



UNIVERSIDAD TECNICA
FEDERICO SANTA MARIA

Departamento de Obras Civiles

Modelación numérica de la sedimentación de microplásticos en medios salinos estratificados mediante acoplamiento OpenFOAM-YADE

Memoria de Título presentada por

Gabriel Alejandro Cofré Larrieu

como requisito parcial para optar al título de la carrera de

Ingeniería Civil

Profesores Guía
Karina Soto Rivas
Sergio Carrasco Cisterna

Agosto de 2026



CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

Tipo de monografía (marcar una opción): ☒ Memoria o trabajo de título ☐ Tesis de Postgrado

Título del trabajo: Modelación numérica de la sedimentación de microplásticos en medios salinos estratificados mediante acoplamiento OpenFOAM-YADE

Nombre del candidato(a): Gabriel Alejandro Cofré Larrieu

Carrera / Grado: Ingeniería Civil

Campus: San Joaquín **Departamento:** Obras Civiles

2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Karina Andrea Soto Rivas, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución.

3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL (marcar una opción)

☒ El trabajo **NO contiene** información que amerite confidencialidad y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

☐ El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (**embargo**) por (**marcar una opción**):

☐ 6 meses ☐ 12 meses ☐ 2 años ☐ 3 años ☐ 5 años ☐ 10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

4.- FIRMAS

Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:

Fecha: 06-08-2026 **Firma:** 

Estudiante o Candidato(a):

Fecha: 06-08-2026 **Firma:** 

Este formulario debe ser insertado como página 2 de la memoria o tesis, completado y firmado por estudiante y profesor(a) antes de la entrega en portal PRISMA de Biblioteca USM.

MODELACIÓN NUMÉRICA DE LA SEDIMENTACIÓN DE MICROPLÁSTICOS EN MEDIOS SALINOS ESTRATIFICADOS MEDIANTE ACOPLAMIENTO OPENFOAM-YADE

Gabriel Cofré Larrieu, Karina Soto Rivas, Sergio Carrasco Cisterna

Universidad Técnica Federico Santa María

Resumen

La presencia de microplásticos en medios acuáticos naturales constituye una problemática relevante en la actualidad. La variación vertical de densidad de estos medios puede modificar el transporte y la sedimentación de estas partículas. En la presente investigación se estudió numéricamente la velocidad de sedimentación de partículas de microplásticos de Policaprolactona (PCL) en medios salinos estratificados mediante un modelo acoplado OpenFOAM-YADE. Para ello se modeló un estanque con agua en reposo y se evaluó el descenso de partículas individuales de geometría esférica y cilíndrica.

El modelo fue validado inicialmente registrando la sedimentación de las partículas mencionadas en un medio homogéneo representativo de agua destilada. Posteriormente se evaluó el efecto de la forma de la partícula y de la estratificación salina en su velocidad de sedimentación. Los resultados evidenciaron que la esfera sedimenta más rápido que el cilindro en casos comparables, pero también presenta una mayor sensibilidad frente al aumento vertical de la densidad. Asimismo, se observó que los perfiles estratificados reducen la velocidad de sedimentación respecto a un medio homogéneo.

En conjunto, el estudio evidencia que la sedimentación de microplásticos no depende únicamente de la densidad del material, sino también de la morfología de la partícula y de la distribución vertical de la densidad del fluido. A su vez, el modelo generado presenta una base para futuras investigaciones orientadas al estudio del comportamiento de microplásticos en ambientes acuáticos naturales.

Palabras clave: Velocidad de sedimentación, microplásticos, estratificación salina, CFD-DEM

1 Introducción

El crecimiento de la población mundial durante las últimas décadas ha generado también un incremento en la producción de desechos plásticos, los cuales constituyen aproximadamente el 80 % de la basura en los océanos (IOC-UNESCO, 2022). Dentro de esta problemática, parte de la contaminación presente corresponde a partículas plásticas de menor tamaño denominadas microplásticos.

De acuerdo con la definición consensuada mostrada por Frias & Nash (2019), los microplásticos corresponden a polímeros sólidos sintéticos, insolubles en agua, con tamaños comprendidos entre 0.001 mm y 5 mm. Estas partículas pueden ser de un origen primario, si son fabricadas directamente en pequeñas dimensiones, o un origen secundario, si se originan por la fragmentación de plásticos de mayor tamaño.

Los microplásticos han generado creciente preocupación debido a su amplia distribución, su persistencia y sus efectos adversos producidos en ecosistemas acuáticos (Ricciardi et al., 2021). Entre estos efectos se puede mencionar la ingesta de estas partículas por parte de organismos que habitan estos ecosistemas (Vendel et al., 2017; Pozo et al., 2019).

Dentro de los sistemas acuáticos afectados por la presencia de microplásticos se encuentran los medios estratificados (e.g., Uurasjärvi et al., 2021). Estos medios se caracterizan por la variación de la densidad del agua respecto a la profundidad debido a gradientes de salinidad, temperatura u otros factores. En Chile, se ha evidenciado una alta presencia de microplásticos en este tipo de medios, como costas y estuarios (Castillo et al., 2020). En estos sistemas, la estratificación salina resulta relevante, ya que puede

favorecer la acumulación de partículas en determinadas capas de flujo y modificar su trayectoria vertical (Priya et al., 2025).

La alta presencia de microplásticos en dichos medios plantea la necesidad de desarrollar planes de limpieza y mitigación, no obstante, para diseñar planes efectivos es indispensable comprender el comportamiento de estas partículas en estos medios acuáticos. Una metodología utilizada para estudiar este tipo de fenómenos es la modelación numérica, debido a que permite representar fenómenos físicos complejos y evaluar distintas condiciones del sistema de manera controlada.

Los medios estratificados pueden simularse mediante la dinámica de fluidos computacional (CFD), herramienta ampliamente utilizada para estudiar procesos hidrodinámicos y de transporte de partículas. Mediante esta herramienta es posible representar campos de velocidades, presión, densidad, además de definir condiciones iniciales y de borde. Adicionalmente, el acoplamiento de los modelos CFD con otros métodos numéricos como los modelos de elementos discretos (DEM), permiten estudiar el transporte y sedimentación de partículas sólidas en fluidos (e.g., Xu et al., 2018). En conjunto, estas herramientas permiten estudiar variables que resultan difíciles de observar de manera directa en laboratorio, tales como el comportamiento de la velocidad de sedimentación, la trayectoria de las partículas en el medio, entre otros.

Diversas investigaciones han utilizado modelos numéricos para estudiar el comportamiento de partículas en medios acuáticos y han demostrado, por una parte, que las condiciones hidrodinámicas del medio influyen en el comportamiento de las partículas de microplásticos (e.g., Xu et al., 2018; Kabir et al., 2025; Velazquez-Araque et al., 2025) y, por otra, que las propiedades físicas de las partículas, como su tamaño y forma, modifican su comportamiento de sedimentación (Ahmadi et al., 2022). Sin embargo, todavía son escasos los estudios que analizan de manera conjunta el efecto de la estratificación salina del medio y la morfología de las partículas de microplásticos, en específico sobre la velocidad de sedimentación de las partículas.

Debido a esta brecha en la información disponible, surge la oportunidad de aportar conocimiento científico mediante la caracterización de la velocidad de sedimentación de partículas de microplásticos, analizando el comportamiento de partículas de diferentes formas en un medio acuático bajo diferentes grados de estratificación. La presente investigación abordará esta problemática mediante modelos numéricos acoplados (CFD/DEM), utilizando softwares especializados (OpenFOAM/YADE).

Dado que el estudio se enfoca en partículas individuales de baja inercia, se adoptará un enfoque *one-way coupling*. Este enfoque se considera adecuado, debido a que el flujo afectará el movimiento de la partícula, pero la partícula no altera el comportamiento del fluido (Cao et al., 2023). Esta simplificación permite estudiar la velocidad de sedimentación en condiciones controladas y centrar el análisis en la influencia de la estratificación salina y de la forma de la partícula. Comprender este fenómeno no solo aporta conocimiento físico del transporte y sedimentación de partículas de microplásticos en medios estratificados, sino que también puede entregar antecedentes útiles para la identificación de zonas de acumulación, la estimación de tiempos de residencia y el diseño de estrategias de monitoreo, mitigación y gestión ambiental en ecosistemas acuáticos afectados por contaminación plástica.

2 Objetivos:

A partir de los antecedentes expuestos, resulta necesario establecer los objetivos de la investigación que orienten su desarrollo y permitan resolver la problemática planteada anteriormente.

El objetivo general de este trabajo es caracterizar la velocidad de sedimentación de partículas de microplásticos en medios estratificados salinos mediante un modelo híbrido OpenFOAM-YADE, con el fin de analizar el efecto de la estratificación y de la forma de la partícula en su sedimentación.

Para alcanzar este propósito, se plantean los siguientes objetivos específicos:

1. Validar el modelo numérico computacional como una herramienta capaz de reproducir de manera adecuada y representativa las condiciones del fenómeno físico en estudio, mediante su comparación con resultados de la literatura especializada.

2. Determinar la influencia de la forma característica de las partículas de microplásticos en su velocidad de sedimentación en medios estratificados.
3. Analizar la variación de la velocidad de sedimentación de partículas de microplásticos respecto a diferentes gradientes de estratificación en un medio simulado.

3 Marco Teórico:

3.1 Microplásticos en medios estratificados

Los microplásticos han sido ampliamente detectados en distintos ambientes (Castillo et al., 2020; Priya et al., 2025). En particular, se ha identificado que estas partículas pueden quedar retenidas en ecosistemas naturales, cuyas condiciones hidrodinámicas favorecen su acumulación. Estos medios se caracterizan por una alta estratificación vertical asociada a gradientes de salinidad, la cual afecta la circulación y la distribución de las partículas, favoreciendo su concentración en capas específicas de la columna de agua (Priya et al., 2025).

En términos de composición, los microplásticos presentes en los medios mencionados pueden estar constituidos de polímeros de diferente composición, tales como Polipropileno (PP), Polietileno tereftalato (PET), Policloruro de vinilo (PVC) y Poliestireno (PS), Policaprolactona (PCL), entre otros (Kabir et al., 2025; Khatmullina & Isachenko., 2017).

Se ha evidenciado mediante modelos numéricos (e.g., Kabir et al., 2025) y ensayos de laboratorio (e.g., Khatmullina & Isachenko, 2017) que la forma y el tamaño influyen en la velocidad de sedimentación de microplásticos. Además, se ha demostrado que la estratificación de un medio modifica la velocidad de sedimentación de las partículas (Ahmadi et al., 2022).

3.2 Velocidad de sedimentación de partículas

En la presente investigación, se estudiará el comportamiento de la velocidad de sedimentación de microplásticos en medios estratificados. Para este fin, se define la velocidad de sedimentación como la velocidad vertical con la que una partícula desciende en el agua. En un medio estacionario y homogéneo tiende a aproximarse a la velocidad terminal, sin embargo, para un medio estratificado, el cambio de densidad respecto a la altura genera un cambio en el comportamiento y patrón de la velocidad (Doostmohammadi et al., 2014).

De acuerdo con estudios sobre sedimentación de partículas, la velocidad de sedimentación está determinada por el resultado del balance entre el peso aparente de la partícula y la fuerza de arrastre ejercida por el fluido, cuya expresión general (Allen, 1985) presentada en la ecuación 1 es resultado de la idealización de la física de las partículas.

$$V_s = \sqrt{\frac{2(\rho_p - \rho_f(y))gV_p}{\rho_f(y) C_D A_p}} \quad (1)$$

Donde: $\rho_f(y)$ es la densidad del fluido en función de la profundidad; ρ_p es la densidad de la partícula, g es la gravedad, V_p es el volumen de la partícula, C_D es el coeficiente de arrastre y A_p el área proyectada de la partícula.

Esta expresión sirve como referencia para la presente investigación, sin embargo, su aplicación para medios estratificados requiere considerar la variación de la densidad del fluido en función de la altura. En este contexto, la velocidad de sedimentación deja de ser constante y pasa a depender de la posición de la partícula dentro del dominio. Adicionalmente, al considerar la geometría y propiedades físicas de las partículas, el coeficiente de arrastre es un factor clave a considerar.

Para determinar dicho coeficiente se pueden usar expresiones (Ecuación 2) para partículas esféricas (Morsi y Alexander, 1972).

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2} \quad (2)$$

Donde: a_1 , a_2 , a_3 son constantes que dependen del rango del número de Reynolds (Ecuación 3).

$$Re = \frac{\rho_f d_p |\vec{V}_p - \vec{V}_f|}{\mu} \quad (3)$$

Donde: d_p es el diámetro de la partícula; $|\vec{V}_p - \vec{V}_f|$ es la velocidad relativa de la partícula respecto al flujo y μ es la viscosidad dinámica del fluido.

También se pueden usar las expresiones (Ecuación 4) para partículas no esféricas (Haider y Levenspiel, 1989).

$$C_D = \frac{24}{Re_{sp}} (1 + b_1 Re_{sp}^{b_2}) + \frac{b_3 Re_{sp}}{b_4 + Re_{sp}} \quad (4)$$

Donde: Re_{sp} es el número de Reynolds de la partícula no esférica (Ecuación 3) y b_1 (Ecuación 5), b_2 (Ecuación 6), b_3 (Ecuación 7), b_4 (Ecuación 8) son coeficientes de forma equivalente.

$$b_1 = \exp(2.3288 - 6.4581 \Phi + 2.4486 \Phi^2) \quad (5)$$

$$b_2 = 0.0964 + 0.5565 \Phi \quad (6)$$

$$b_3 = \exp(4.905 - 13.8944\Phi + 18.4222 \Phi^2 - 10.2599 \Phi^3) \quad (7)$$

$$b_4 = \exp(1.4681 + 12.2584 \Phi - 20.7322 \Phi^2 + 15.8855 \Phi^3) \quad (8)$$

Donde: Φ es el factor de área equivalente (Ecuación 9).

$$\Phi = \frac{\text{área superficial de esfera de igual volumen}}{\text{área superficial de la partícula real}} \quad (9)$$

3.3 Estratificación salina en medios acuáticos naturales

En sistemas acuáticos naturales, la estratificación del agua se produce debido a diferencias de densidad generadas por variaciones en la salinidad y la temperatura. Estas variaciones favorecen la formación de capas con distintas densidades. En el caso de la estratificación salina, las capas de mayor densidad

tienden a ubicarse a mayor profundidad. Este comportamiento ha sido ampliamente documentado mediante formulaciones empíricas, como la ecuación de estado del agua de mar, en la cual la densidad se expresa en función de la salinidad, la temperatura y la presión (Fofonoff & Millard, 1983).

Las tablas derivadas de esta formulación evidencian que, para condiciones típicas de superficie, incrementos en la salinidad del orden de 10 a 40 PSU generan variaciones del orden de 10 a 30 kg/m³ (Fofonoff & Millard, 1983), lo que confirma la fuerte dependencia entre ambas variables. Para la representación de la estratificación en estudios controlados, es habitual adoptar perfiles idealizados de densidad que varían de forma lineal en función de la coordenada vertical (e.g., Mercier et al., 2020).

La estimación analítica de la velocidad de sedimentación en cada punto de la trayectoria de una partícula resulta un proceso complejo. Debido a esto, el uso de modelos numéricos permite abordar el problema de manera más eficiente, incorporando la variación de la densidad del medio y los efectos de la forma de la partícula.

3.4 Modelación numérica

La modelación numérica permite analizar escenarios que pueden ser difíciles de reproducir experimentalmente, este enfoque resulta adecuado para la presente investigación, debido a que permite controlar las propiedades del fluido y modificar las características geométricas de las partículas. Con ello, es posible comparar distintos escenarios numéricos y analizar cómo la estratificación salina y la morfología de la partícula influyen en su velocidad de sedimentación.

El problema estudiado corresponde a un sistema fluido-partícula, por lo que se adopta un modelo acoplado CFD/DEM. En este esquema, la fase fluida se representa mediante CFD desde un enfoque euleriano. Por otra parte, las partículas se representan mediante el método de elementos discretos (DEM), el cual adopta un enfoque lagrangiano para describir el movimiento individual de las partículas, permitiendo seguir su posición, trayectoria y velocidad a lo largo del tiempo.

Dentro de los modelos acoplados CFD/DEM, la interacción entre la fase fluida y la fase particulada puede representarse mediante distintos enfoques, entre los cuales se encuentran el *one-way coupling* y el *two-way coupling* (Cao et al., 2023; Capone et al., 2021). En el *one-way coupling*, el fluido afecta el movimiento de la partícula, mientras que la influencia de la partícula sobre el campo fluido se considera despreciable. En cambio, en el *two-way coupling* existe una interacción bidireccional, donde el fluido modifica la trayectoria de la partícula y, a su vez, la partícula altera localmente el comportamiento del fluido. En la presente investigación se adoptará un enfoque *one-way coupling*, debido a que se estudiará el movimiento de partículas individuales de microplásticos de baja inercia. Bajo estas condiciones, no se requiere representar la interacción entre partículas, ni tampoco los efectos que produce la partícula sobre el fluido. Esta simplificación permite centrar el análisis en la influencia de la estratificación salina y de la forma de la partícula sobre su velocidad de sedimentación.

