

## EL PROGRAMA ANAITE PARA EL ESTUDIO DE LA DINÁMICA Y LA CALIDAD DEL AGUA EN CAUCES NATURALES CON PENDIENTE SUAVE

Franklin TORRES-BEJARANO<sup>1</sup> y Hermilo RAMÍREZ-LEÓN<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Programa de Estudios de Posgrado. Instituto Mexicano del Petróleo. Eje Central Lázaro Cárdenas No. 152 México D.F. fmtorres@imp.mx

<sup>2</sup> Instituto Mexicano del Petróleo. Programa de Investigación en Matemáticas Aplicadas y Computación. Eje Central Lázaro Cárdenas No. 152 México D. F. hrleon@imp.mx

*(Recibido enero 2007, aceptado junio 2007)*

Palabras clave: hidrodinámica, transporte de contaminantes, modelación de la calidad del agua

### RESUMEN

Se presenta la descripción, validación y aplicación de un modelo para el cálculo de la calidad del agua en cauces naturales. La componente hidrodinámica se resuelve en dos tiempos, primero se calcula el perfil hidráulico satisfaciendo la ecuación de la energía a partir de una sección de control en donde se conoce el nivel y el caudal; en segundo término, se calcula la hidrodinámica para el plano superficial, utilizando una adecuación a la ley universal de velocidades para secciones irregulares. Esta componente hidrodinámica sirve de base para la solución del módulo de calidad del agua, el cual está constituido por tres submódulos en las que se resuelven las variables físicas, variables químicas y biológicas, y sustancias tóxicas, respectivamente. El transporte de los parámetros modelados se realiza utilizando una solución numérica en diferencias finitas de la ecuación de advección-difusión-reacción. Los diferentes módulos de este programa se validan utilizando diferentes modelos existentes en la literatura. Los resultados obtenidos con el modelo, llamado ANAITE, son satisfactorios.

Key words: hydrodynamic, pollutants transport, water quality modeling

### ABSTRACT

In this paper, description, validation and application of a 2D water quality model for natural rivers is presented. The hydrodynamic component is solved in two times, first, the hydraulic profile is calculated satisfying the energy equation starting from a control section where the level and the flow are known; then, the hydrodynamic is calculated for the superficial plane, using an adaptation to the universal law of velocities for irregular sections. The hydrodynamic component generated is the base for the solution of the water quality module, constituted respectively by three sub-modules where physical, chemical and biological, and toxicological substances variables are solved. The transport of the modeling parameters is carried out using a numerical solution in finite differences of advection-diffusion-reaction equation. The different modules of this program are validated using different existent models in the literature. The results obtained with the model, called ANAITE, are satisfactory.

### INTRODUCCIÓN

Un modelo de calidad del agua adecuado requiere la especificación de una formulación apropiada de los procesos para tomar en cuenta aspectos del transporte longitudinal, lateral y vertical. La predicción de la calidad del agua depende del procedimiento en el cual los procesos físico-químicos e hidrodinámicos sean simulados (Maskell 1991, Calow 1994). Es importante que los métodos utilizados para representar los diversos procesos, sean apropiados a la aplicación del modelo. La finalidad de desarrollar un modelo de calidad del agua es disponer de una herramienta capaz de simular el comportamiento de los componentes hidrológicos y de calidad del agua de un sistema de corrientes y realizar con ello estudios de diagnóstico y pronóstico del estado del sistema en condiciones normales y por la presencia de eventos extremos.

Shanahan *et al.* (1998) presentan un esquema de un modelo conceptual de ecosistemas de corrientes de agua que consiste de elementos abióticos y bióticos enlazados dentro del ciclo hidrológico (Fig. 1). Los procesos dentro del sistema y entre los elementos son complejos y pueden ser descritos por una serie de parámetros físico-químicos, hidro-morfológicos y biológicos. Las estructuras abióticas y bióticas de la corriente de agua son caracterizadas por gradientes longitudinales, laterales, verticales y temporales.

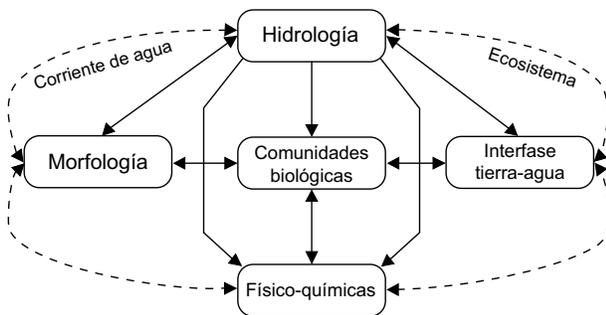


Fig. 1. Estructura de un ecosistema de corriente de agua

El modelo de calidad del agua desarrollado está dividido en tres partes conceptuales: un módulo hidrodinámico longitudinal ( $x, z$ ) en el que se resuelven las características hidráulicas básicas del cauce natural en estudio, proporcionando velocidades y niveles del agua; un módulo hidrodinámico bidimensional que genera en el plano horizontal ( $x, y$ ) los campos de velocidades del río para secciones preestablecidas; y un módulo de calidad del agua para la resolución del

transporte de las sustancias disueltas y decaimiento y transformación de las mismas a causa de los procesos físicos, químicos, biológicos y toxicológicos. La representación funcional vincula la formulación de las características físicas, los procesos y condiciones de frontera dentro del conjunto de ecuaciones algebraicas y envuelve la definición precisa de cada variable y su relación con los otros parámetros que caracterizan el modelo o las relaciones de entrada y salida. En la figura 2 se presenta el diagrama de bloques del modelo.

