$). Derecha: esfuerzo de fricción viscoso sobre el fondo ($\tau_{yield} = 0,2Pa \cdot s$).

3.1.3 Comparación entre el modelo SW y el modelo ZI

El modelo ZI simplifica todos los términos de aceleración convectivos menos la aceleración de la gravedad del mismo modo que se hace en las ecuaciones de partida con las que se llegan a obtener las soluciones analíticas, por lo que resulta interesante realizar una comparación entre las soluciones numéricas del modelo SW y el ZI con las soluciones analíticas. Por este

motivo se va a simular para flujo axial el derrame de petróleo a caudal constante de la Tabla 3.4 con el esfuerzo de fricción sobre el fondo turbulento y viscoso con ambos modelos. La CI impuesta es que para el instante de tiempo inicial $t = 0$ el calado de todo dominio es 0, y la CC es que todas las paredes del dominio se comportan como pared sólida.

Propiedades petróleo	Tipo derrame
$\rho(T = 20^{\circ}C) = 900,3 \text{ kg/m}^3$	Caudal constante ($0s < t < 600s$):
$\mu(T = 20^{\circ}C) = 0,0249 \text{ Pa} \cdot s$	$q = 0,10833 \text{ m}^3/ms$

Tabla 3.4: Propiedades del petróleo y configuración del derrame con el modelo SW y el ZI.

El parámetro característico para cada tipo de esfuerzo de fricción sobre el fondo calibrado para cada modelo se recoge en la Tabla 3.5, y los resultados de las simulaciones se recogen en la Figura 3.9. Como se puede observar ambos modelos matemáticos proporcionan una solución muy parecida a la analítica independientemente del tipo de esfuerzo de fricción sobre el fondo utilizado para todos los instantes de tiempo. El coeficiente de Manning con ambos modelos matemáticos es muy similar, mientras que el esfuerzo umbral del ZI es mucho menor al del modelo SW, debido a que en el ZI se han despreciado todas las aceleraciones menos la de la gravedad.

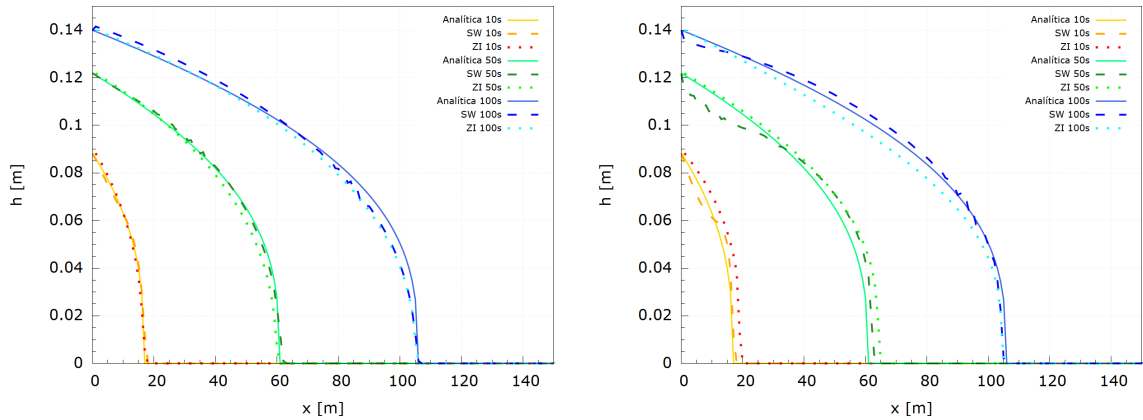


Figura 3.9: Derrame a caudal constante para $T = 20^{\circ}C$. Izquierda: esfuerzo de fricción turbulento sobre el fondo. Derecha: esfuerzo de fricción viscoso sobre el fondo.

	SW	ZI
Manning (n_{Man})	$0.009 \text{ sm}^{1/3}$	$0.008 \text{ sm}^{1/3}$
Viscoso (τ_{yield})	0.28 Pa	0.003 Pa

Tabla 3.5: Valor del parámetro característico de cada tipo de esfuerzo de fricción sobre el fondo para el modelo SW y el ZI.

3.2 Casos flujo radial

La solución analítica del radio de alcance del derrame en función del tiempo, $r_N(t)$ para flujo radial es de la forma de:

$$r_N(t) = \xi_N \left[\left(\frac{n}{2n+1} \right)^n \left(\frac{\rho g}{m} \right) Q^{n+2} \right]^{\frac{1}{3n+5}} t^{\frac{\alpha(n+2)+n}{3n+5}} \quad (3.7)$$

y para el calado de la forma de:

$$h(r, t) = \xi_N^{\frac{n+1}{n+2}} \left[\left(\frac{2n+1}{n} \right)^{2n} \left(\frac{\rho g}{m} \right)^{-2} Q^{n+1} \right]^{\frac{1}{3n+5}} t^{\frac{\alpha(n+1)-2n}{3n+5}} \psi \left(\frac{\xi}{\xi_N} \right) \quad (3.8)$$

donde

$$\xi = \left[\left(\frac{n}{2n+1} \right)^n \left(\frac{\rho g}{m} \right) Q^{n+2} \right]^{\frac{-1}{3n+5}} r t^{-\frac{\alpha(n+2)+n}{3n+5}} \quad (3.9)$$