La implementación numérica se realizará mediante el acoplamiento entre OpenFOAM y YADE. OpenFOAM corresponde a una herramienta CFD de código abierto que permite resolver las ecuaciones del fluido mediante el método de volúmenes finitos (OpenFOAM Foundation, 2022). En esta investigación, se utilizará para representar el medio acuático y el campo de densidad, velocidad y presión. Por su parte, YADE corresponde a un *framework* DEM de código abierto orientado a la simulación del movimiento de partículas sólidas, considerando sus propiedades físicas y geométricas (Šmilauer et al., 2021). En el esquema acoplado, OpenFOAM entrega a YADE la información local del fluido en la posición de la partícula, mientras que YADE resuelve la trayectoria y velocidad de la partícula en función de las fuerzas actuantes.

En términos físicos, la fase fluida se rige por la conservación de masa. Para el caso de un fluido incompresible, esta condición se representa mediante la ecuación de continuidad (Ecuación 10)

$$(\nabla \cdot \vec{V}_f) = 0 \quad (10)$$

Donde: $\vec{V}_f$ es la velocidad del fluido

Además, el movimiento del fluido se describe mediante la ecuación de conservación del momentum (Ecuación 11), la cual permite obtener la evolución del campo de velocidades a partir de los efectos de presión, viscosidad y gravedad.

$$\rho_f \left(\frac{\partial \vec{V}_f}{\partial t} + (\vec{V}_f \cdot \nabla) \vec{V}_f \right) = -\nabla P_f + \mu \nabla^2 \vec{V}_f + \rho_f \vec{g} \quad (11)$$

Donde: $\vec{V}_f$ es la velocidad del fluido, ρ_f es la densidad del fluido, P_f es la presión del fluido, μ es la viscosidad dinámica y g es la aceleración de gravedad.

Por otra parte, el movimiento de cada partícula se describe mediante la conservación del momentum lineal. En este caso, se considera que la partícula está sometida principalmente a su peso, a la fuerza de flotabilidad y a la fuerza de arrastre ejercida por el fluido.

$$m_p \frac{\partial \vec{V}_p}{\partial t} = m_p \vec{g} - \rho_f \forall_p \vec{g} + \frac{1}{2} C_D \rho_f A_p |\vec{V}_f - \vec{V}_p| (\vec{V}_f - \vec{V}_p) \quad (12)$$

Donde: m_p es la masa de la partícula, $\vec{V}_p$ es la velocidad de la partícula, g es la aceleración de gravedad, ρ_f es la densidad del fluido, $\forall_p$ es el volumen de la partícula, C_D es el coeficiente de arrastre de la partícula, A_p es el área proyectada de la partícula y V_f es la velocidad del fluido.

Cabe aclarar que, aunque uno de los propósitos de esta investigación es representar las variaciones verticales de densidad asociadas a la estratificación salina, estas no se incorporan directamente en el campo fluido resuelto por OpenFOAM. En cambio, su efecto sobre el movimiento de la partícula se representa en YADE mediante una corrección de la fuerza de flotabilidad, calculada a partir de la densidad local del medio. Por lo tanto, resulta coherente modelar en OpenFOAM la fase fluida como un fluido incompresible de densidad constante y expresar la conservación de la masa mediante la ecuación presentada anteriormente.

4 Metodología

4.1 Diseño del experimento

4.1.1 Modelo CFD/DEM

El campo fluido se resuelve en OpenFOAM mediante un solver transiente basado en el algoritmo PIMPLE, adecuado para simulaciones de fluidos incompresibles en régimen no estacionario (OpenFOAM Foundation, 2022). Su selección se justifica debido a que el fenómeno estudiado corresponde al descenso de una partícula en el tiempo, por lo que es necesario representar la evolución de su posición y velocidad durante la simulación. Además, se considera apropiado representar el campo fluido como un régimen laminar, debido a que el fluido se encuentra inicialmente en reposo y no existen flujos externos turbulentos.

La fase particulada se modela mediante el software YADE, adoptando un enfoque de acoplamiento unidireccional (*one-way coupling*). De esta forma, OpenFOAM entrega a YADE la información local del fluido en la posición de la partícula, mientras que YADE resuelve el movimiento de la partícula a partir de sus propiedades físicas y de las fuerzas actuantes. Bajo este enfoque, la partícula responde al campo fluido, pero no modifica de manera retroactiva el campo hidrodinámico resuelto por OpenFOAM.

4.1.2 Dominio Computacional

Para el diseño del experimento, se define un dominio tridimensional que representa un tanque de agua rectangular (Figura 1), en el cual se simularán las condiciones hidrodinámicas y se analizará el comportamiento de las partículas en su interior. El volumen del tanque de agua tiene dimensiones 18x18 cm de base, cuya geometría cuadrada modelada en los ejes horizontales X y Z, además el estanque posee una altura 110 cm, modelado en el eje Y. Esta geometría del estanque permite tanto mantener un dominio simple de controlar y analizar las variables de interés.

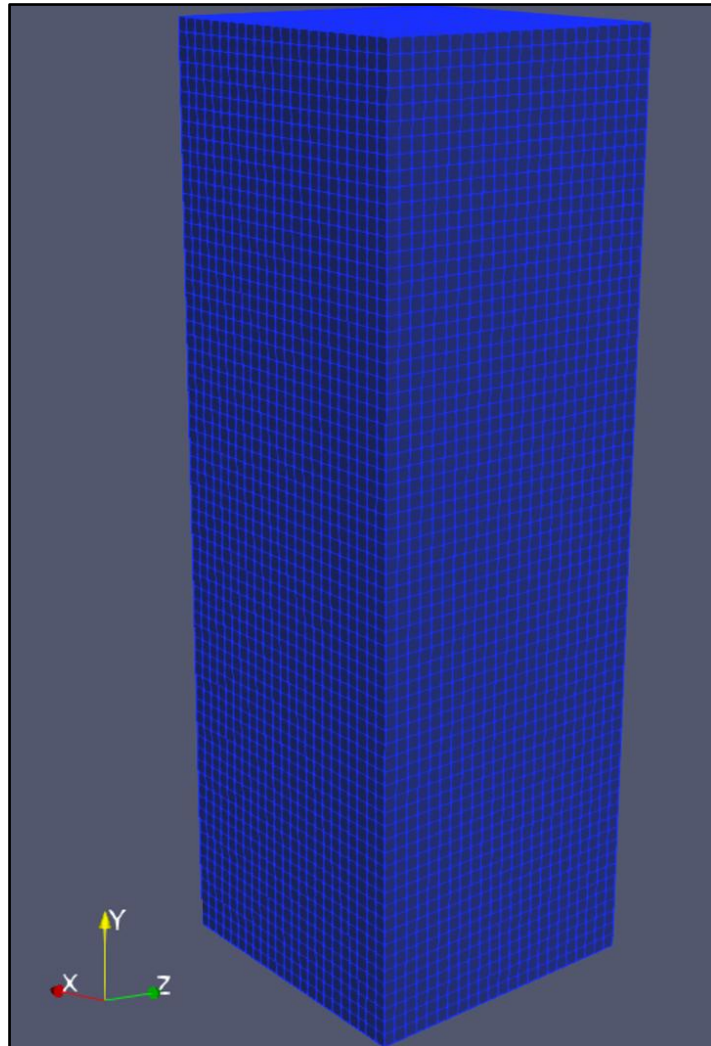


Figura 1. Dominio computacional y discretización de la malla.

Para el caso de las partículas, se consideraron geometrías esférica y cilíndrica con un diámetro característico nominal de 4 mm, correspondiente a una misma clase de tamaño asociada a un tamiz de referencia. Para ambos casos, este valor corresponde directamente al diámetro, considerando para el cilindro una relación $L/D = 1$. Ambas partículas poseen una densidad de 1131 kg/m^3 , representativa de la Policaprolactona (PCL).

La selección de geometrías esféricas y cilíndricas se debe a que permiten representar las morfologías relevantes dentro del estudio de los microplásticos. La esfera constituye una geometría de referencia asociada a partículas regulares, mientras que el cilindro permite incorporar el comportamiento de una partícula no esférica y aproximarse a morfologías representativas de fibras y fragmentos cilíndricos, comunes de encontrar en medios naturales. Este criterio de selección además permite comparar partículas de distinta geometría bajo un mismo tamaño nominal, aunque sus volúmenes, masas y áreas

proyectadas no sean idénticos, y facilita la comparación con el estudio experimental de Khatmullina e Isachenko (2017).

La discretización espacial del dominio se realiza mediante una malla estructurada generada con *blockmesh*. Siguiendo las recomendaciones de la literatura (Xu et al., 2018), se discretiza el dominio en celdas cúbicas de aproximadamente 8 mm. Esto permite una relación cercana a 2:1 respecto al diámetro de la partícula. Esta configuración corresponde a 23 celdas en el eje x, 23 celdas en el eje z, con 138 celdas en el eje y, obteniendo un número total de celdas de 73002. De esta manera, se mantiene una resolución moderada, constituyendo un balance adecuado entre la resolución numérica y el costo computacional asociado.

4.1.3 Propiedades del fluido

El fluido modelado corresponde a una representación de agua, considerada como un flujo incompresible. Para todos los casos simulados, OpenFOAM resuelve el campo de fluido utilizando una densidad constante de 1000 kg/m³. Esta densidad corresponde al caso homogéneo de referencia y se mantiene como propiedad base del fluido dentro del solver.

La viscosidad cinemática del fluido se mantiene con un valor constante equivalente a 1×10^{-6} m²/s durante todas las simulaciones, de acuerdo con las propiedades del agua utilizadas en el modelo.

4.1.4 Condiciones iniciales y de borde

El fluido se inicializa en reposo, por lo que la velocidad inicial en todo el dominio se define como nula. Las paredes laterales y el fondo se modelan como superficies impermeables y no deslizantes (*no-slip condition*), lo que implica que la velocidad del fluido en dichas superficies es igual a 0. Además, no se considera intercambio de masa y energía con el exterior a través de las fronteras. La superficie superior del dominio se modela como una superficie libre idealizada (*slip condition*), adoptando condiciones de tipo *slip* para la velocidad. En esta superficie, la presión se considera constante e igual a la presión atmosférica.

Finalmente, los parámetros mostrados en la Tabla 1 constituyen la base del modelo, los cuales se usarán para todos los casos a evaluar.

Tabla 1. Parámetros base del medio fluido simulado

Parámetro	Valor	Observación
Geometría del estanque	18x110x18 cm	Estanque rectangular
Discretización Malla	23x138x23	Geometría de las celdas
Paredes estanque	Impermeables (<i>No-slip</i>)	Sin intercambio con el exterior
Superficie superior	Presión atmosférica (<i>Slip</i>)	Superficie libre idealizada
Presión Inicial	Hidrostática	Compatible con la densidad del flujo

4.1.5 Implementación de la estratificación salina

En la configuración utilizada de OpenFOAM-YADE, el solver resuelve el campo fluido considerando una densidad base constante. Aunque OpenFOAM permite definir campos espaciales asociados a la densidad del fluido, el acoplamiento empleado no utiliza directamente este campo para modificar las fuerzas hidrodinámicas aplicadas sobre la partícula. Por esta razón, la estratificación salina no se incorpora como un campo de densidad resuelto dentro del solver, sino que se representa mediante una fuerza externa aplicada en YADE. Esta fuerza depende de la densidad local impuesta por una función vertical (Ecuación 13)

$$\rho_f(y) = f(y) \quad (13)$$

Donde: $\rho_f(y)$ es la densidad del fluido en función de la coordenada vertical y $f(y)$ corresponde a la función que representa el perfil vertical para cada caso.

Esta metodología permite representar el efecto principal del gradiente salino sobre la sedimentación, asociado al aumento del empuje cuando la partícula desciende hacia zonas de mayor densidad. Al aumentar la densidad local del fluido, disminuye el peso aparente de la partícula y, en consecuencia, se reduce la velocidad de sedimentación. De esta forma, la estratificación no modifica directamente el campo hidrodinámico resuelto por OpenFOAM. A partir de la función de densidad local, se estima una fuerza (Ecuación 14) correctiva de flotabilidad que representa el aumento del empuje debido a la presencia de un fluido de diferente densidad.

$$F_{b,corr} = (\rho_f(y) - \rho_0) \forall_p g \quad (14)$$

Donde: $F_{b,corr}$ corresponde a la fuerza correctiva de flotabilidad, $\rho_f(y)$ es la densidad local evaluada en la posición vertical de la partícula, $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$ es la densidad base del fluido homogéneo, $\forall_p$ es el volumen de la partícula y g es la aceleración de gravedad.

Para el caso de la esfera, el volumen utilizado en la fuerza correctiva corresponde al volumen geométrico de una esfera de radio R (Ecuación 15) y para el caso del cilindro, el volumen físico considerado corresponde al de un cilindro de radio R y largo L (Ecuación 16).

$$\forall_p = \frac{4 \pi R^3}{3} \quad (15)$$

$$\forall_p = \pi L R^2 \quad (16)$$

Donde: $\forall_p$ es el volumen de la partícula, R es el radio de la partícula y L el largo de la partícula.

Cabe destacar que, en YADE, el cilindro se representa mediante un *clump* de esferas (Figura 2). Por esta razón, la fuerza correctiva no se aplica sobre un único cuerpo, sino que se distribuye entre las esferas que conforman el *clump*. Para ello, se utiliza una ponderación volumétrica, asignando a cada esfera una fracción del volumen físico del cilindro proporcional a su volumen dentro del conjunto. De esta manera, la suma de las fuerzas aplicadas sobre las esferas representa el empuje correctivo asociado al cilindro completo, evitando amplificar artificialmente la fuerza de empuje.

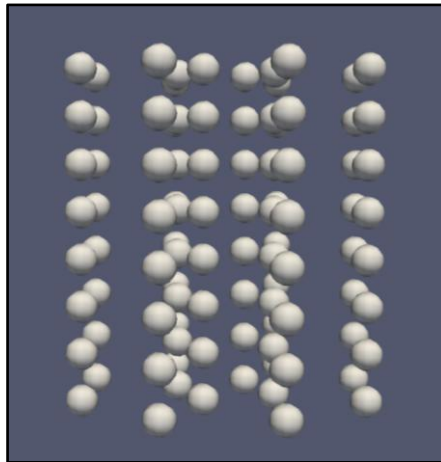


Figura 2. *Clump* de esferas que conforman el cilindro modelado

4.1.6 Parámetros generales

Se establecerá para todos los casos a evaluar un punto inicial de caída de la partícula a 10 cm bajo la superficie superior del estanque y se considerará el punto final 20 cm sobre el fondo del estanque. Se adopta un tiempo total de simulación máximo de 10 segundos para todos los casos a analizar. Este intervalo se considera suficiente para representar el fenómeno en estudio y permite comparar resultados bajo una misma base temporal. Si la partícula cruza el límite inferior del tramo de estudio, se registrarán los datos hasta dicho momento solamente.

El paso de tiempo se establece en 0.0001 segundos, valor seleccionado como equilibrio entre la estabilidad numérica y el costo computacional. Esta elección permite resolver de manera adecuada la evolución de la velocidad de la partícula, evitando a su vez tiempos de cálculo excesivos. Respecto al almacenamiento de resultados, se establece una frecuencia de guardado de 0.05 segundos, esto con el fin de reducir el volumen de datos generados sin perder resolución suficiente para el análisis temporal de sedimentación.

La variable principal para registrar corresponde a la velocidad y la posición vertical de la partícula en el tiempo. Los parámetros generales (Tabla 2) seleccionados constituyen la temporalidad para todos los casos a evaluar.

Tabla 2. Parámetros base para todos los casos a simular

Parámetro	Valor	Observación
Altura de lanzamiento	100 cm	Medido desde el fondo
Altura final del tramo	20 cm	Medido desde el fondo
Tiempo de simulación	10 s	Tiempo estimado
Paso del tiempo	0.0001 s	Intervalo de cálculo
Intervalo entre resultados	0.05 s	Intervalo de escritura
Variables extraídas	Velocidad vertical ; Posición	En función del tiempo

4.1.7 Criterios de los análisis de resultados

Para el análisis de los resultados, se adopta como convención que la velocidad de sedimentación (V_s) es positiva en dirección descendente. Con el objetivo de evaluar la tendencia del resultado, se calcula una velocidad media de sedimentación en un tramo determinado de la simulación. Esta velocidad se obtiene mediante un promedio acumulado (Ecuación 17) entre los instantes de tiempo t_i y t_j , los cuales corresponden al tramo que empieza cuando la velocidad de sedimentación se estabiliza hasta el último instante de la simulación.

$$\overline{V}_s(t_n) = \frac{1}{n+1} \sum_i^j V_s(t_i) \quad (17)$$

Donde $\overline{V}_s(t_n)$ es el promedio acumulado de la velocidad de sedimentación en un tramo comprendido entre i y j , n corresponde al número de datos registrados en dicho tramo y $V_{s_i}(t_i)$ corresponde a la magnitud de la velocidad de sedimentación en el instante i .

Los resultados se compararán en términos de la velocidad terminal (V_{s_t}), la cual para el propósito de esta investigación se estima como la velocidad final del tramo estable de la curva del promedio acumulado de la velocidad vertical de la partícula a lo largo de la simulación, siendo este un valor representativo aproximado para el comportamiento de la partícula al alcanzar el límite inferior del tramo de análisis.

Para verificar la estabilización de la velocidad, se calcula el error periódico porcentual (Ecuación 18) entre el intervalo k y el intervalo $k - 1$. Para garantizar la estabilidad de los resultados se establece un límite estricto de 5% para cada caso evaluado.

$$E_p = \left| \frac{\bar{V}_{s,k} - \bar{V}_{s,k-1}}{\bar{V}_{s,k-1}} \right| * 100 \quad (18)$$

Donde E_p es el error periódico porcentual, $\bar{V}_{s,k}$ es la velocidad media del intervalo actual y $\bar{V}_{s,k-1}$ es la velocidad media del intervalo anterior.

Finalmente, cuando se comparan los resultados de un caso con un valor de referencia o el resultado de otro caso, se realiza mediante error porcentual (Ecuación 19).

$$Error \% = \left| \frac{\bar{V}_{s,1} - \bar{V}_{s,2}}{\bar{V}_{s,2}} \right| * 100 \quad (19)$$

Donde Error % es el error porcentual, $\bar{V}_{s,1}$ es la velocidad obtenida del caso en análisis y, $\bar{V}_{s,2}$ es la velocidad de comparación.

4.2 Diseño experimental de los casos a evaluar

En esta sección se definen los casos de simulación considerados para el desarrollo de la investigación, los cuales se organizan en función de los objetivos específicos planteados. Cada grupo de casos busca evaluar una etapa particular del estudio, comenzando por la validación del modelo numérico, para luego analizar el efecto de la morfología de las partículas, y por último el efecto de la estratificación salina sobre la velocidad de sedimentación de las partículas.

4.2.1 Validación del modelo:

La primera etapa del diseño experimental corresponde a la validación del modelo numérico mediante su comparación con el experimento de referencia reportado por Khatmullina e Isachenko (2017). Para ello, se reproducen condiciones equivalentes a un medio homogéneo, sin estratificación, con el objetivo de verificar que el modelo sea capaz de representar adecuadamente la sedimentación de partículas en un medio fluido simulado representativo de agua destilada.

Para esta etapa se definen 2 casos de validación, el caso 1.A corresponderá a una partícula esférica y el caso 1.B corresponderá a una partícula cilíndrica. Ambas partículas se modelan a partir de las propiedades físicas descritas en la sección del modelamiento de la geometría del estanque y de las partículas.

Los parámetros para los casos a evaluar se presentan en la tabla 3. Estos fueron estimados a partir del estudio de referencia y se usan como criterio de comparación para evaluar la coherencia del modelo numérico.

Tabla 3. Parámetros para casos a evaluar

Caso	Forma partícula	Diámetro Partícula	Densidad Partícula	Densidad del fluido
Caso 1.A	Esfera	4 mm	1131 kg/m ³	1000 kg/m ³
Caso 1.B	Cilindro	4 mm	1131 kg/m ³	1000 kg/m ³

El propósito de esta etapa es reproducir la tendencia general del fenómeno físico en estudio. En particular se espera que el caso 1.A, asociado a la partícula esférica, presente una velocidad de sedimentación mayor que el caso 1.B, asociado a la partícula cilíndrica. De acuerdo con el estudio de

referencia, se consideran valores esperados de velocidades de sedimentación de 100 mm/s para la esfera y de 85 mm/s para el cilindro.

La comparación entre los resultados del modelo y los valores experimentales de referencia se realiza utilizando la velocidad media de sedimentación obtenida según el procedimiento descrito en la sección de criterios de análisis de resultados. Para cada caso, se calcula la diferencia porcentual respecto del valor de referencia correspondiente, considerando 100 mm/s para la esfera y 85 mm/s para el cilindro.

Estos valores no corresponden a mediciones puntuales tabuladas para partículas con las mismas dimensiones utilizadas en el modelo, sino a estimaciones obtenidas a partir de los resultados gráficos presentados por Khatmullina e Isachenko (2017). Por esta razón, la evaluación del modelo no se basa en un intervalo de aceptación, sino en la magnitud de la diferencia porcentual, la estabilidad de la respuesta y la capacidad del modelo para reproducir la tendencia física observada experimentalmente. Además, se debe considerar las diferencias asociadas a las propiedades de las partículas y del fluido, la geometría real de las partículas, su orientación durante el descenso y las simplificaciones propias del modelo numérico generado.

4.2.2 Evaluación del efecto de la forma de las partículas

Para esta etapa se definen dos casos, el caso 2.A, correspondiente a una partícula esférica, y el caso 2.B, correspondiente a una partícula cilíndrica. Para ambos casos, el fluido se representa mediante un perfil de densidad lineal en dirección vertical, considerando una densidad superior de 1000 kg/m³ y una densidad inferior de 1030 kg/m³. Las partículas consideradas corresponden a formas idealizadas regulares, con el fin de aislar el efecto de la morfología sobre el proceso de sedimentación. En ambos casos se considera un diámetro característico de 4 mm con una relación L/D = 1 para el caso del cilindro.

El propósito de esta etapa será comparar los resultados obtenidos en ambos casos. Dado que los parámetros (Tabla 4) son similares, las diferencias observadas en la velocidad de sedimentación permitirán evaluar la influencia de la geometría de las partículas dentro de una misma clase de tamaño nominal. La comparación entre ambos casos se realiza a partir de la posición vertical, la velocidad vertical, la velocidad media de sedimentación y el error periódico, calculados según los criterios de análisis de resultados definidos previamente.

Tabla 4. Parámetros para casos a evaluar

Caso	Forma partícula	Diámetro Partícula	Perfil Densidad	Densidad superior del fluido	Densidad inferior del fluido
Caso 2.A	Esfera	4 mm	Lineal	1000 kg/m ³	1030 kg/m ³
Caso 2.B	Cilindro	4 mm	Lineal	1000 kg/m ³	1030 kg/m ³

4.2.3 Evaluación del efecto de la estratificación del medio

Para evaluar la influencia de la estratificación salina sobre la sedimentación de las partículas, se consideran dos configuraciones verticales de densidad del medio fluido. En todos los casos se mantiene constante la geometría del estanque, el dominio computacional, las condiciones numéricas generales y las características morfológicas de las partículas. La primera configuración corresponde a una interfaz ubicada a 0.6 m sobre el fondo del estanque, la cual separa una capa superior de densidad igual a 1000 kg/m³ y una capa inferior de densidad igual a 1030 kg/m³. La segunda configuración mantiene las mismas densidades, pero considera la interfaz ubicada a 0.8 m sobre el fondo.

Los casos por evaluar (Tabla 5) quedan definidos por el caso 3.A y 3.B para la primera configuración planteada y los casos 3.C y 3.D para segunda configuración planteada. Para los casos mencionados, los casos 3.A y 3.C corresponden a la partícula esférica, mientras que los casos 3.B y 3.D corresponden a la partícula cilíndrica. El propósito de esta etapa será analizar cómo el aumento del gradiente de densidad

del medio modifica la velocidad de sedimentación de las partículas, permitiendo evaluar de manera conjunta el efecto del medio estratificado y de la morfología sobre el descenso de la partícula.

Con el propósito de complementar los resultados obtenidos, se compararán los resultados tanto de la esfera como del cilindro para el medio con la interfaz a 0.8 m del fondo con sus resultados teóricos, estimados analíticamente mediante las formulaciones de la sección Marco Teórico, en específico desde la ecuación (1) hasta la ecuación (9).

Tabla 5. Parámetros para casos a evaluar

Caso	Forma partícula	Diámetro Partícula	Densidad Partícula	Perfil Densidad	Densidad superior del fluido	Densidad inferior del fluido
Caso 3.A	Esfera	4 mm	1131 kg/m ³	Interfaz a 0.6 m	1000 kg/m ³	1030 kg/m ³
Caso 3.B	Cilindro	4 mm	1131 kg/m ³	Interfaz a 0.6 m	1000 kg/m ³	1030 kg/m ³
Caso 3.C	Esfera	4 mm	1131 kg/m ³	Interfaz a 0.8 m	1000 kg/m ³	1030 kg/m ³
Caso 3.D	Cilindro	4 mm	1131 kg/m ³	Interfaz a 0.8 m	1000 kg/m ³	1030 kg/m ³

En conjunto, la batería de simulaciones permite evaluar progresivamente la capacidad del modelo para representar la sedimentación de partículas de PCL, primero en condiciones homogéneas y luego bajo distintas configuraciones de estratificación salina. La Figura 3 presenta una representación esquemática de los perfiles de densidad considerados.

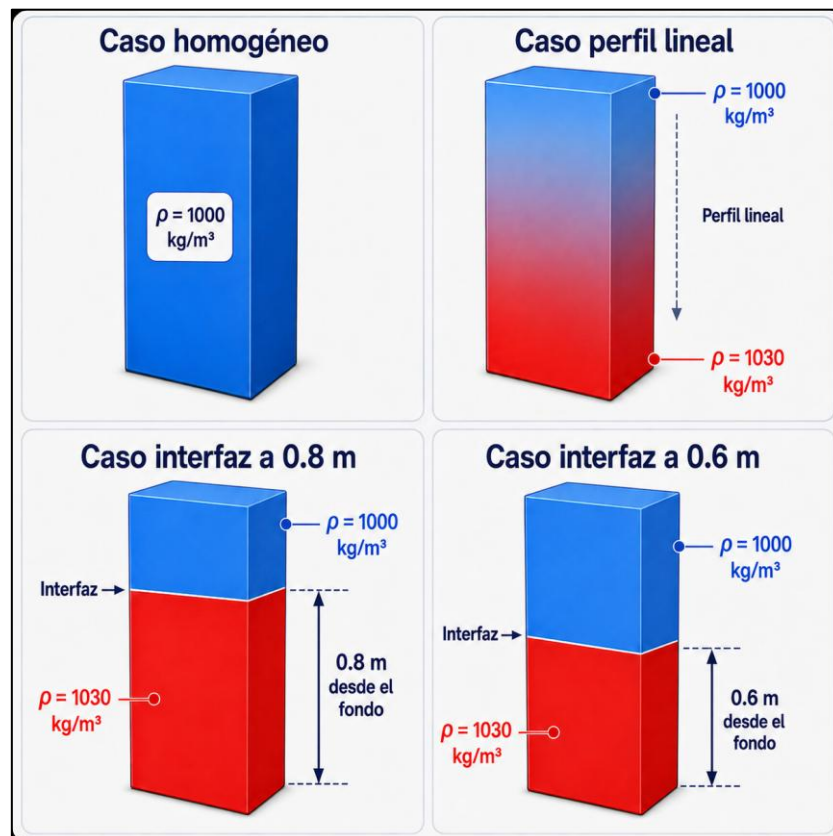


Figura 3. Representación esquemática de los perfiles de densidad considerados

5 Resultados.

5.1 Resultados de la validación del modelo

5.1.1 Diseño del modelo base

El desarrollo del modelo base de sedimentación en un medio homogéneo permitió verificar el correcto acoplamiento entre OpenFOAM y YADE, revisar la estabilidad temporal del movimiento de la partícula y comprobar que la configuración numérica fuera capaz de representar adecuadamente el fenómeno de sedimentación. Esta etapa fue fundamental para asegurar que la partícula respondiera de forma coherente a las fuerzas hidrodinámicas entregadas por el fluido y que la trayectoria, velocidad y aceleración presentaran una evolución física razonable y coherente durante el desarrollo de la simulación.

A partir de este modelo base, se realizó un proceso de escalamiento y sensibilización numérica, ajustando progresivamente la geometría del dominio, la discretización de la malla, el paso de tiempo, el intervalo de escritura de resultados y los parámetros utilizados en YADE. Durante este proceso se evaluó la influencia de estas variables sobre la estabilidad de la simulación, la respuesta de la velocidad de sedimentación y el costo computacional asociado. De esta forma, fue posible definir una configuración común para todos los casos posteriores, manteniendo un balance adecuado entre estabilidad numérica, resolución temporal y eficiencia computacional.

5.1.2 Validación del modelo para una partícula esférica

Para el caso de la partícula esférica en medio homogéneo, se presenta inicialmente la evolución de la posición vertical en función del tiempo (Figura 4). La partícula comienza su movimiento desde una altura de 1 m, correspondiente a la posición inicial definida para la caída dentro del estanque. A medida que avanza la simulación, la esfera desciende de forma continua hasta alcanzar el límite de análisis establecido en 0.2 m sobre el fondo del estanque.

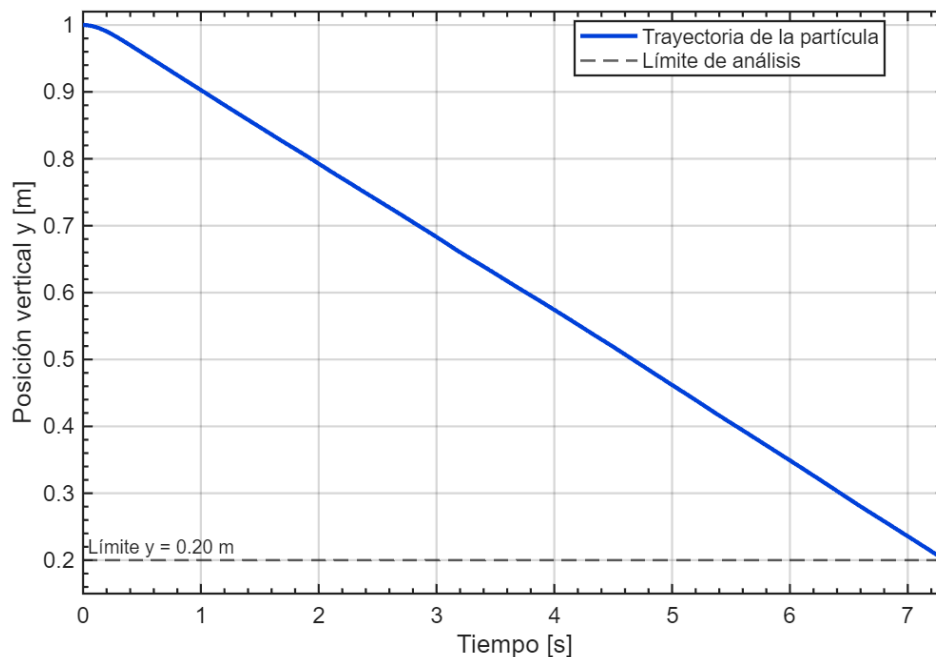


Figura 4. Posición vertical de la partícula esférica en medio homogéneo (Caso 1.A)

La curva de posición vertical evidencia una trayectoria descendente regular y prácticamente lineal luego de los primeros instantes de la simulación. Esta tendencia indica que después de una etapa inicial de aceleración, la partícula alcanza rápidamente una condición de movimiento aproximadamente uniforme, consecuencia del equilibrio de fuerzas entre el peso aparente de la partícula y la resistencia hidrodinámica ejercida por el fluido.

El tiempo final analizado para la esfera corresponde a 7.32 s, instante en que la partícula llega al límite inferior definido para el análisis. La forma de la curva es coherente con el comportamiento esperado para una partícula que sedimenta en un medio homogéneo, debido a que no existen cambios de densidad del fluido que alteren bruscamente el movimiento de la partícula durante su caída.

Posteriormente, se analiza la velocidad vertical de la esfera en función del tiempo (Figura 5). En los primeros instantes se observa una aceleración rápida desde el reposo hasta alcanzar velocidades cercanas a 110 mm/s. Esta etapa inicial representa el balance dinámico de fuerzas que ocurre entre el peso aparente de la partícula y la resistencia hidrodinámica ejercida por el fluido. Luego de la etapa transitoria, la velocidad se mantiene oscilando en torno a un valor medio aproximadamente constante.

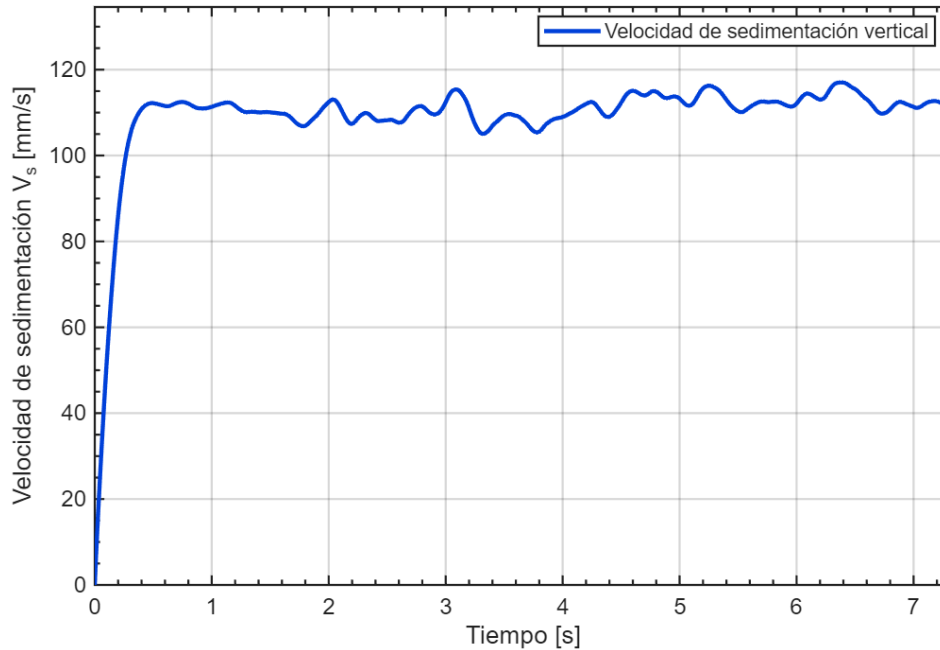


Figura 5. Velocidad de sedimentación de la partícula esférica en medio homogéneo (Caso 1.A)

Las oscilaciones observadas en la figura son esperables en una simulación CFD/DEM, debido al acoplamiento fluido-partícula, al cálculo de las fuerzas involucradas y a la evolución temporal del movimiento. Sin embargo, estas variaciones no modifican la tendencia general de la respuesta. El comportamiento observado indica que la esfera alcanza una velocidad de sedimentación representativa del caso homogéneo.