El volumen derramado [L^3] en cualquier instante, $V(t)$, es proporcional al tiempo elevado al exponente α , de forma que Q es una constante de dimensiones [L^3/T^α]. Si es $\alpha = 0$ se modela un derramamiento de un volumen constante; y si es diferente de cero ($\alpha \neq 0$) ese mismo volumen se libera de forma proporcional al tiempo elevado al exponente α ($V \propto Qt^\alpha$), mediante un caudal constante (ver Figura 3.10).

$$V(t) = 2\pi \int_0^{r_N(t)} r h(r, t) dr = Qt^\alpha \quad (3.10)$$

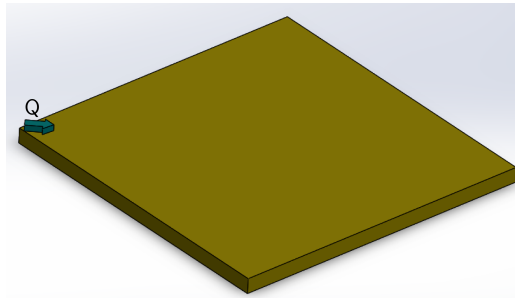


Figura 3.10: Entrada de caudal a través de una esquina del dominio.

Se va a simular con el modelo SW una fuga de petróleo, con dos tipos de esfuerzos de fricción sobre el fondo, turbulento y viscoso. El petróleo considerado [2] tiene una densidad $\rho = 900 \text{ kg/m}^3$ y una viscosidad $\mu = 0,05 \text{ Pa s}$. Los valores de ambas magnitudes se corresponden con una temperatura de 20°C .

Se considera un dominio cuadrado de $1000 \text{ m} \times 1000 \text{ m}$ con fondo plano ($z = 0 \text{ m}$). Como CI se tomará un calado nulo ($h = 0$) en todas las celdas del dominio. Todos los contornos se considerarán cerrados a excepción de la esquina inferior izquierda, donde se impondrá una

condición de contorno de caudal de entrada formando 45 grados con el eje x , de $20 \text{ m}^3/\text{s}$ para $(0 < t < 2400 \text{ s})$.

Se han utilizado dos mallas de cálculo diferentes, una cuadrada y otra triangular Delaunay. En la Figura 3.11 se representa un detalle de la esquina superior izquierda del dominio con las dos mallas de cálculo utilizadas. Este detalle tiene unas dimensiones en el dominio de $100\text{m} \times 100\text{m}$, lo que da una idea de la gran cantidad de celdas involucradas en el proceso de cálculo del caso. La malla cuadrada está conformada por 80000 elementos, mientras que la triangular Delaunay tiene 81853 elementos.

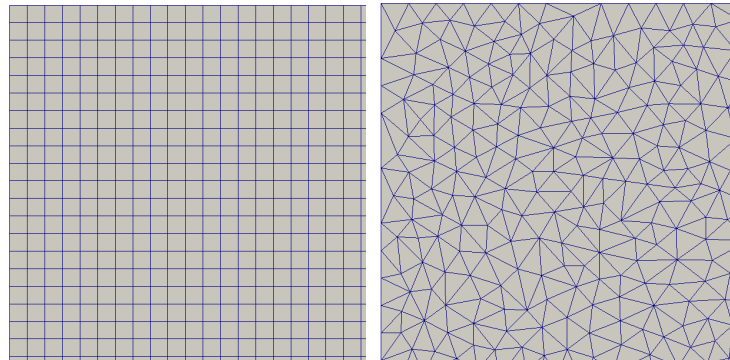
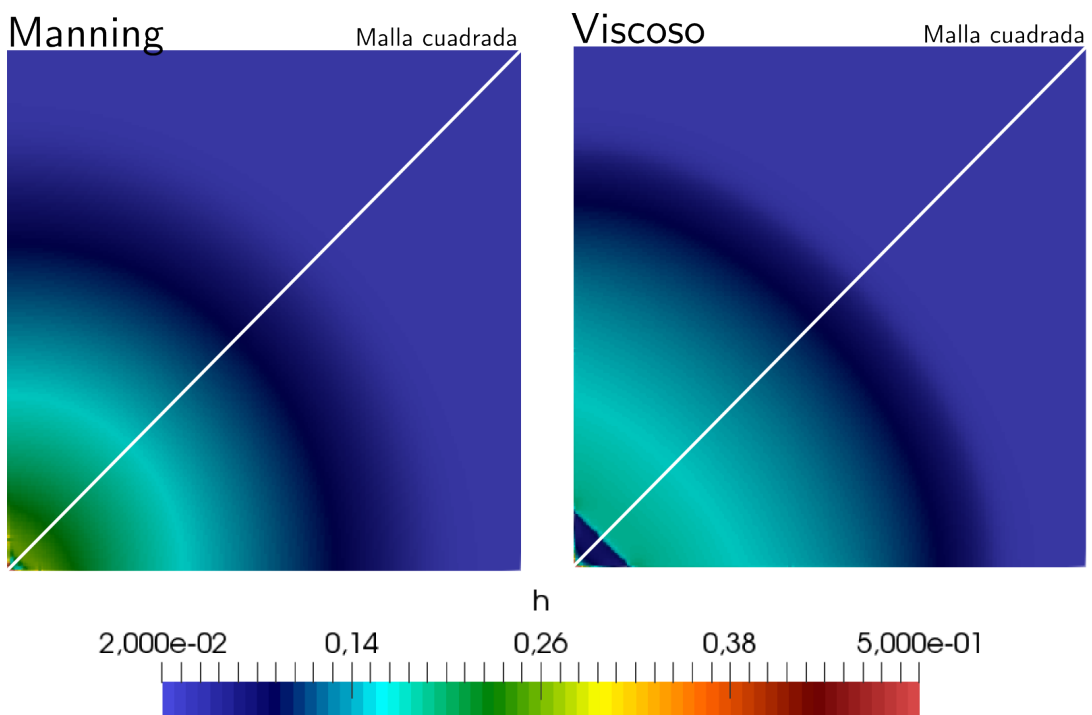


Figura 3.11: Izquierda: Malla cuadrada (MC). Derecha: Malla triangular Delaunay (TD).

En las Figuras 3.12 y 3.13 se presentan los resultados numéricos obtenidos para el calado en el instante $t = 2400\text{s}$ empleando una malla cuadrada y una triangular, respectivamente. También se muestra un perfil longitudinal de la solución proporcionada por ambos modelos en el que se puede ver la gran similitud tanto en la forma de la curva como en el alcance de la mancha.



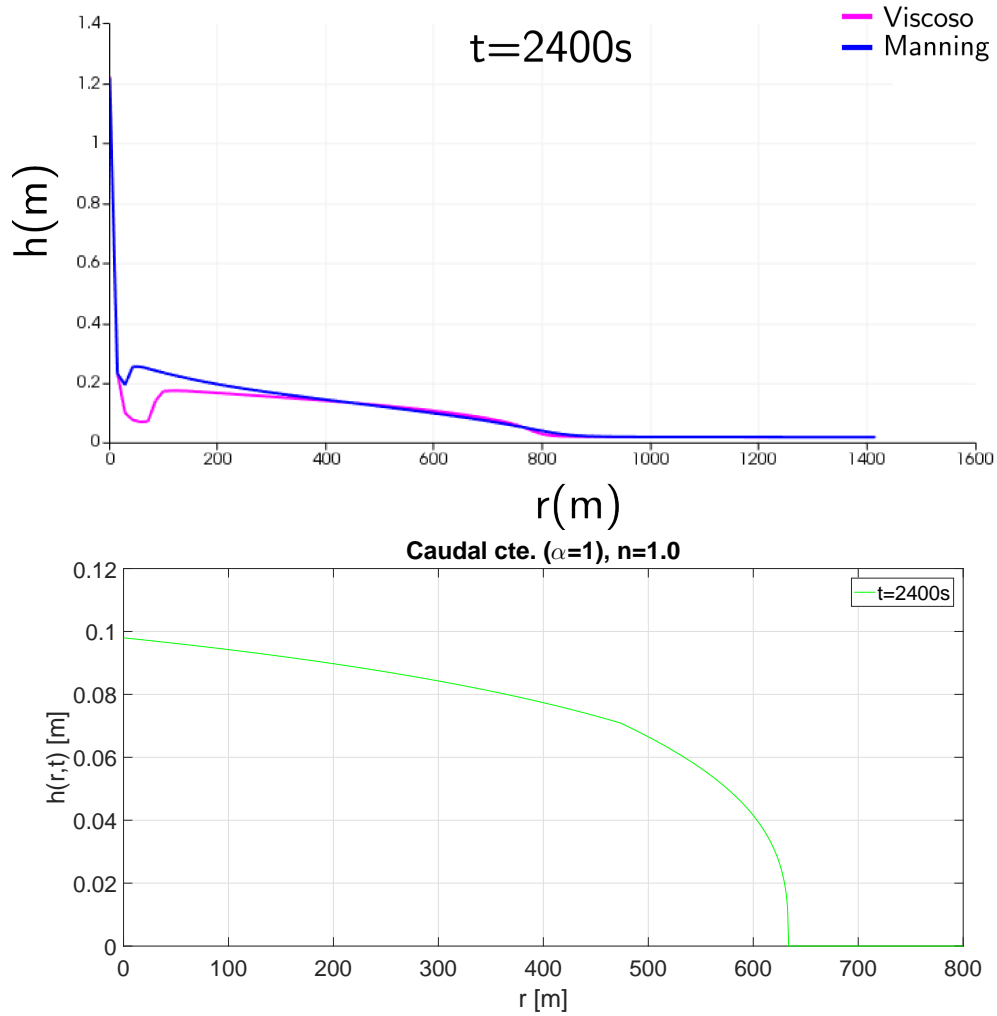
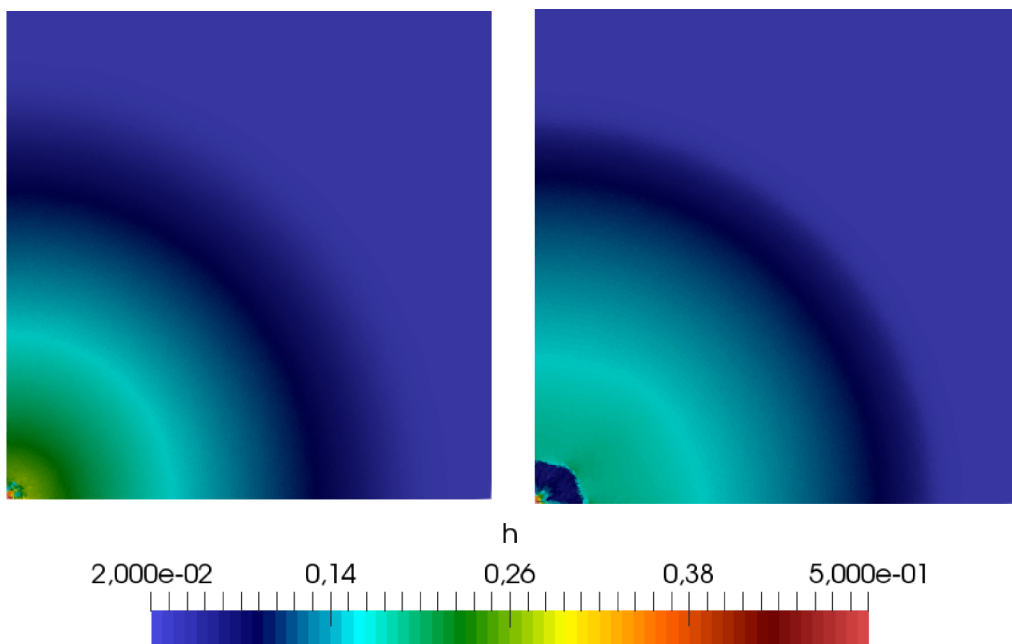