Complementando el análisis de la velocidad instantánea, se expone el resultado del promedio acumulado de la velocidad vertical (Figura 6). Esta figura permite evaluar la tendencia global del resultado y reducir la influencia de fluctuaciones locales presentes en el comportamiento original. El comportamiento observado evidencia que el promedio acumulado se estabiliza progresivamente a medida que avanza la simulación, convergiendo en un valor cercano a 111 mm/s.

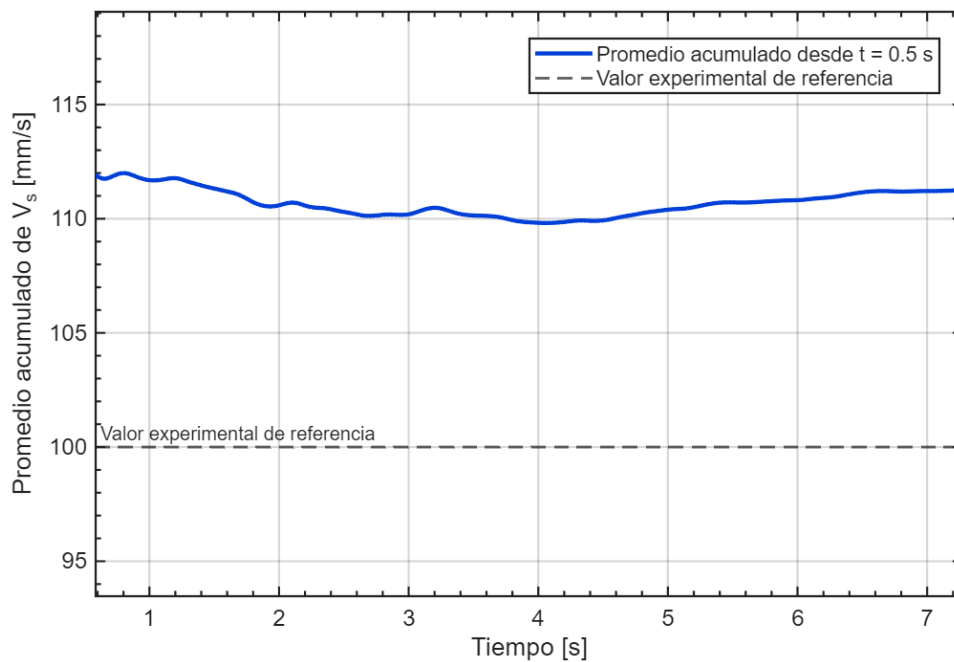


Figura 6. Promedio acumulado de la velocidad de sedimentación del tramo estable de la partícula esférica en medio homogéneo (Caso 1.A)

El resultado obtenido se compara con el valor experimental de referencia de 100 mm/s establecido para la esfera. La velocidad media obtenida mediante el modelo posee una diferencia porcentual del 11 % respecto del valor de referencia. Esta diferencia se considera razonable y permite concluir que el modelo reproduce adecuadamente la magnitud de la velocidad de sedimentación.

Finalmente, se analiza el error periódico asociado a la estabilización de la respuesta. Este indicador permite cuantificar la variación relativa entre intervalos consecutivos y verificar que los resultados obtenidos presentan una tendencia estable. Para el caso de la esfera, el error periódico (Figura 7) se mantiene constante durante todo el tramo final bajo el límite de referencia de 5 %. Este resultado confirma que la respuesta de la esfera se encuentra estabilizada al finalizar el tramo analizado.

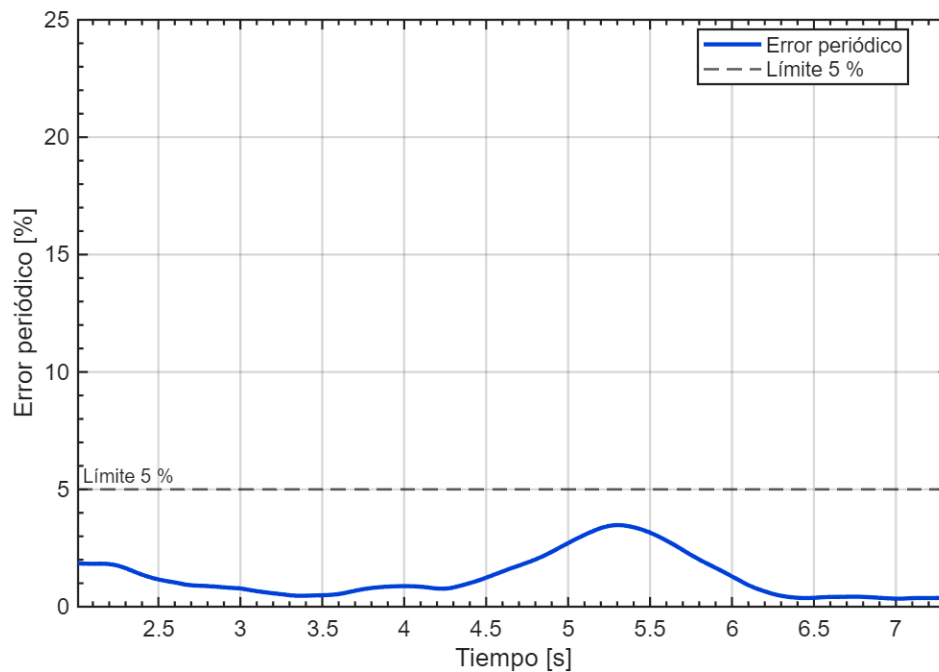


Figura 7. Error periódico de la velocidad de sedimentación de la partícula esférica en medio homogéneo (Caso 1.A)

5.1.3 Validación del modelo para una partícula cilíndrica

Para el caso de la partícula cilíndrica en medio homogéneo, se presenta inicialmente la evolución de la posición vertical en función del tiempo (Figura 8). La partícula comienza su movimiento desde una altura de 1 m y desciende de manera continua durante el desarrollo de la simulación. A diferencia del caso esférico, el cilindro presenta un tiempo de descenso mayor y alcanza el tramo final de análisis en 9.15 s. Este comportamiento es coherente con una menor velocidad de sedimentación asociada a su geometría, debido a que la forma cilíndrica genera una interacción diferente con el fluido.

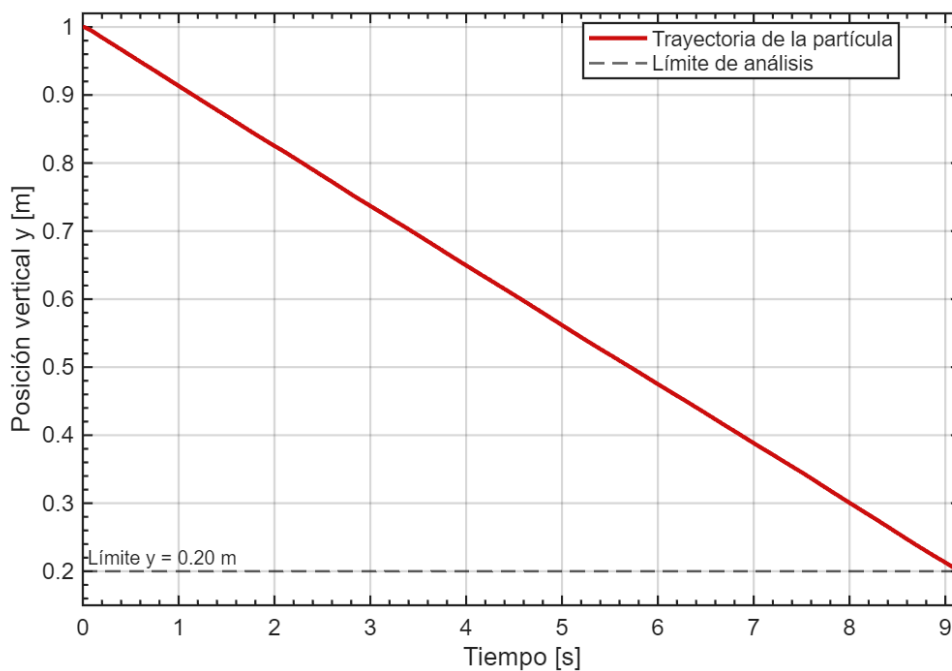


Figura 8. Posición vertical de la partícula cilíndrica en medio homogéneo (Caso 1.B)

La curva de posición vertical muestra una trayectoria descendente regular, con una tendencia prácticamente lineal. Esto indica que el cilindro alcanza una condición de movimiento aproximadamente uniforme. Esta condición se produce como consecuencia del equilibrio entre el peso efectivo de la partícula y la resistencia hidrodinámica del fluido. La ausencia de cambios de densidad en el medio homogéneo permite que la trayectoria no presente variaciones bruscas, por lo que el descenso ocurre de manera continua hasta el final del tramo analizado.

Posteriormente, se analiza la velocidad de sedimentación vertical del cilindro en función del tiempo (Figura 9). En esta figura se evidencia cómo en los primeros instantes la partícula posee una rápida aceleración desde el reposo hasta alcanzar velocidades cercanas entre 85 y 90 mm/s. Luego de esta etapa, la velocidad se mantiene oscilando alrededor de un valor medio aproximadamente constante. Al igual que en el caso de la esfera, las oscilaciones son esperables debido a las razones previamente explicadas, sin embargo, estas pueden aumentar en cantidad debido a la rotación del cuerpo cilíndrico durante la caída.

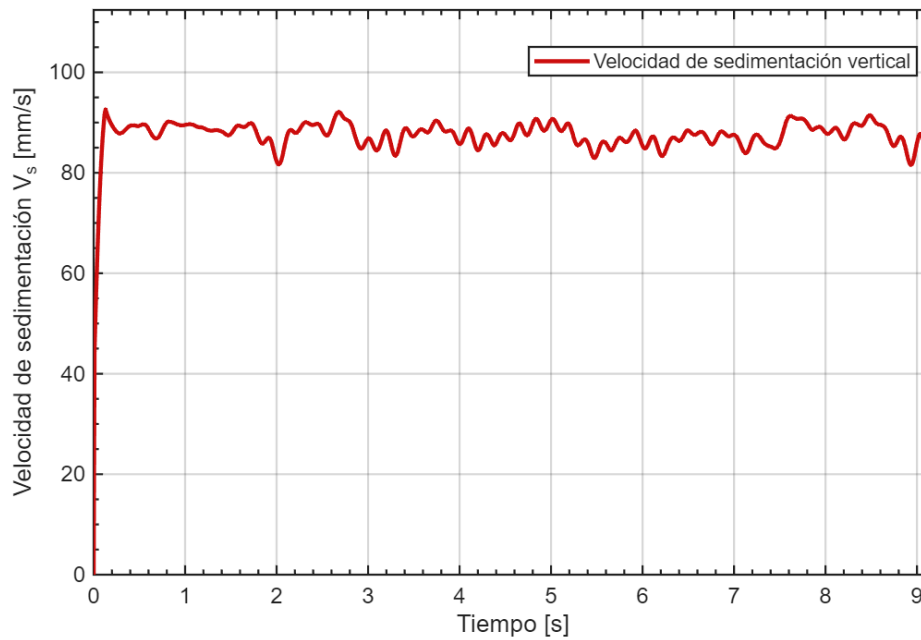


Figura 9. Velocidad de sedimentación de la partícula cilíndrica en medio homogéneo (Caso 1.B)

La tendencia observada evidencia valores de sedimentación menores que los obtenidos para el caso de la esfera, lo cual coincide con el comportamiento físico esperado y con el estudio de referencia. Además, esto nos permite comprobar que el modelo no solo reproduce una magnitud adecuada de velocidad, sino también la tendencia esperable para ambas partículas.

Complementando el análisis, se presenta el promedio acumulado de la velocidad de sedimentación vertical (Figura 10). Para el caso del cilindro, el promedio acumulado se estabiliza progresivamente a medida que avanza la simulación, convergiendo hacia un valor cercano a 88 mm/s.

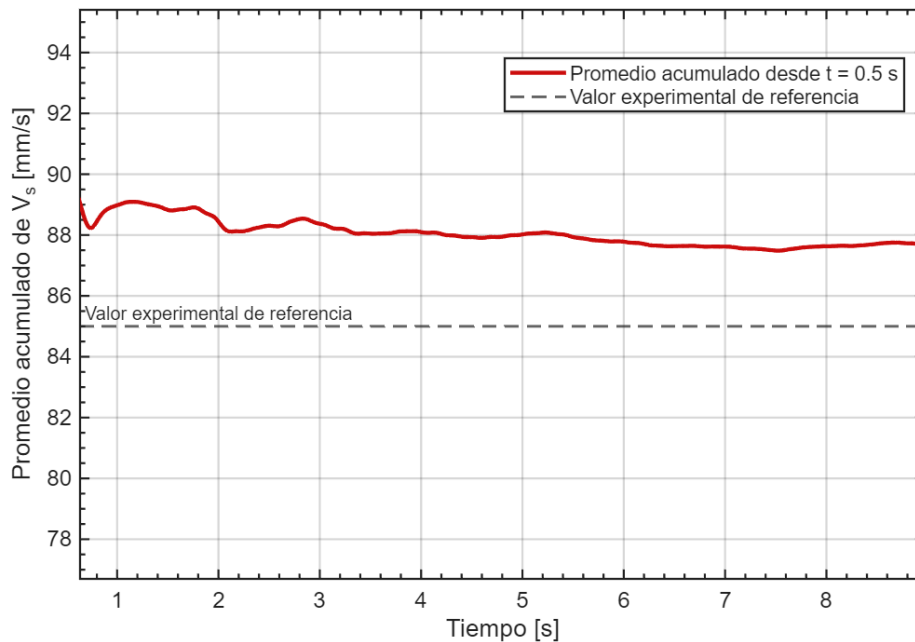


Figura 10. Promedio acumulado de la velocidad de sedimentación del tramo estable de la partícula cilíndrica en medio homogéneo (Caso 1.B)

El resultado obtenido se compara con el valor experimental de referencia de 85 mm/s establecido para el cilindro. La velocidad media obtenida mediante el modelo corresponde a 88 mm/s, lo que representa una diferencia porcentual de 3,6 % respecto del valor de referencia. Esta diferencia es reducida y permite concluir que el modelo reproduce adecuadamente la magnitud de la velocidad de sedimentación.

Finalmente, se analiza el error periódico asociado a la estabilización de la respuesta. La figura 11 evidencia cómo este indicador tiende a estabilizarse durante el tramo final de la simulación, manteniéndose bajo el límite de referencia del 5 % durante todo el tramo estable analizado.

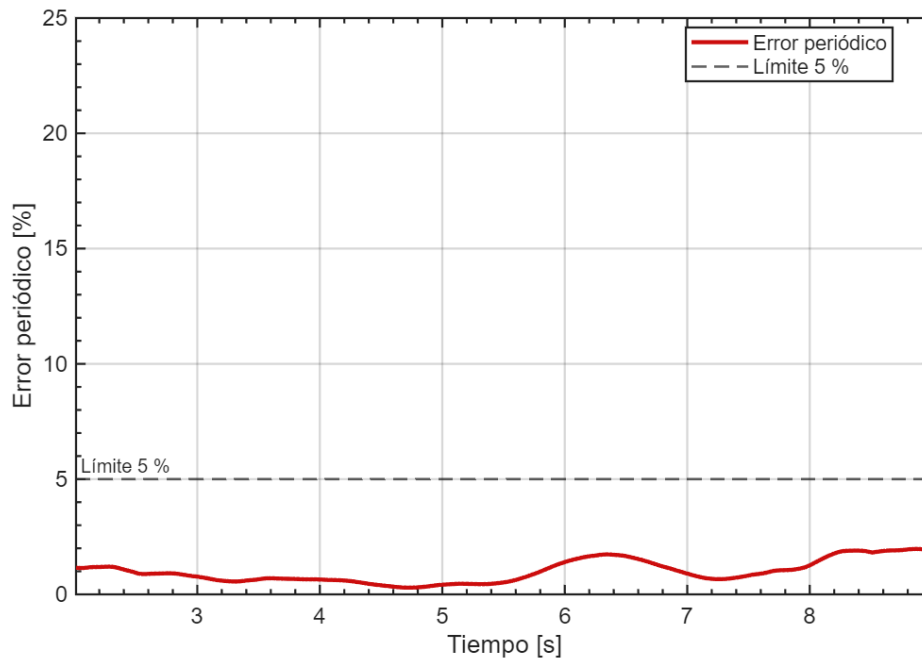


Figura 11. Error periódico de la velocidad de sedimentación de la partícula cilíndrica en medio homogéneo (Caso 1.B)

En resumen, la simulación del cilindro reproduce adecuadamente el comportamiento esperado en un medio homogéneo. La partícula presenta una trayectoria descendente continua, una velocidad de sedimentación estable y una diferencia porcentual de 3.6 % respecto del valor experimental de referencia. Además, el promedio acumulado converge hacia un valor representativo y el error periódico se mantiene bajo el límite establecido durante el tramo final. Con base en estos resultados, el modelo numérico se considera validado para la partícula cilíndrica.

Los resultados obtenidos para ambos casos de validación se resumen en la Tabla 6. En ella se presentan los valores de referencia, la velocidad media obtenida mediante el modelo numérico y el error porcentual respectivo.