Figura 3.12: Arriba: Calado h [m] para los dos modelos de fricción en el instante $t = 2400s$ con malla cuadrada. Centro: Perfil longitudinal de la solución proporcionada por ambos modelos. Abajo: Solución analítica.



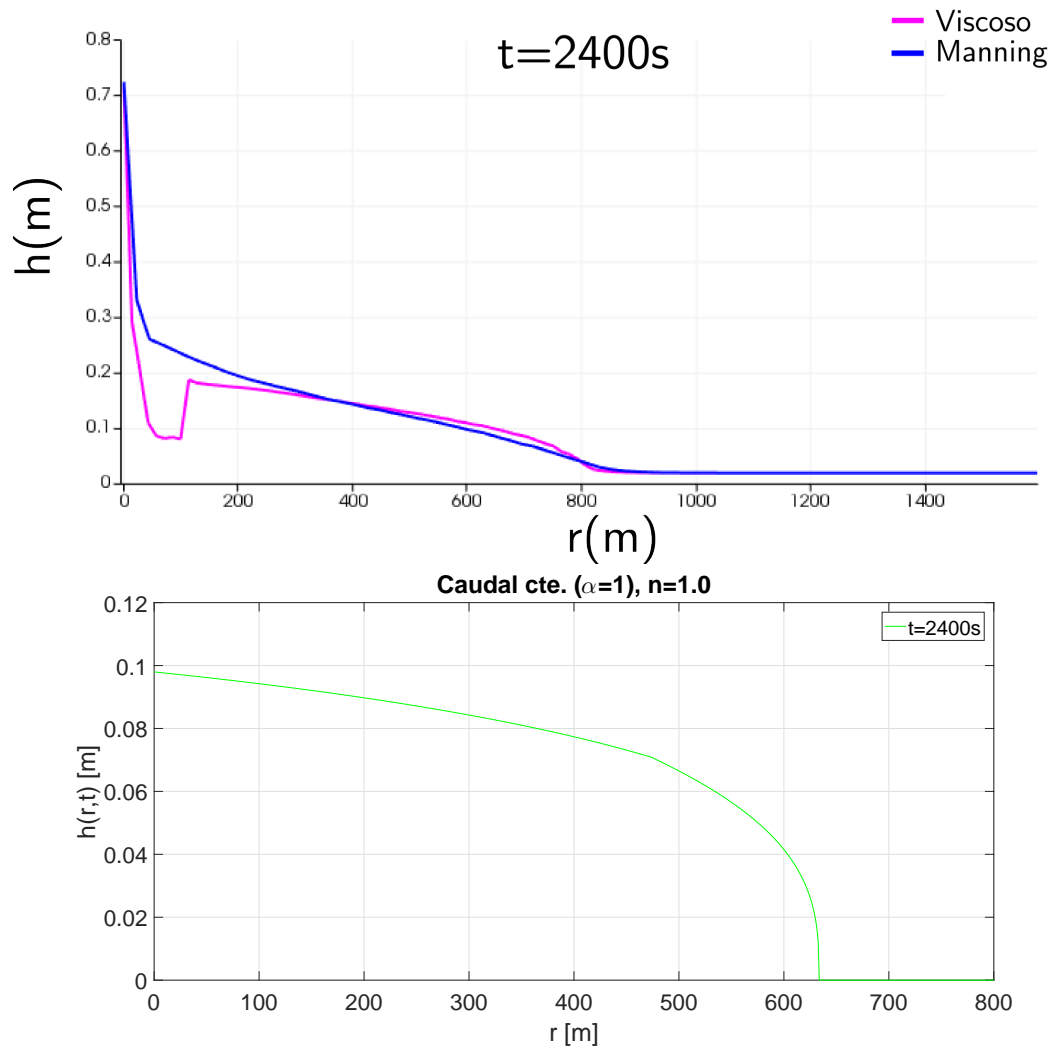


Figura 3.13: Arriba: Calado h [m] para los dos modelos de fricción en el instante $t = 2400s$ con malla triangular. Centro: Perfil longitudinal de la solución proporcionada por ambos modelos. Abajo: Solución analítica.

4 Caso real: Marshall (Michigan, USA)

En este capítulo se muestra la simulación de un caso real en el que tuvo lugar una rotura puntual en un oleoducto a la altura de la localidad de Marshall (Michigan, USA). La Figura 4.1 muestra la situación geográfica del oleoducto y del punto de rotura, así como una imagen aérea del terreno. Se observan también la presencia de un río (Kalamazoo river) y un afluente (Talmadge creek) que son susceptibles de verse afectados por una fuga de petróleo. La Figura 4.2 muestra el hidrograma de petróleo observado en el punto de fuga. El petróleo considerado [2] tiene una densidad $\rho = 900,3 kg/m^3$ y una viscosidad $\mu = 0,0249 Pa \cdot s$. Los valores de ambas magnitudes se corresponden con una temperatura de $20^\circ C$.