Tabla 6. Resultados validación del modelo

Caso	Forma partícula	V_{st} referencia experimental	V_{st} modelo	Error %
Caso 1.A	Esfera	100 mm/s	111 mm/s	11 %
Caso 1.B	Cilindro	85 mm/s	88 mm/s	3.6 %

5.2 Evaluación del efecto de la forma de las partículas

En esta etapa se analiza el efecto de la forma de la partícula sobre su velocidad de sedimentación en un medio estratificado lineal. La simulación de los casos estipulados evidencia en términos de la posición vertical (Figura 12), un descenso de forma continua desde la posición inicial hasta alcanzar el límite de análisis, sin embargo, la esfera alcanza dicho límite en un tiempo menor que el cilindro, con un tiempo de 7.81 s, mientras que para el cilindro el tiempo de descenso corresponde a 9.30 s.

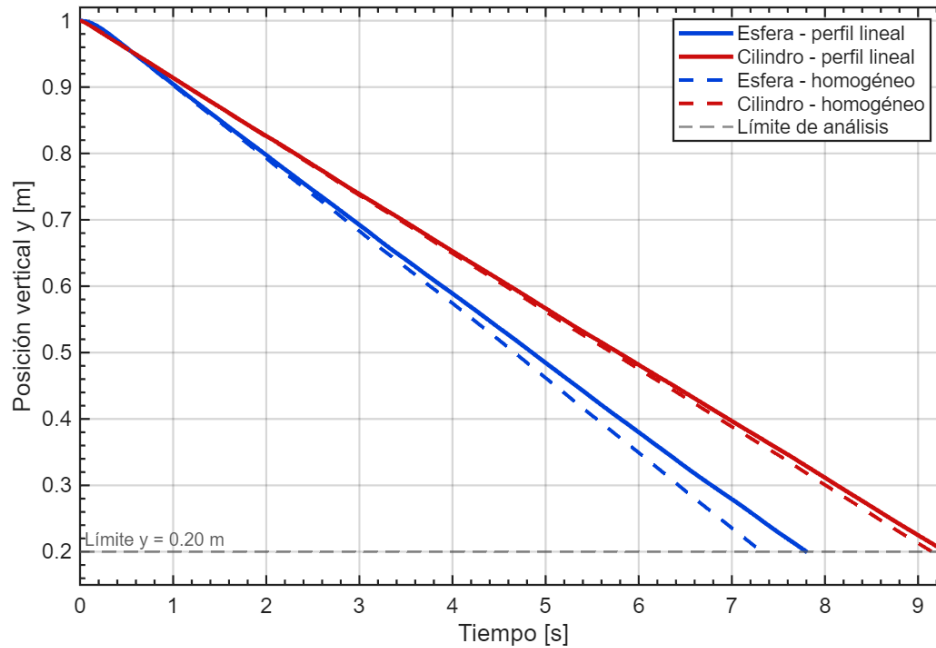


Figura 12. Comparación de la posición vertical de la partícula esférica (Caso 2.A) y cilíndrica (Caso 2.B) en medio estratificado lineal

En la misma figura se incluyen los resultados de los casos homogéneos presentados anteriormente, para el caso de la esfera se aprecia una separación clara entre el caso homogéneo y el caso con perfil lineal, donde la estratificación retrasa el descenso de la partícula en un tiempo de 0.49 s. Para el caso del cilindro, la diferencia es menos marcada, lo que indica que la estratificación del medio genera un efecto menor sobre su descenso.

Si analizamos el primer tramo del descenso (Figura 13), se observan diferencias en la etapa inicial de la aceleración de ambas partículas. En los primeros instantes, el cilindro presenta una aceleración mayor y alcanza antes una condición cercana a su velocidad terminal, lo que se refleja en una disminución más rápida de su posición vertical respecto a la esfera. No obstante, esta diferencia se reduce progresivamente y las trayectorias se cruzan a partir de los 0.5 s. A partir de este instante, la esfera presenta un descenso más pronunciado, en el cual al término del primer segundo de caída ha recorrido una distancia vertical mayor en comparación con el cilindro.

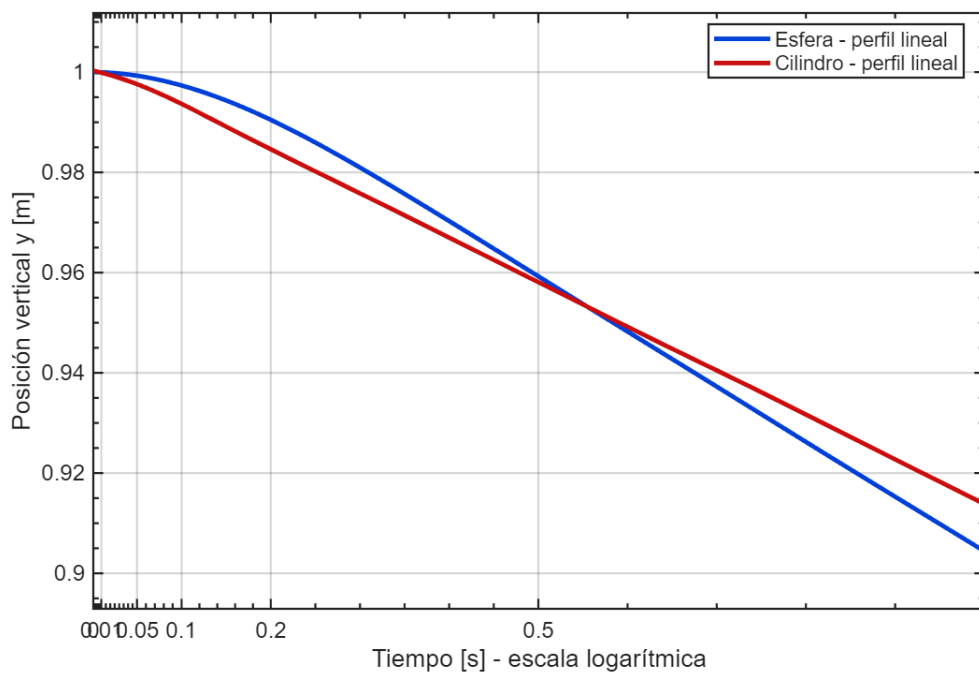


Figura 13. Comparación de la posición vertical de la partícula esférica (Caso 2.A) y cilíndrica (Caso 2.B) en los primeros instantes de la simulación

En complemento, el comportamiento tanto de la velocidad de sedimentación en función del tiempo (Figura 14), como el promedio acumulado (Figura 15) evidencia ambos cuerpos presentan una aceleración rápida desde el reposo, siendo mayor para el caso del cilindro. Posteriormente existe una etapa donde la velocidad oscila entre valores demostrando una tendencia a su disminución durante el transcurso de la simulación. Al analizar, por una parte, el caso de la esfera se observa que la estratificación reduce la velocidad de sedimentación de 111 mm/s hasta los 103 mm/s, lo que equivale a una reducción de 7.2 %. Por otra parte, el cilindro disminuye la velocidad desde los 88 mm/s hasta los 86 mm/s, lo que corresponde a una reducción del 2.2 %.

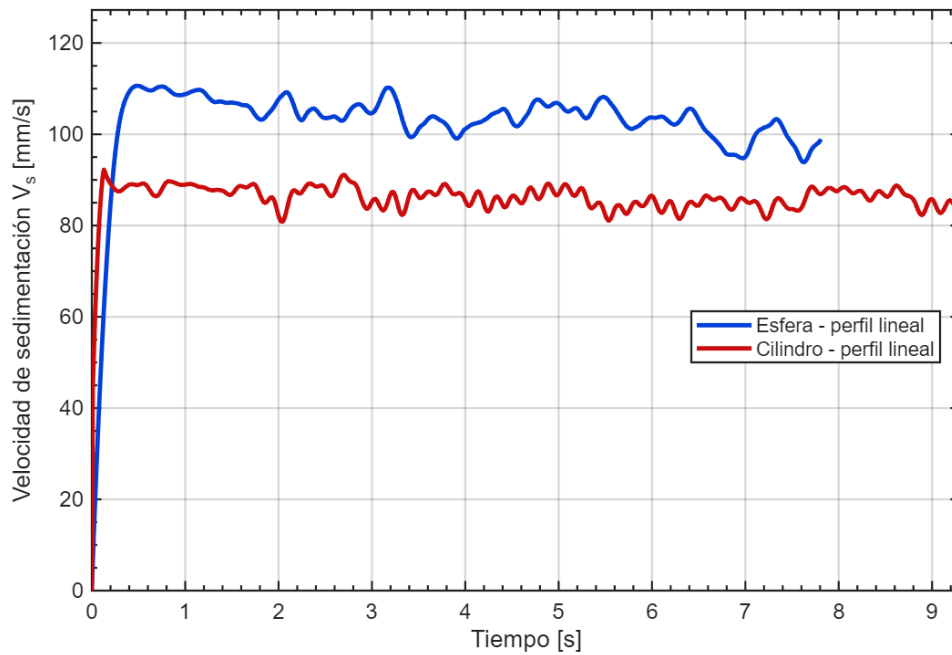


Figura 14. Comparación de la velocidad de sedimentación de la partícula esférica (Caso 2.A) y cilíndrica (Caso 2.B) en medio estratificado lineal

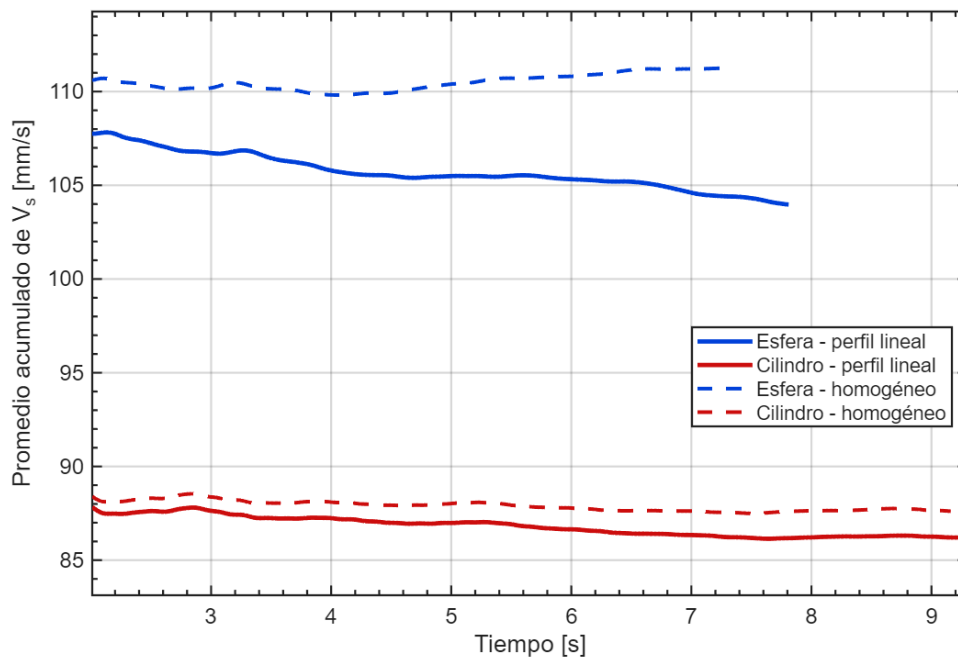


Figura 15. Comparación del promedio acumulado de la velocidad de sedimentación del tramo estable de la partícula esférica (Caso 2.A) y cilíndrica (Caso 2.B) en medio estratificado lineal

Estos resultados son coherentes con el efecto teórico esperado de la estratificación del medio, debido a que a medida que la partícula desciende, el aumento progresivo de la densidad local del fluido incrementa el empuje y reduce el peso aparente de la partícula. Como consecuencia, se reduce la velocidad de sedimentación.

La Figura 16 presenta el error periódico para ambos casos, se observa que tanto la esfera como el cilindro mantienen valores inferiores al límite de 5% durante el tramo estable. Esto indica que las respuestas alcanzan una condición estable y que los promedios acumulados pueden considerarse representativos de la velocidad media de sedimentación.

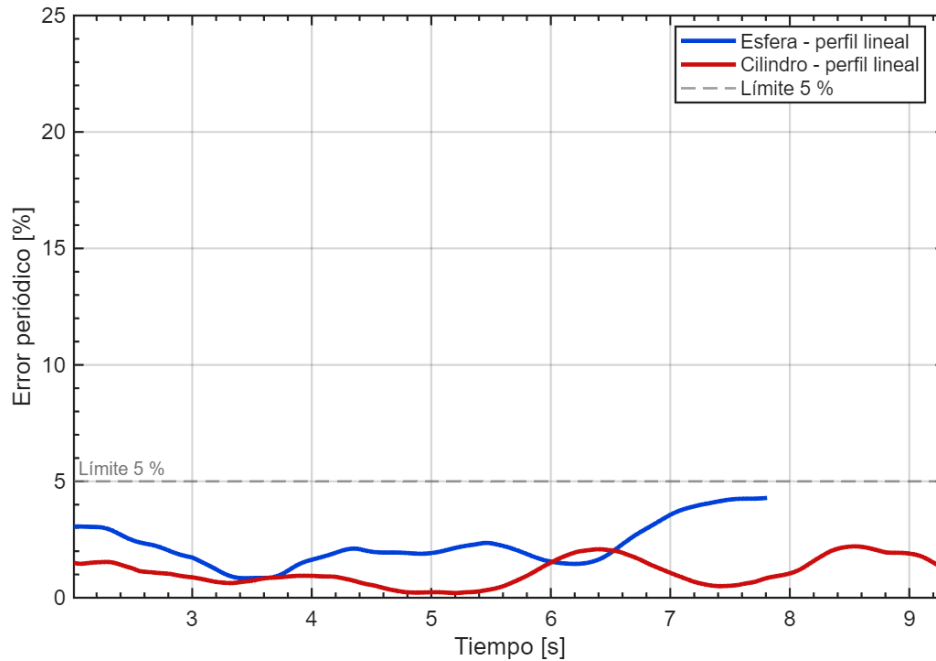


Figura 16. Comparación del error periódico de la velocidad de sedimentación de la partícula esférica (Caso 2.A) y cilíndrica (Caso 2.B) en medio estratificado lineal

Los resultados obtenidos para ambos casos se resumen en la Tabla 7. En ella se presentan los valores de tiempo de sedimentación, velocidad terminal de sedimentación y la diferencia con su respectivo caso homogéneo.

Tabla 7. Resultado de las simulaciones de los casos para el estudio del efecto de la forma

Caso	Forma partícula	Tiempo de sedimentación	V_{st} perfil lineal	V_{st} homogéneo	Diferencia %
Caso 2.A	Esfera	7.81 s	103 mm/s	111 mm/s	7.2 %
Caso 2.B	Cilindro	9.30 s	86 mm/s	88 mm/s	2.2 %

5.3 Evaluación del efecto de la estratificación del medio

5.3.1 Resultado para la partícula esférica

En esta etapa se analiza el efecto de la estratificación del medio en la velocidad de sedimentación de las partículas esférica y cilíndrica. La simulación de los casos estipulados para la partícula esférica evidencia en términos de la velocidad de sedimentación (Figura 17), que su comportamiento se ve influenciado directamente cuando ocurre el cambio de densidad en comparación con su respectivo caso homogéneo.

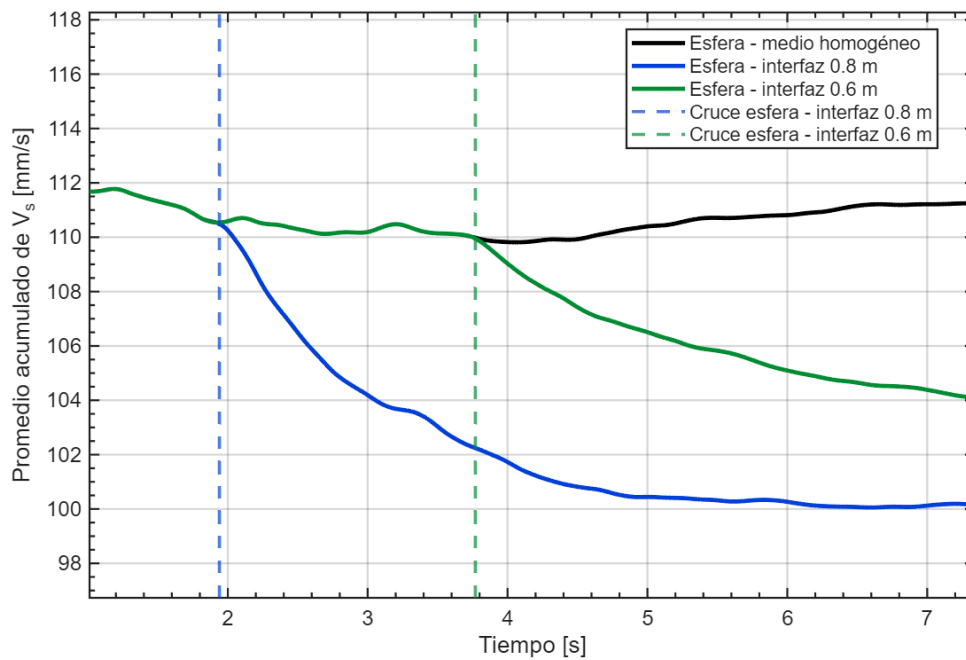


Figura 17. Promedio acumulado de la velocidad de sedimentación del tramo estable de la partícula esférica en medios estratificados con interfaces ubicadas a 0.6 m (Caso 3.A) y 0.8 m (Caso 3.C) en comparación con su respectivo caso homogéneo (Caso 1.A)

Durante el tramo inicial, las tres curvas presentan valores similares, cercanos a 110 mm/s, debido a que la esfera sedimenta en una zona donde la densidad del fluido corresponde a 1000 kg/m^3 . Una vez que la partícula atraviesa la interfaz e ingresa en la capa inferior de mayor densidad, el promedio acumulado de la velocidad disminuye progresivamente en ambos casos estratificados, mientras que en el caso homogéneo se mantiene aproximadamente constante. Para la interfaz ubicada a 0.8 m desde el fondo, el cruce ocurre primero, por lo que la reducción se manifiesta de manera anticipada y más pronunciada que en el caso con interfaz a 0.6 m. En el primer caso, tiende a estabilizarse en un valor cercano a 100 mm/s. Este comportamiento se explica porque el aumento de la densidad del fluido incrementa la fuerza de empuje, disminuye el peso aparente de la partícula y reduce la fuerza que impulsa su descenso. Posteriormente, el peso, el empuje y la resistencia hidrodinámica tienden a equilibrarse, permitiendo que la partícula alcance una nueva velocidad terminal de sedimentación.

Complementariamente, la evolución de la posición vertical (Figura 18) permite observar cómo la ubicación de la interfaz modifica la trayectoria de la esfera durante su descenso. Durante el tramo inicial, las tres curvas presentan trayectorias similares, debido a que la partícula se desplaza en una zona con densidad de 1000 kg/m^3 . Cuando la esfera atraviesa la interfaz ubicada a 0.8 m desde el fondo, aproximadamente a los 2 s, su trayectoria comienza a separarse de las correspondientes al caso homogéneo y al caso con interfaz a 0,6 m, como consecuencia de la disminución de su velocidad de sedimentación. Posteriormente, al alcanzar la interfaz ubicada a 0.6 m, aproximadamente a los 3.8 s, esta trayectoria también comienza a separarse del caso homogéneo. De este modo, el caso homogéneo presenta el descenso más rápido, mientras que los casos estratificados muestran un mayor tiempo para alcanzar el límite inferior de análisis.

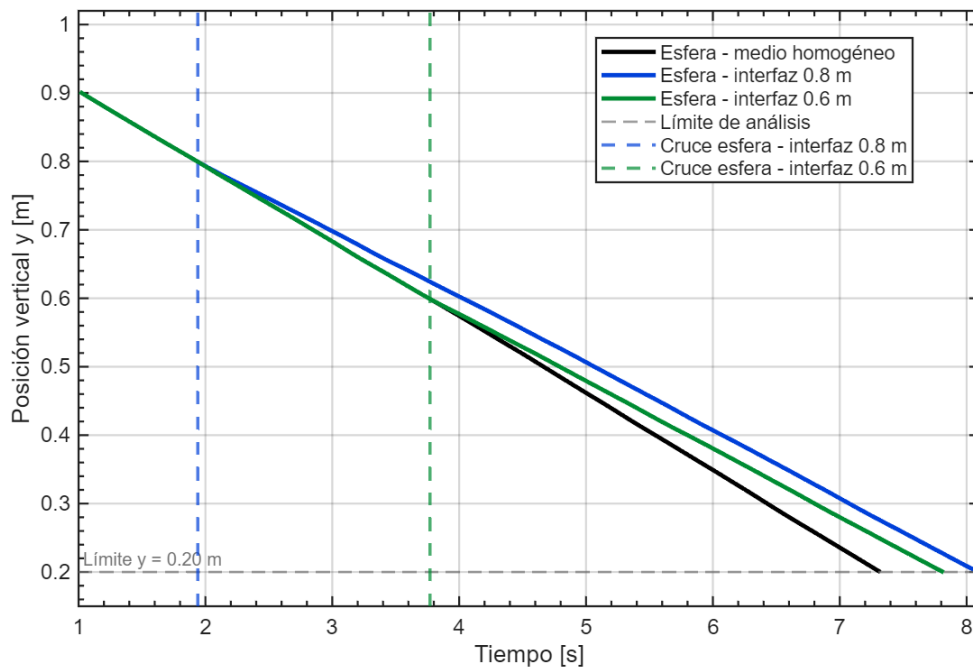


Figura 18. Posición vertical de la partícula esférica en medios estratificados con interfaces ubicadas a los 0.6 m (Caso 3.A) y 0.8 m (Caso 3.C) en comparación con su respectivo caso homogéneo (Caso 1.A)

Asimismo, las tres curvas presentan una caída continua y sin cambios abruptos de posición, debido a que el efecto de la estratificación se manifiesta mediante una modificación progresiva de la pendiente de la trayectoria y no como una discontinuidad en el movimiento.

El análisis del comportamiento del error periódico (Figura 19) refleja el efecto transitorio producido cuando la esfera ingresa a la capa inferior de mayor densidad. Para el caso con la interfaz ubicada a 0.8 m, el error aumenta durante los primeros instantes del tramo analizado y alcanza valores superiores al límite del 5 %. Este incremento disminuye de manera progresiva y se mantiene bajo el límite establecido durante la etapa final del recorrido.

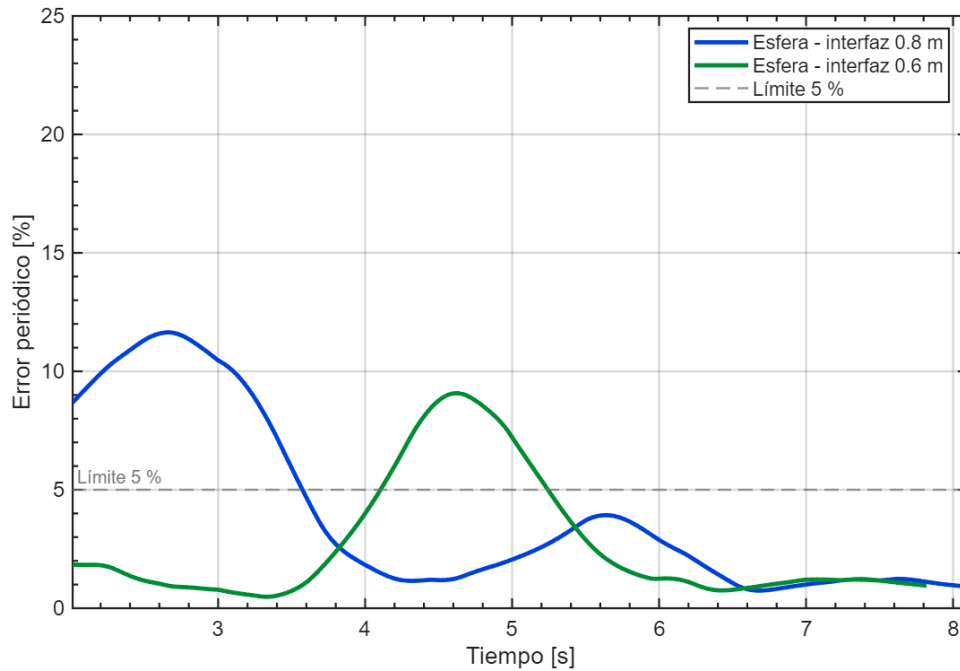


Figura 19. Comparación del error periódico de la velocidad de sedimentación de la partícula esférica en medios estratificados con interfaces ubicadas a 0.6 m (Caso 3.A) y 0.8 m (Caso 3.C)

El aumento del error en ambos casos se debe a la variación de la velocidad producida por el cambio de densidad al cruzar la interfaz, por lo que corresponde a una respuesta transitoria del sistema y no a una inestabilidad permanente del modelo.

Si se analiza el resultado simulado (Figura 20) para el caso de la interfaz ubicada a 0.8 m con su estimación teórica (Allen, 1985), calculada a partir de las formulaciones expuestas en el marco teórico de la presente memoria, se evidencia una concordancia en la evolución de la velocidad de sedimentación. Cerca de los 2 s, instante en que la partícula ingresa a la capa inferior de mayor densidad, ambas respuestas comienzan a disminuir. Al finalizar el tramo de análisis, el valor generado con el modelo converge hacia un valor cercano a 100 mm/s, mientras que la estimación teórica alcanza aproximadamente 95 mm/s.

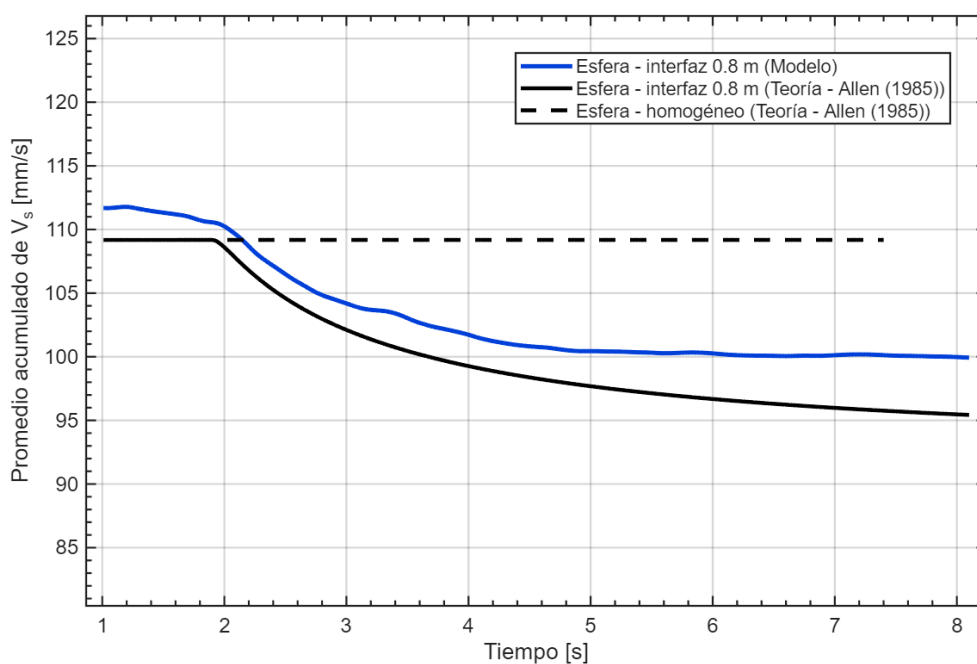


Figura 20. Comparación de la velocidad de sedimentación de la partícula esférica estimada mediante el modelo y con formulación analítica (Allen (1985)) en un medio estratificado con interfaz a 0.8 m (Caso 3.C)

En general, la curva simulada presenta una evolución coherente con la estimación teórica. Si bien la estimación teórica predice una reducción ligeramente mayor, las dos respuestas mantienen una tendencia similar durante el recorrido. Esto demuestra que el modelo numérico refleja adecuadamente el efecto físico esperado del fenómeno en estudio.

La Tabla 8 resume la comparación entre el caso homogéneo y los casos con interfaces ubicadas a 0.8 m y 0.6 m desde el fondo. En ella se presentan los principales resultados obtenidos para cada condición, incluyendo el tiempo requerido para completar el tramo de análisis y la velocidad media de sedimentación de la partícula. Por otra parte, la Tabla 9 presenta la comparación entre los resultados del modelo numérico y la estimación teórica para el caso con interfaz a 0.8 m. Esta tabla incluye los valores de velocidad obtenidos mediante ambos enfoques y la diferencia existente entre ellos.

Tabla 8. Comparación de los resultados de la partícula esférica para los medios estratificados con interfaces ubicadas a los 0.6 m y 0.8 m

Caso	Tipo de estratificación	Tiempo de sedimentación	V_{st}	Error % V_{st}
Caso 1.A	Homogéneo	7.32 s	111 mm/s	-
Caso 3.A	Interfaz 0.6 m	7.8 s	103 mm/s	7.2 %
Caso 3.C	Interfaz 0.8 m	8.1 s	100 mm/s	11 %

Tabla 9. Comparación de los resultados estimados con el modelo y con formulación analítica (Allen, 1985) para la partícula esférica para los medios estratificados con interfaz a los 0.8 m

Caso	Tipo de estratificación	Método	V_{st}	Error % V_{st}
Caso 3.C	Interfaz 0.8 m	Estimación modelo	100 mm/s	-
-	Interfaz 0.8 m	Estimación teórica (Allen, 1985)	95 mm/s	5 %

5.3.2 Resultado para la partícula cilíndrica

Los resultados de las simulaciones correspondientes a la partícula cilíndrica evidencian en términos de la velocidad de sedimentación (Figura 21), que durante el tramo inicial las tres curvas presentan valores similares, cercanos a 88–89 mm/s, debido a que el cilindro se desplaza en una zona con densidad de 1000 kg/m³. Una vez que la partícula atraviesa la interfaz e ingresa en la capa inferior de mayor densidad, el promedio acumulado de la velocidad disminuye progresivamente en ambos casos estratificados, mientras que en el caso homogéneo se mantiene aproximadamente constante. Para la interfaz ubicada a 0.8 m desde el fondo, la reducción comienza primero y el promedio acumulado tiende a estabilizarse en un valor cercano a 85 mm/s. En el caso con interfaz a 0.6 m, la disminución ocurre posteriormente y se alcanza un valor cercano a 86 mm/s.

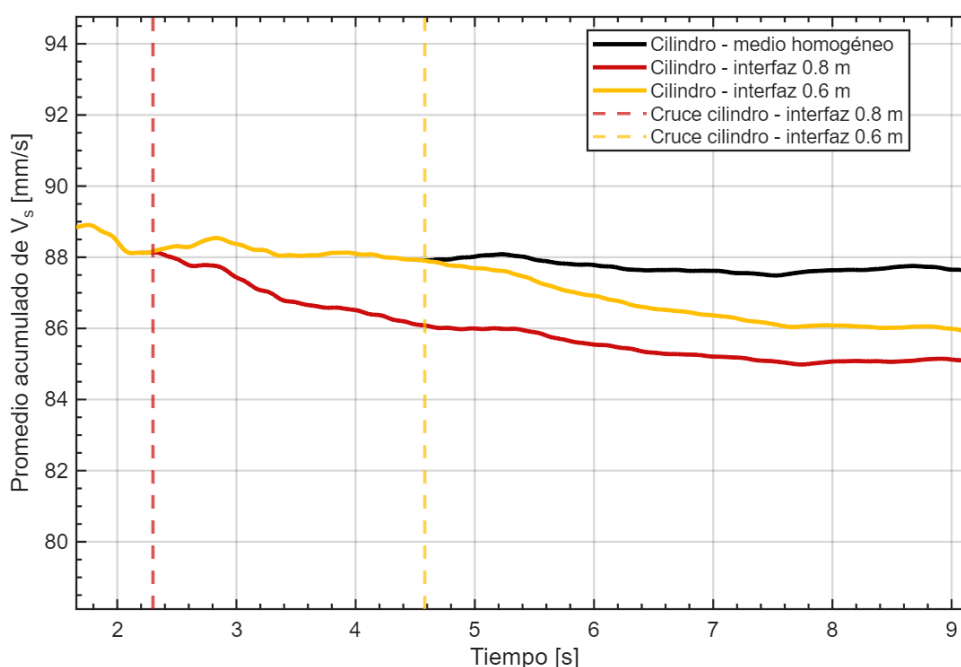


Figura 21. Promedio acumulado de la velocidad de sedimentación del tramo estable de la partícula cilíndrica en medios estratificados con interfaces ubicadas a los 0.6 m (Caso 3.B) y 0.8 m (Caso 3.D) en comparación a su respectivo caso homogéneo (Caso 1.B)

Complementariamente, la evolución de la posición vertical (Figura 22) muestra que las tres trayectorias son prácticamente coincidentes durante el tramo inicial, debido a que el cilindro se desplaza en una zona donde la densidad del fluido corresponde a 1000 kg/m³. Una vez la partícula atraviesa la interfaz ubicada a los 0.8 m desde el fondo a los 2.3 s, su trayectoria comienza a separarse progresivamente de las correspondientes al caso homogéneo y a la de la interfaz de 0.6 m, debido a la disminución de su velocidad de sedimentación en la capa inferior de mayor densidad. Posteriormente, para el caso en el cual la partícula cruza la interfaz a 0.6 m su trayectoria también comienza a diferenciarse del caso homogéneo disminuyendo su velocidad y retrasando su caída.

Las tres curvas mantienen una evolución continua y sin cambios abruptos de posición, evidenciando que la estratificación modifica gradualmente la pendiente de la trayectoria. En comparación con la partícula esférica, la separación entre las curvas es menos pronunciada, lo que indica una menor sensibilidad del cilindro frente al cambio de densidad del medio.