Figura 4.1: Izquierda: Situación del punto de rotura del oleoducto. Derecha: Vista real ampliada del punto de rotura.

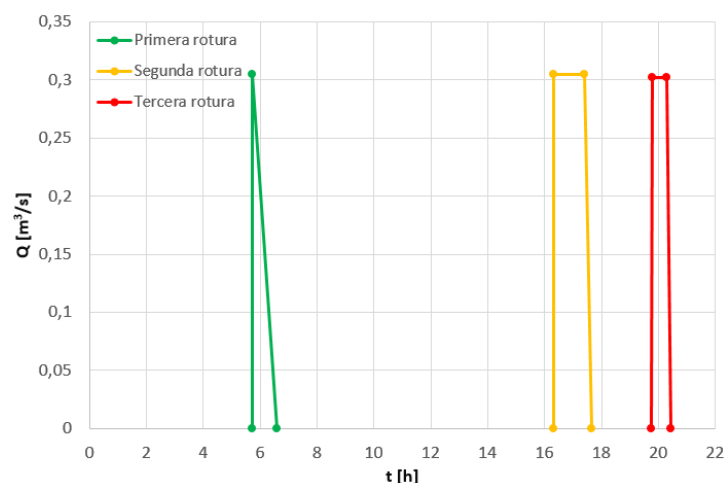


Figura 4.2: Hidrograma de las roturas producidas en la línea.

La información topográfica disponible corresponde a un Modelo Digital de Terreno (MDT o raster) en el que figuran los valores de altitud con una resolución $3m \times 3m$. En la Figura

4.3 se muestra la representación gráfica del MDT junto con la extensión final observada de la mancha de petróleo (negro) y el punto correspondiente a la rotura (amarillo).

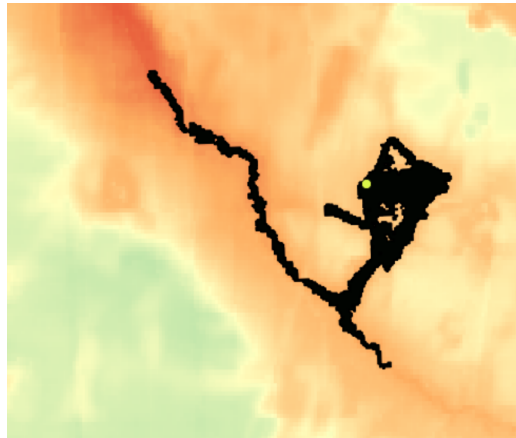


Figura 4.3: Representación gráfica del MDT junto con la extensión final de la mancha de petróleo (negro) y el punto de rotura (amarillo).

Se ha recortado un dominio de 148470 m^2 ($14,847 \text{ Ha}$) eliminando las regiones que previsiblemente no se van a ver alcanzadas por el fluido. Teniendo en cuenta que la resolución del MDT es el valor limitante en el tamaño de celda, se ha generado una malla de cálculo de celdas triangulares localmente refinada en las zonas de mayor interés [4] como, por ejemplo, los puntos cercanos a la rotura o el cauce del río. Como resultado, se ha obtenido una malla de 14540 celdas con áreas comprendidas entre 5 m^2 y 15 m^2 (ver Figura 4.4). El proceso completo de generación de una malla de cálculo a partir de un MDT se explica en detalle en los anexos IV y V.

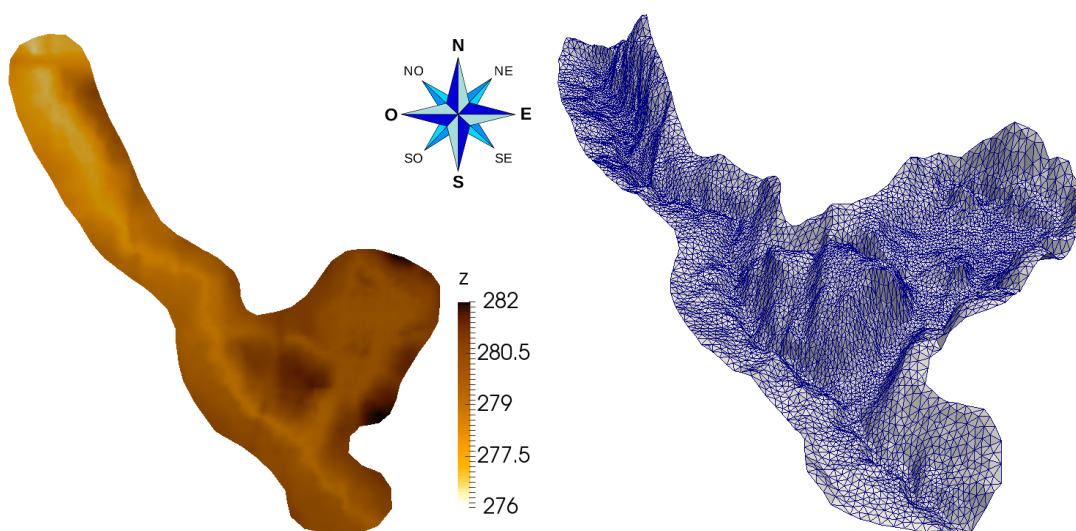


Figura 4.4: Izquierda: Mapa de elevaciones del terreno. Derecha: Representación tridimensional de la topografía y de la malla de cálculo.