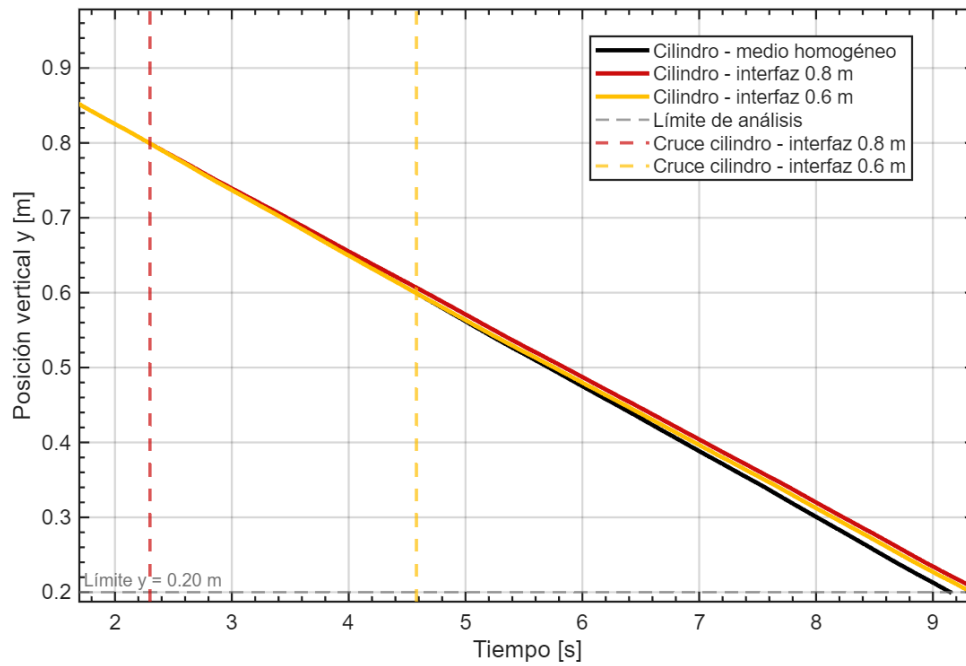


Figura 22. Posición vertical de la partícula cilíndrica en medios estratificados con interfaces ubicadas a los 0.6 m (Caso 3.B) y 0.8 m (Caso 3.D) en comparación a su respectivo caso homogéneo (Caso 1.B)

La evolución del error periódico (Figura 23) muestra que en ambos casos se mantiene bajo el límite de referencia del 5% durante todo el recorrido. Los pequeños aumentos que se observan están asociados a los momentos en que las partículas atraviesan sus respectivas interfaces, los cuales, con el paso del tiempo tienden a estabilizarse nuevamente con valores mínimos. Esto permite respaldar la estabilidad y representatividad de los resultados obtenidos del modelo.

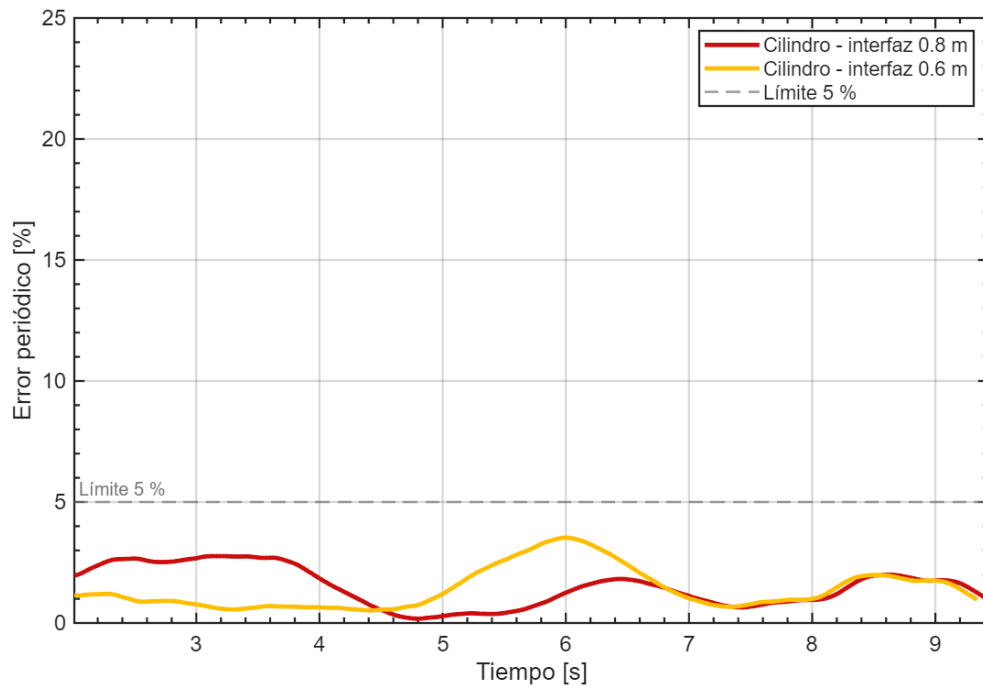


Figura 23. Comparación del error periódico de la velocidad de sedimentación de la partícula cilíndrica en medios estratificados con interfaces ubicadas a los 0.6 m (Caso 3.B) y 0.8 m (Caso 3.D)

La comparación entre el resultado obtenido del modelo y la estimación teórica (Allen, 1985) para el cilindro con interfaz ubicada a 0.8 m (Figura 24) evidencia una similitud cualitativa, aunque existe una diferencia en la magnitud de la velocidad de sedimentación. Con resultados en términos de la velocidad de sedimentación terminal de 85 mm/s para la simulación realizada por el modelo y de 64 mm/s para la estimación teórica. En ambos casos se observa una velocidad aproximadamente constante en el tramo inicial y una disminución progresiva después del ingreso a la capa de mayor densidad, lo que indica que tanto el modelo como la formulación teórica reproducen un efecto similar que tendría la estratificación en el cilindro, con disminuciones en sus velocidades cercanas a los 5 mm/s.

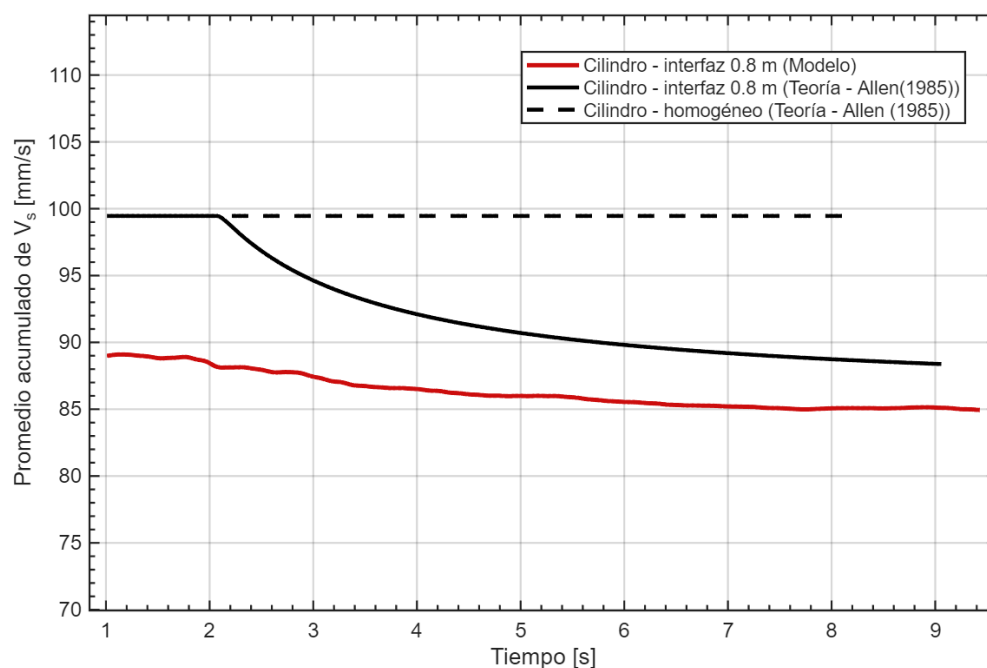


Figura 24. Comparación de la velocidad de sedimentación de la partícula cilíndrica estimada mediante el modelo y con la formulación analítica (Allen, 1985) en un medio estratificado con interfaz a los 0.8 m (Caso 3.D)

La Tabla 10 resume la comparación entre los casos de la partícula cilíndrica con interfaz ubicada a 0.8 m y 0.6 m. En ella se presentan los principales resultados obtenidos para cada configuración, incluyendo el tiempo total de sedimentación y la velocidad media alcanzada por la partícula. Por otra parte, la Tabla 11 presenta la comparación entre los resultados del modelo numérico y la estimación teórica para el cilindro en el caso con interfaz a 0.8 m. En esta tabla se incluyen las velocidades obtenidas mediante ambos enfoques y la diferencia entre ellas, permitiendo evaluar la concordancia cualitativa y cuantitativa del modelo respecto del comportamiento teórico esperado.

Tabla 10. Comparación de los resultados de la partícula cilíndrica para los medios estratificados con interfaces ubicadas a los 0.6 m y 0.8 m

Caso	Tipo de estratificación	Tiempo de sedimentación	V_{st}	Error % V_{st}
Caso 1.B	Homogéneo	9.15 s	88 mm/s	-
Caso 3.B	Interfaz 0.6 m	9.42 s	86 mm/s	2.3 %
Caso 3.D	Interfaz 0.8 m	9.50 s	85 mm/s	3.4 %

Tabla 11. Comparación de los resultados estimados con el modelo y con la formulación analítica (Allen, 1985) para la partícula cilíndrica para los medios estratificados con interfaz a los 0.8 m

Caso	Tipo de estratificación	Método	V_{st}	Error % V_{st}
Caso 3.D	Interfaz 0.8 m	Estimación modelo	85 mm/s	-
-	Interfaz 0.8 m	Estimación teórica (Allen, 1985)	64 mm/s	25 %

6 Discusión de resultados

En relación con los resultados de la validación del modelo, la comparación con los resultados experimentales de Khatmullina e Isachenko (2017) permite evaluar si el modelo reproduce una respuesta físicamente representativa de partículas de PCL en medios homogéneos antes de la implementación de los efectos del cambio de densidad del medio característicos de los medios estratificados. En ese sentido, las diferencias porcentuales de 11% para la partícula esférica y 3.6 % para la partícula cilíndrica evidencian que los resultados numéricos se mantienen próximos a las referencias experimentales y dentro del mismo orden de magnitud.

Adicionalmente, un aspecto relevante corresponde a que el modelo también reproduce correctamente la tendencia asociada a la forma de las partículas. Bajo condiciones equivalentes de tamaño nominal, densidad del material y propiedades del fluido, la esfera alcanza una velocidad de sedimentación mayor que el cilindro. Este comportamiento coincide con los resultados experimentales, los cuales también evidenciaron diferencias entre la sedimentación de partículas de PCL esféricas y cilíndricas. La reproducción de esta tendencia resulta especialmente importante, porque demuestra que el modelo no entrega únicamente valores próximos a las referencias, sino también que distingue la respuesta de partículas con geometrías diferentes.

La diferencia entre los resultados numéricos y experimentales pueden relacionarse, en primer lugar, con las características de las partículas utilizadas en el estudio de referencia. Las partículas de PCL fueron fabricadas manualmente, por lo que no correspondían a figuras geométricamente ideales. Se reportó que las esferas presentaban distintos grados de desviación respecto de la forma ideal, mientras que los cilindros presentaban variaciones en sus dimensiones y en la relación entre su longitud y diámetro. Estas variaciones modifican el área proyectada y la interacción hidrodinámica con el fluido, produciendo diferencias en la fuerza de arrastre y, en consecuencia, en la velocidad de sedimentación (Khatmullina & Isachenko, 2017; Ahmadi et al., 2022).

En comparación, el modelo numérico utiliza partículas con propiedades geométricas y físicas definidas de manera controlada. La esfera se representa mediante una geometría ideal de 4 mm de diámetro, mientras que el cilindro se define mediante un *clump* de esferas. Esta representación permite mantener constantes los parámetros de análisis, pero no reproduce exactamente la superficie y rugosidad de las partículas experimentales. Del mismo modo, existen pequeñas diferencias entre las propiedades del medio experimental y las utilizadas en la simulación, como la densidad y la viscosidad del agua, las cuales dependen de la temperatura. Este parámetro al no ser posible definir en los modelos acoplados OpenFOAM-YADE entrega un parámetro que genera incertidumbre respecto a las condiciones del medio simulado.

Por último, los valores de velocidad de referencia fueron estimados a partir de curvas de comportamiento publicadas por el estudio y no corresponden a mediciones exactas tabuladas para partículas de las dimensiones utilizadas en el modelo. Debido a las razones anteriormente mencionadas, no resulta posible atribuir la diferencia observada a un único parámetro, sino al efecto conjunto de las condiciones experimentales y de las simplificaciones adoptadas en su representación numérica.

Por otra parte, al analizar la estabilización de los promedios acumulados y los valores reducidos del error periódico respaldan que la respuesta temporal alcanza una tendencia aproximadamente constante durante el tramo analizado. Estos indicadores permiten comprobar que las velocidades utilizadas para la comparación corresponden a valores representativos de su comportamiento global. En consecuencia, el modelo se considera representativo para realizar comparaciones entre diferentes geometrías de partícula y estudiar la sedimentación de las partículas implementando los efectos de los cambios de densidad en su velocidad vertical.

Al analizar los resultados de la etapa de estudio de la influencia de la forma de la partícula en su sedimentación, se evidencia con claridad cómo su morfología influye tanto en la magnitud de la velocidad de sedimentación como en la evolución temporal de su movimiento. Bajo un mismo perfil de densidad, la esfera alcanzó una velocidad representativa mayor que el cilindro, requiriendo un menor tiempo para completar el tramo de análisis. Esta diferencia comprueba que microplásticos de la misma

composición y con un mismo tamaño nominal pueden presentar comportamientos distintos debido a su geometría. Este resultado coincide con varios estudios de sedimentación de microplásticos (Khatmullina & Isachenko, 2017; Ahmadi et al., 2022; Kabir et al., 2025), quienes identificaron la forma de la partícula como uno de los principales factores que controlan la velocidad de sedimentación.

La influencia de la geometría se relaciona principalmente con la forma en que cada partícula interactúa con el fluido. El coeficiente de arrastre depende de las propiedades geométricas como el área proyectada, la esfericidad y la orientación de la partícula en la caída. En cambio, una partícula cilíndrica, el área aparente varía durante el descenso, modificando la resistencia hidrodinámica. Este comportamiento se puede notar en las formulaciones del coeficiente de arrastre (Haider y Levenspiel, 1989), donde el arrastre de las partículas no esféricas depende directamente de su esfericidad. De esta manera, la menor velocidad de sedimentación del cilindro es consecuencia de una mayor resistencia hidrodinámica asociada a su geometría.

Cabe notar que, la comparación realizada no corresponde a partículas con equivalente volumen y masa, sino a partículas con un mismo diámetro característico nominal. En consecuencia, la modificación de la forma también produce diferencias en el volumen, la masa y el área proyectada. Por esta razón, el efecto observado no debe interpretarse únicamente como una consecuencia del cambio de forma de la partícula, sino como el resultado conjunto de las propiedades de una esfera y un cilindro dentro de un mismo tamaño nominal.

La evolución durante los primeros instantes de la simulación también evidencia que la forma influye en el tiempo que necesita la partícula para alcanzar su velocidad terminal. El cilindro presenta inicialmente un descenso más rápido alcanzando antes una velocidad terminal en comparación a la esfera. Esto se debe a que, al comienzo de la caída, cuando la velocidad es reducida, la fuerza de arrastre posee una menor magnitud y la respuesta depende principalmente del peso aparente. A medida que aumenta la velocidad relativa, la fuerza de arrastre adquiere una mayor magnitud. Su valor depende del coeficiente de arrastre y del área proyectada, parámetros que se encuentran condicionados por la geometría de la partícula. Este tipo de relación es relevante en partículas no esféricas, cuya orientación puede modificar su dinámica de sedimentación (Mercier et al., 2020).

Al comparar los casos con perfil lineal con sus respectivos casos homogéneos, la esfera presentó una reducción de la velocidad de sedimentación del 7.2 %. Esto evidencia que, en un medio de propiedades idénticas, la esfera presenta una mayor sensibilidad frente al aumento progresivo de la densidad del fluido en comparación al cilindro. La menor variación en la velocidad del cilindro no significa que la estratificación no afecte su movimiento. Estudios numéricos han mostrado que las partículas no esféricas presentan respuestas hidrodinámicas condicionadas por su elongación, orientación y rotación durante el descenso (Ahmadi et al., 2022; Ardekani et al., 2017; Kabir et al., 2025)

El análisis de los resultados de los casos relacionados al estudio de la influencia del cambio de densidad del medio, evidencia que la distribución vertical de la densidad del fluido influye directamente en la sedimentación de ambas partículas. En los casos homogéneos, la densidad permanece constante durante todo el recorrido, por lo que la velocidad una vez superado el tramo de aceleración inicial mantiene un comportamiento estable. En cambio, cuando la partícula atraviesa una interfaz e ingresa en la capa de densidad mayor, se produce una disminución progresiva de su velocidad de sedimentación. Este comportamiento es coherente con el balance de fuerzas que gobierna el movimiento. La velocidad se ajusta posteriormente hacia una nueva condición aproximadamente estable, determinada por el equilibrio local entre el peso, el empuje y la resistencia hidrodinámica (Khatmullina & Isachenko, 2017; Mercier et al., 2020).

La ubicación de la interfaz determina el instante en que comienza la modificación del comportamiento de la partícula. Para el caso donde la interfaz se ubica a 0.8 m desde el fondo, la partícula ingresa antes a la capa inferior de mayor densidad y permanece una proporción mayor del recorrido. Debido a esto, la disminución de la velocidad comienza con anterioridad y el tiempo necesario para completar el tramo de análisis aumenta respecto del caso con interfaz a 0.6 m desde el fondo. Este efecto se observa en ambas geometrías, lo que permite establecer que el comportamiento de la partícula no depende únicamente de la magnitud del cambio de densidad, sino también de la posición en la que ocurre y del

tiempo de exposición de la partícula al fluido más denso. Para el caso de la partícula esférica, se evidencia con claridad este efecto, donde el valor de velocidad terminal disminuye un 7.2 % para el caso de la interfaz ubicada a 0.6 m y 11% en el caso de la interfaz ubicada a 0.8 m. Además, se observan una separación progresiva entre ambos casos y a su vez, con el caso homogéneo permitiendo concluir que la reducción de velocidad no se genera de manera abrupta, sino a una modificación continua del movimiento después del cambio de densidad.

Para el caso del cilindro también se observa una reducción de la velocidad, aunque de menor magnitud en comparación a la esfera. La magnitud de la velocidad para esos casos disminuye un 2.3 % y 3.4 % para las interfaces ubicadas a 0.6 m y a 0.8 m respectivamente. Para esta forma, una interfaz ubicada a mayor altura también genera una reducción más temprana y un aumento del tiempo de sedimentación. Sin embargo, la menor separación entre sus curvas reafirma que, el cilindro posee una menor sensibilidad al cambio de densidad. Esta diferencia debe interpretarse considerando que el movimiento del cilindro se encuentra más condicionado por su geometría y orientación, por lo que el efecto adicional de la estratificación representa una variación leve respecto a su caso homogéneo.

En conjunto, estos resultados permiten concluir que la estratificación modifica a través de un cambio progresivo la velocidad y la pendiente de la trayectoria de la sedimentación de las partículas. Para las condiciones del estudio, la consecuencia principal es el aumento del tiempo de descenso y una menor velocidad respecto del medio homogéneo de menor densidad. En un contexto ambiental, la reducción de la velocidad de sedimentación podría aumentar el tiempo de residencia de los microplásticos en determinadas capas de la columna de agua, tal como se ha observado para partículas que atraviesan medios o interfaces estratificadas (Ardekani et al., 2017; Ahmadi et al., 2022).

La comparación con las estimaciones teóricas permite complementar este análisis y evaluar si el modelo reproduce el efecto físico esperado de la estratificación. Para la esfera con interfaz ubicada a 0.8 m, la estimación teórica (Allen, 1985) y el modelo presentan una evolución similar. Ambas curvas mantienen una velocidad aproximadamente constante y comienzan a disminuir cuando la partícula ingresa en la capa de mayor densidad. Al final del tramo, el modelo alcanza un valor cercano a 100 mm/s, mientras que la estimación teórica se aproxima a 95 mm/s, lo que corresponde a una diferencia de aproximadamente 5 %. La diferencia se puede explicar debido a que ambos enfoques no reproducen exactamente las mismas condiciones hidrodinámicas. La estimación teórica se obtiene a partir de la formulación de Allen (1985) para el balance de fuerzas de las partículas, junto con la correlación de Morsi y Alexander (1972), estas estimaciones consideran una partícula aislada y una respuesta idealizada del arrastre en función del número de Reynolds, mientras que el modelo acoplado resuelve de manera transiente el movimiento y las fuerzas sobre la partícula.

En el caso del cilindro, la comparación también muestra una similitud, debido a que tanto la estimación teórica como el modelo reproducen una disminución progresiva de similar magnitud de la velocidad de sedimentación después del cruce de la interfaz. No obstante, existe una diferencia cuantitativa entre los valores finales de la velocidad, el modelo alcanza un valor cercano a 85 mm/s, mientras que la estimación teórica entrega aproximadamente 64 mm/s. Debido a que la separación entre las curvas se encuentra presente aproximadamente constante durante todo el recorrido, la diferencia no puede atribuirse a la estratificación, sino a la forma en que cada enfoque representa la hidrodinámica de la partícula cilíndrica.

En particular, en YADE el cilindro se representa mediante un clump de esferas. La distribución del volumen, el área efectiva y la interacción entre el fluido y las esferas que conforman el clump pueden generar una fuerza de arrastre distinta de la obtenida mediante la formulación analítica. Esta formulación utiliza el balance de fuerzas de Allen (1985) junto con la correlación de Haider y Levenspiel (1989), representando la partícula mediante su esfericidad, su diámetro y área proyectada. Esta formulación incorpora el efecto general de la forma, pero no reproduce de manera explícita los cambios de orientación, ni la rotación, ni las variaciones del área proyectada durante su descenso. El coeficiente de arrastre resulta relevante para partículas no esféricas, debido a que pequeñas variaciones en la geometría y orientación pueden modificar de manera importante la velocidad estimada (Mercier et al., 2020). Khatmullina e Isachenko (2017) identificaron diferencias entre sus resultados experimentales y las

formulaciones semiempíricas, particularmente para las geometrías no esféricas. Otras investigaciones (Ahmadi et al., 2022) también reportaron desviaciones entre resultados experimentales, numéricos y semiempíricos, las cuales relacionaron con la simplificación de la geometría y con propiedades superficiales no representadas completamente en los modelos. Por último, mediante simulaciones numéricas (Ardekani et al., 2017) demostraron que la elongación y la orientación de las partículas modifican su dinámica de sedimentación en medios estratificados, lo que confirma la dificultad de representar partículas no esféricas mediante formulaciones idealizadas.

El modelo desarrollado permite estudiar de manera controlada la sedimentación de partículas individuales, para lograr este propósito se han realizado simplificaciones y ciertas representaciones que se deben mencionar. La principal simplificación se relaciona con la implementación de la estratificación salina. OpenFOAM resuelve el campo fluido utilizando una densidad base constante de 1000 kg/m^3 , mientras que el aumento vertical de densidad se incorpora en YADE mediante una corrección local de la fuerza de flotabilidad. De esta manera, los resultados representan el efecto principal de la estratificación sobre el empuje y el peso aparente de la partícula, sin incluir toda la interacción hidrodinámica que podría desarrollarse en un fluido con densidad variable. La literatura (Ardekani et al. (2017)) señala que los gradientes de densidad pueden modificar el campo de flujo alrededor de una partícula en sedimentación y generar respuestas hidrodinámicas adicionales respecto de un medio homogéneo. En este contexto, la implementación adoptada permite representar de manera controlada el efecto principal de la estratificación sobre la flotabilidad, lo que resulta adecuado para comparar las configuraciones estudiadas.

También debe considerarse la representación simplificada de las partículas y del acoplamiento fluido-partícula. La esfera se modela como una geometría ideal, mientras que el cilindro se representa mediante un clump de esferas, cuyas implicaciones en los resultados ya fueron explicadas anteriormente en términos de su influencia en la fuerza de arrastre estimada durante el descenso. Además, el uso de un acoplamiento unidireccional implica que el fluido modifica el movimiento de la partícula, pero la partícula no altera el campo hidrodinámico. Este enfoque resulta apropiado para el estudio de partículas individuales, como lo es la presente investigación, aunque no permite representar interacciones entre partículas ni efectos asociados a concentraciones elevadas (Cao et al., 2023; Capone et al., 2021).

Las condiciones adoptadas para el fluido también corresponden a una idealización del fenómeno. El medio se encuentra inicialmente en reposo, considera una viscosidad constante y no se incorporan flujos externos, turbulencia ni movimientos verticales del agua. Asimismo, la discretización del dominio, el paso temporal y el intervalo de escritura constituyen aproximaciones numéricas seleccionadas para poseer un equilibrio entre resolución y costo computacional. Estos parámetros deben considerarse al interpretar las pequeñas diferencias entre los casos simulados y al comparar los resultados con otros de la literatura (Xu et al., 2018).

En consecuencia, de lo anteriormente expuesto, el modelo permite identificar las tendencias del comportamiento de la velocidad de sedimentación de un Microplástico de PCL al modificar la forma de la partícula o la distribución vertical de la densidad, pero no pretende predecir de manera exacta el comportamiento de un Microplástico en un sistema natural.

7 Conclusiones y recomendaciones.

En la presente investigación se caracterizó numéricamente la sedimentación de partículas de microplásticos de Policaprolactona (PCL) mediante un modelo OpenFOAM-YADE, considerando geometrías esféricas y cilíndricas en medios homogéneos y estratificados. La comparación con resultados experimentales de referencia permitió demostrar que el modelo reproduce de manera representativa el comportamiento de ambas partículas y concluir que la configuración numérica del modelo es adecuada para analizar la influencia de la morfología de la partícula y la distribución vertical de la densidad del fluido en la velocidad de sedimentación de microplásticos.

En relación con los resultados relacionados al segundo objetivo específico, se evidencia la influencia directa de la morfología en la velocidad de sedimentación de partículas de microplásticos. Específicamente, se evidencio como la esfera alcanzó una velocidad de sedimentación mayor y completó

el tramo de análisis en un tiempo menor que el cilindro. Sin embargo, el cilindro presentó una aceleración inicial mayor y alcanzó antes una condición de movimiento aproximadamente estable. Esto demostró que la forma de la partícula influye tanto en la magnitud de la velocidad de sedimentación como en la evolución temporal de su movimiento.

Complementando los resultados obtenidos con conclusiones de otros estudios de la literatura, se puede relacionar que las diferencias entre los resultados de las dos formas de las partículas analizadas se relacionan con sus propiedades geométricas y con la manera en la que interactúan con el fluido. El cilindro presenta una respuesta más dependiente de su orientación, área proyectada y resistencia hidrodinámica relacionada a su forma.

Respecto a los resultados relacionados al tercer objetivo específico, se determinó que la estratificación salina reduce la velocidad de sedimentación de una partícula de Microplástico y aumenta el tiempo necesario para completar el descenso. Al ingresar a una capa de mayor densidad, el aumento del empuje disminuye su peso aparente y modifica progresivamente el equilibrio de fuerzas. Como consecuencia, la velocidad se reduce hasta aproximarse a una nueva condición estable. Este cambio se presenta de manera continua, sin producir una modificación abrupta de la trayectoria. La ubicación de la interfaz también influye en la respuesta de las partículas. Una interfaz situada a mayor altura provoca una reducción mayor de la velocidad y un aumento en el tiempo de descenso. Este comportamiento se observó en ambas geometrías, aunque la esfera presentó una respuesta más sensible frente al cambio de densidad en comparación al cilindro.

La comparación con las estimaciones teóricas confirmó la coherencia física de las tendencias de los resultados obtenidos. Para la esfera, el modelo y la formulación analítica reprodujeron respuestas similares tanto antes como después del cruce de la interfaz, mostrando una similitud en términos de magnitud y de comportamiento. Para el cilindro, ambos enfoques representaron tanto la disminución de la velocidad asociada a la estratificación, como la tendencia a que la disminución sea menor en comparación a la esfera. Sin embargo, existe una diferencia en términos de la magnitud de la sedimentación, la cual se atribuye principalmente a la distinta representación de la geometría y del coeficiente de arrastre relacionado a las propiedades físicas de la partícula.

En términos generales, los resultados evidencian que la forma de la partícula y la distribución vertical de la densidad del medio, deben considerarse conjuntamente al estudiar el transporte de microplásticos. Partículas del mismo material y tamaños similares pueden presentar velocidades, aceleraciones y tiempos de descenso diferente debido a su geometría. Del mismo modo, la presencia de capas de mayor densidad puede modificar su trayectoria vertical y prolongar su permanencia en una determinada zona de la columna de agua.

Desde una perspectiva ambiental, una menor velocidad de sedimentación podría aumentar el tiempo de exposición de los microplásticos frente a corrientes marinas y procesos de transporte horizontal antes de depositarse sobre el fondo. Esto implica que la estratificación salina no solo influye en el movimiento vertical de las partículas, sino que también puede modificar su distribución horizontal dentro del ecosistema acuático. En este contexto, se puede concluir que, en ambientes naturales, las partículas plásticas esféricas, como microesferas o pellets tendrán un comportamiento de sedimentación diferente en comparación a las partículas plásticas no esféricas, como las fibras o fragmentos cilíndricos.

A partir de las conclusiones asociadas a los objetivos específicos, se considera alcanzado el objetivo general de la investigación. El modelo desarrollado permite caracterizar de manera controlada e idealizada la sedimentación de microplásticos. La metodología implementada constituye una base para comparar diferentes configuraciones de partículas y perfiles de densidad. Además, puede orientar el desarrollo de modelos numéricos similares de mayor complejidad asociados a la problemática de estudio. Para futuras investigaciones se recomienda incorporar distribuciones dinámicas de densidad asociadas a valores medidos en terreno. También el modelo podría incorporar sistemas con múltiples partículas, acoplamiento bidireccional, corrientes externas y modelos de turbulencia, con el propósito de estudiar la interacción entre partículas, interacción fluido-partícula, transporte horizontal, entre otros.

8 Referencias

- Ahmadi, P., Elagami, H., Dichgans, F., Schmidt, C., Gilfedder, B. S., Frei, S., Peiffer, S., & Fleckenstein, J. H. (2022). Systematic evaluation of physical parameters affecting the terminal settling velocity of microplastic particles in lakes using CFD. *Frontiers in Environmental Science*, 10, 875220. <https://doi.org/10.3389/fenvs.2022.875220>
- Ardekani, A. M., Doostmohammadi, A., & Desai, N. (2017). Transport of particles, drops, and small organisms in density stratified fluids. *Physical Review Fluids*, 2, 100503. <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.2.100503>
- Cao, Y., Nguyen, H. B. K., Aikins, D., Karim, M. R., & Rahman, M. M. (2023). Advances in coupling computational fluid dynamics and discrete element method in geotechnical problems. *Geotechnics*, 3(4), 1162–1179. <https://doi.org/10.3390/geotechnics3040063>
- Capone, A., Di Felice, F., & Alves Pereira, F. (2021). Flow-particle coupling in a channel flow laden with elongated particles: The role of aspect ratio. *Journal of Marine Science and Engineering*, 9(12), 1388. <https://doi.org/10.3390/jmse9121388>
- Castillo, C., Fernández, C., Gutiérrez, M. H., Aranda, M., Urbina, M. A., Yáñez, J., Álvarez, Á., & Pantoja-Gutiérrez, S. (2020). Water column circulation drives microplastic distribution in the Martínez-Baker channels: A large fjord ecosystem in Chilean Patagonia. *Marine Pollution Bulletin*, 160, 111591. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2020.111591>
- Doostmohammadi, A., et al. (2014). Sedimentation of particles in stratified fluids. *Physics of Fluids*, 26(8), 083601. <https://doi.org/10.1063/1.4891983>
- Fofonoff, N. P., & Millard, R. C. (1983). Algorithms for computation of fundamental properties of seawater. *UNESCO Technical Papers in Marine Science*, 44.
- Frias, J. P. G. L., & Nash, R. (2019). Microplastics: Finding a consensus on the definition. *Marine Pollution Bulletin*, 138, 145–147. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2018.11.022>
- Haider, A., & Levenspiel, O. (1989). Drag coefficient and terminal velocity of spherical and nonspherical particles. *Powder Technology*, 58(1), 63–70. [https://doi.org/10.1016/0032-5910\(89\)80008-7](https://doi.org/10.1016/0032-5910(89)80008-7)
- Intergovernmental Oceanographic Commission of UNESCO. (2022). Ocean & Climate Village: Reconnecting people to the ocean: A travelling exhibition. UNESCO.
- Khatmullina, L., & Isachenko, I. (2017). Settling velocity of microplastic particles of regular shapes. *Marine Pollution Bulletin*, 114(2), 871–880. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2016.11.024>
- Kabir, S. M. A., Bhuiyan, M. A., Zhang, G., & Pramanik, B. K. (2025). Use of computational fluid dynamics to model microplastic transport in the stormwater runoff system. *Process Safety and Environmental Protection*, 196, 106873. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2025.106873>
- Mercier, M. J., et al. (2020). Sedimentation of a disk in a linearly stratified fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 885, A3. <https://doi.org/10.1017/jfm.2019.1024>

- Morsi, S. A., & Alexander, A. J. (1972). An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems. *Journal of Fluid Mechanics*, 55(2), 193–208. <https://doi.org/10.1017/S0022112072001806>
- OpenFOAM Foundation. (2022). OpenFOAM version 10: pimple Foam source code. OpenFOAM Foundation.
- Pozo, K., Gómez, V., Torres, M., Vera, L., Nuñez, D., Oyarzún, P., Mendoza, G., Clarke, B., Fossi, M. C., Baini, M., Příbylová, P., & Klánová, J. (2019). Presence and characterization of microplastics in fish of commercial importance from the Biobío region in central Chile. *Marine Pollution Bulletin*, 140, 315–319. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2019.01.025>
- Priya, K. L., Azhikodan, G., Yokoyama, K., & Renjith, K. R. (2025). Analysing the influence of hydrodynamic and sedimentary factors on the microplastic distribution in the Ashtamudi estuary, India. *Marine Pollution Bulletin*, 212, 117537. <https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2025.117537>
- Ricciardi, M., Pironti, C., Motta, O., Miele, Y., Proto, A., & Montano, L. (2021). Microplastics in the aquatic environment: Occurrence, persistence, analysis, and human exposure. *Water*, 13(7), 973. <https://doi.org/10.3390/w13070973>
- Šmilauer, V., et al. (2021). *Yade Documentation* (3rd ed.). The Yade Project. DOI: 10.5281/zenodo.5705394.
- Uurasjärvi, E., Pääkkönen, M., Setälä, O., Koistinen, A., & Lehtiniemi, M. (2021). Microplastics accumulate to thin layers in the stratified Baltic Sea. *Environmental Pollution*, 268, 115700. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.115700>
- Velazquez-Araque, L., Flor, J., Méndez, A., & Cárdenas-Calle, M. (2025). Modeling microplastic dispersion in the Salado Estuary using computational fluid dynamics. *Fluids*, 10(5), 118. <https://doi.org/10.3390/fluids10050118>
- Vendel, A. L., et al. (2017). Widespread microplastic ingestion by fish assemblages in tropical estuaries. *Environmental Pollution*, 228, 154–163. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2017.05.068>
- Xu, S.-L., Sun, R., Cai, Y.-Q., & Sun, H.-L. (2018). Study of sedimentation of non-cohesive particles via CFD–DEM simulations. *Granular Matter*, 20, Article 4. <https://doi.org/10.1007/s10035-017-0769-7>