4.1 Simulaciones realizadas y análisis de resultados

En este apartado se presentan los resultados numéricos de las simulaciones realizadas. En todas ellas se tomará como condición inicial un calado nulo ($h = 0$) en todas las celdas del dominio. Todos los contornos se considerarán cerrados a excepción de la sección final del cauce, donde se impondrá una condición de salida libre.

La simulación se plantea en dos fases diferentes. Primero, se realizará una simulación en la que no se tendrán en cuenta los fenómenos de infiltración y evaporación. El propósito es el de calibrar el valor del esfuerzo umbral (τ_{yield}), ya que es el único parámetro del modelo viscoso que no está caracterizado por la información de partida. Para dicha calibración, se tratará de ajustar el valor del área de la mancha simulada al de la mancha observada (Figura 4.3), estimando el error de la siguiente forma:

$$E[\%] = \frac{A_{mancha} - A_{real}}{A_{real}} \cdot 100 \quad (4.1)$$

donde A_{mancha} es el área de la mancha numérica y $A_{real} = 25348,3m^2$ es el área de la mancha observada.

El resultado de la calibración ha proporcionado un valor de $\tau_{yield} = 0,005Pa$ con un error del 4,93% en el área de la mancha. Este valor de $\tau_{yield} = 0,005Pa$ concuerda con los recogidos en la literatura especializada [16].

Una vez calibrado el valor del esfuerzo umbral, se añaden los procesos de infiltración y evaporación al modelo de cálculo. Siguiendo el mismo procedimiento que para el esfuerzo umbral, se calibran los tres parámetros del modelo de infiltración de Green-Ampt (Tabla 4.1) con un valor del error en el área de la mancha del 0,02%.

K_S [m/s]	Ψ [m]	$\Delta\theta$ [m ³ /m ³]
$2,1 \cdot 10^{-8}$	0,02	0,2

Tabla 4.1: Valor de los parámetros obtenidos para el modelo de infiltración de Green-Ampt.

La Figura 4.5 muestra los valores de calado sobre el terreno para los tiempos de simulación $t = 8h, 18h, 22h$ y $30h$. Se observa que el petróleo procedente de la fuga fluye principalmente por un cauce seco próximo al oleoducto. El valor máximo de calado que se observa es de $0,45.m$. Comparando los resultados numéricos con la mancha real (Figura 4.3), se observa una gran similitud tanto las zonas afectadas como en el alcance.

A continuación, se presenta la infiltración acumulada F_{inf} (Figura 4.6, derecha) y la tasa de infiltración f_{inf} (Figura 4.6, izquierda) para diferentes instantes de tiempo. Se observa como la tasa de infiltración se reduce con el tiempo, tal y como predice el modelo teórico de Green-Ampt.

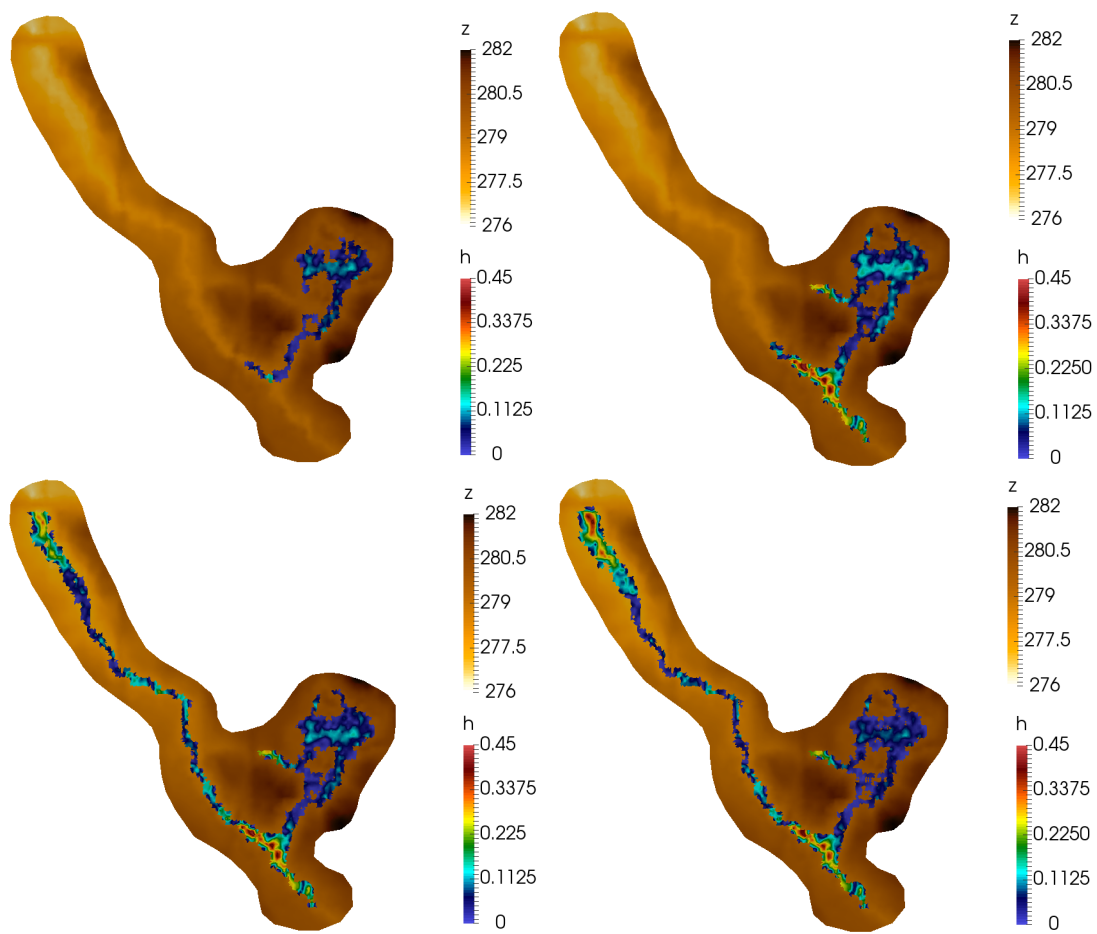


Figura 4.5: Resultados numéricos de calado, $h[m]$, para diferentes instantes de tiempo. De arriba a abajo y de derecha a izquierda: $t = 8h, 18h, 22h$ y $30h$.

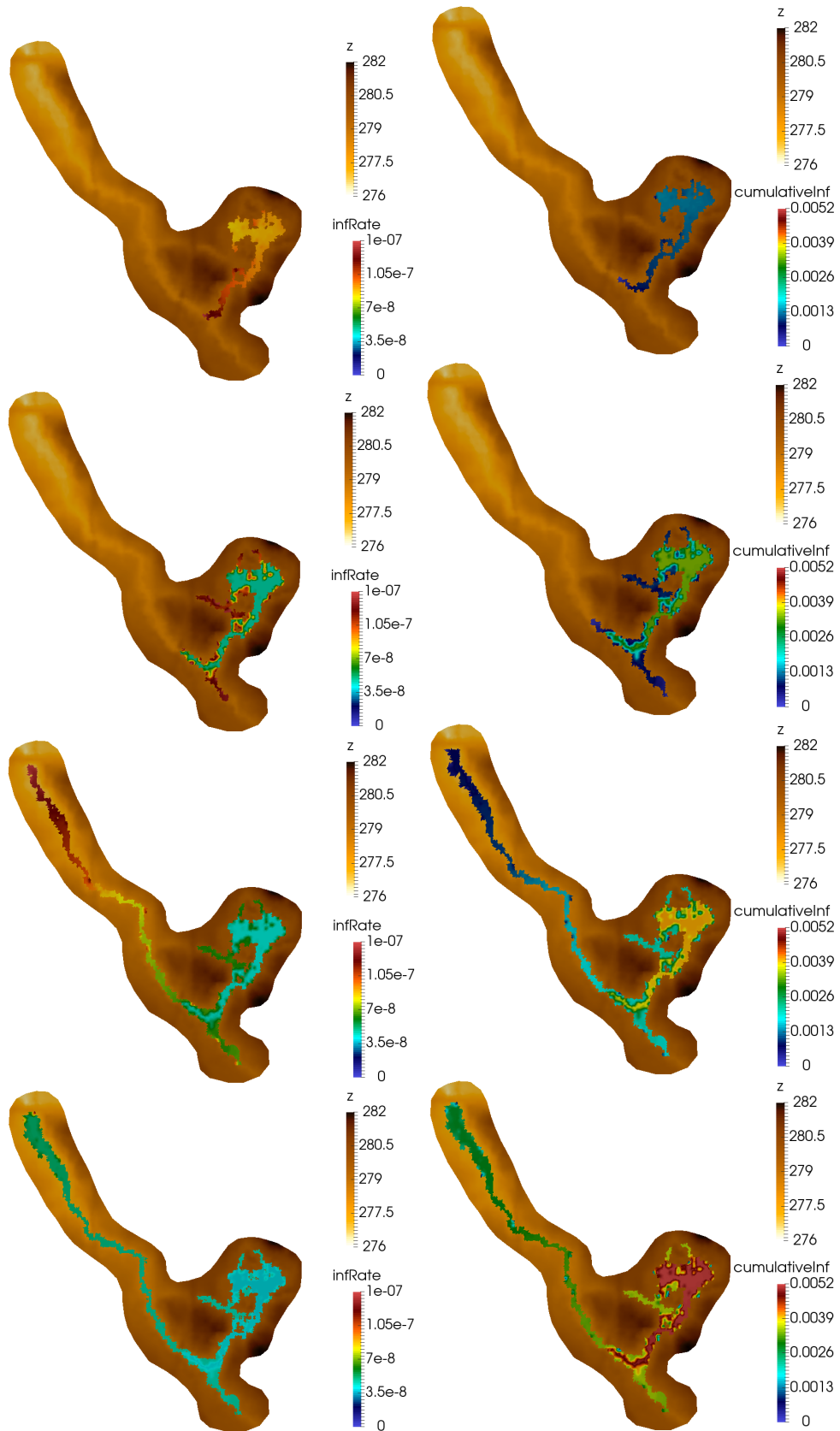


Figura 4.6: Tasa de infiltración $f_{inf}[m/s]$ (izquierda) e infiltración acumulada $F_{inf}[m]$ (derecha) para diferentes instantes de tiempo. De arriba a abajo: $t = 8h, 18h, 22h$ y $30h$.

5 Conclusiones

En este trabajo, se han presentado diversas validaciones con soluciones analíticas de un modelo distribuido 2D de simulación hidráulica adaptado a flujos viscosos. Se han considerado dos tipologías distintas de problemas (flujo axial y radial) con distintas condiciones de entrada para el fluido (caudal y volumen) y se han empleado diferentes tipos de malla para la discretización espacial del problema (rectangular estructurada y triangular no estructurada). Adicionalmente, se ha aplicado el modelo a un caso real consistente en una rotura puntual en un oleoducto. En base a los resultados obtenidos en este trabajo, se concluye que:

- La tipología de flujo (axial o radial) y de condición de entrada (a volumen o caudal constante) influyen en el valor de algunos parámetros característicos de los modelos de fricción, el valor del coeficiente de Manning en el caso de la fricción turbulenta y el valor del esfuerzo umbral en el modelo viscoso. Por lo tanto, resulta necesario calibrar estos parámetros en cada caso.
- En problemas con simetría axial, es recomendable el uso de una malla cuadrada que respete la dirección predominante del flujo. Para problemas con simetría radial, las mallas triangulares no estructuradas proporcionan una mayor conservación de la simetría del problema, ya que carecen de direcciones preferenciales.
- Las mallas triangulares y cuadradas proporcionan resultados similares entre sí para ambos tipos de flujo (axial y radial), reproduciéndose las soluciones analíticas satisfactoriamente.
- Aunque las soluciones analíticas utilizadas derivan de hipótesis simplificadas cercanas al modelo ZI, las predicciones del modelo SW no se apartan demasiado.
- En la aplicación del modelo al caso de una rotura en un oleoducto, los resultados numéricos obtenidos para la extensión de la mancha considerando los procesos de infiltración y evaporación concuerdan en gran medida con los datos de campo disponibles. En este caso se pone de manifiesto la aplicabilidad de los modelos bidimensionales distribuidos a casos reales en los que se necesita conocer una predicción detallada de todas las variables hidráulicas/hidrológicas, como el calado, la velocidad, la infiltración, etc.
- Gracias a la programación en GPU se ha podido simular el caso real con una malla de cálculo formada por 14540 celdas en aproximadamente 5 minutos, y por tanto se hace posible realizar una gran cantidad de simulaciones que son necesarias para calibrar parámetros.

Bibliografía

- [1] S. Assouline. Infiltration into soils: conceptual approaches and solutions. *Water Resources Research*, 49:1755–1772, 2013.
- [2] A. Beg, B. Amin, and I. Hussain. Generalized kinematic viscosity-temperature correlation for undefined petroleum fractions. *The chemical engineering journal*, 38:123–136, 1988.
- [3] R.M. Carpena and A.R. Rodríguez. *Hidrología Agroforestal*. Ediciones Mundi-Prensa, 2005.
- [4] D. Caviedes-Voullième, P. García-Navarro, and Javier Murillo. Influence of mesh structure on 2d full shallow water equations and scs curve number simulation of rainfall/runoff events. *Journal of Hydrology*, 448:39–59, 2012.
- [5] V. Di-Federico, S. Malavasi, and S. Cintoli. Viscous spreading of non-newtonian gravity currents on a plane. *Meccanica*, 41:207–217, 2006.
- [6] V. Di-Federico and G. Bizzarri S. Cintoli. Viscous spreading of non-newtonian gravity currents in radial geometry. *WIT Transactions on Engineering Sciences*, 52, 2006.
- [7] J. Fernández-Pato, D. Caviedes-Voullième, and P. García-Navarro. Rainfall/runoff simulation with 2d full shallow water equations: Sensitivity analysis and calibration of infiltration parameters. *Journal of Hydrology*, 536:496–513, 2016.
- [8] J. Fernández-Pato and P. García-Navarro. 2D zero-inertia model for solution of overland flow problems in flexible meshes. *Journal of Hydrology Engineering*, 2016.
- [9] M.F. Fingas. Studies on the evaporation of crude oil and petroleum products: I. the relationship between evaporation rate and time. *Journal of Hazardous Materials*, 56:227–236, 1997.
- [10] M.F. Fingas. Studies on the evaporation of crude oil and petroleum products: I. the relationship between evaporation rate and time. *Advances in Chemical Engineering and Science*, 2:246–256, 2012.
- [11] M. Hussein, M. Jin, and J.W. Weaver. Development and verification of a screening model for surface spreading of petroleum. *Journal of Contaminant Hydrology*, 57:281–302, 2002.

- [12] J. Murillo and P. García-Navarro. Weak solutions for partial differential equations with source terms: Application to the shallow water equations. *Journal of Computational Physics*, 229:4327–4368, 2010.
- [13] J. Murillo and P. García-Navarro. Wave riemann description of friction terms in unsteady shallow flows: Application to water and mud/debris floods. *Journal of Computational Physics*, 231:1963–2001, 2012.
- [14] V.M. Ponce. Diffusion wave modeling of catchment dynamics. *Journal of Hydraulic Engineering*, 112:716–727, 1986.
- [15] W.J. Rawls, M.A., D.L. Brakensiek, and N. Miller. Green-ampt infiltration parameters from soils data. *Journal of Hydraulic Engineering*, 109:62–70, 1983.
- [16] C. Van-Der-Geest, V. Bizotto-Guersoni, D. Merino-Garcia, and A. Bannwart. Rheological study under simple shear of six gelled waxy crude oils. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 247:188–206, 2017.
- [17] C.B. Vreugdenhil. *Numerical Methods for Shallow Water Flow*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands, 1994.