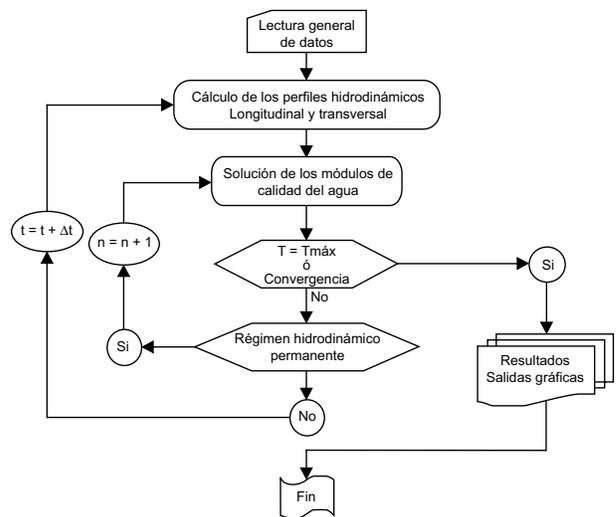


Fig. 2. Diagrama de bloques del programa ANAITE

En los resultados se presenta la validación del modelo con ejemplos de aplicación del programa ANAITE comparados con soluciones analíticas y con otros modelos de uso común por la comunidad tecnológica. Se presenta la verificación del módulo hidrodinámico longitudinal en el plano ( $x, z$ ), la validación del módulo hidrodinámico bidimensional en el plano ( $x, y$ ) y la verificación del módulo de calidad del agua.

Entre las aplicaciones prácticas que se están llevando a cabo con el programa ANAITE están el tramo final del río Magdalena, Colombia, (Torres-Bejarano 2003) y la desembocadura del río Pánuco, México (Islao *et al.* 2003).

### EL MÓDULO HIDRODINÁMICO

#### El remanso hidráulico, perfiles longitudinales $x-z$

Básicamente, el método utilizado consiste en

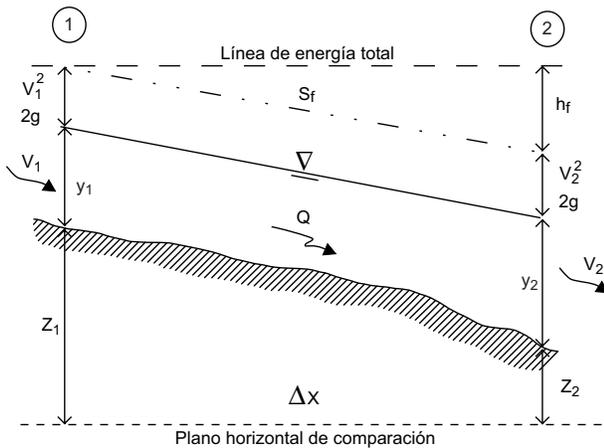


Fig. 3. Definición de variables en un tramo de río

la aplicación de la ecuación de energía entre dos secciones, tal y como se ilustra en la **figura 3** y se demuestra a partir de la ecuación (1):

$$z_1 + y_1 + \frac{V_1^2}{2g} = z_2 + y_2 + \frac{V_2^2}{2g} + h_f \quad (1)$$

donde:

- $z$ : elevación sobre una referencia del punto más bajo de la sección [L]
- $y$ : tirante [L]
- $h_f$ : pérdida de energía entre la sección 1 y 2 [L]
- $V$ : velocidad media en cada sección [LT<sup>-1</sup>]
- $g$ : aceleración debida a la gravedad [LT<sup>-2</sup>]

Las secciones marcadas con 1 y 2 en la **figura 3**, representan dos secciones cualesquiera de un tramo en estudio. En realidad el sistema en estudio puede dividirse en varios tramos como se indica en la **figura 4**. El proceso de solución de la ecuación (1) se lleva a cabo satisfaciendo ambas partes de la ecuación, para lo cual se requiere construir, para cada una de las secciones, las curvas de elevaciones-gastos, ele-

vaciones-radio hidráulico y elevaciones perímetro mojado (**Fig. 5**). El proceso de solución fue tomado de Berezowsky y Ramírez (1985).

La pérdida de energía entre dos secciones es evaluada como:

$$h_f = \Delta x \cdot S_f = \left( \frac{nV}{R^{2/3}} \right)^2 \quad (2)$$

donde:

- $\Delta x$ : es la distancia entre dos secciones [L]
- $n$ : es el coeficiente de Manning [L<sup>1/6</sup>]
- $R$ : es el radio hidráulico [L]
- $S_f$ : pendiente de fricción [-]

El coeficiente de rugosidad de Manning, requiere siempre de un proceso de calibración específica y es particular de cada cauce natural.

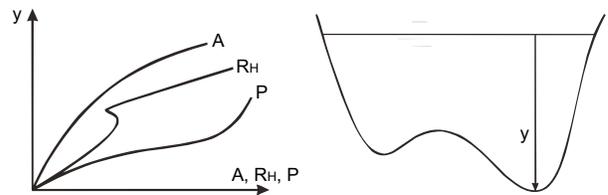


Fig. 5. Curvas de elevaciones-área hidráulica, elevaciones-radio hidráulico y elevaciones-perímetro mojado, para una sección cualquiera

El programa es aplicado en régimen subcrítico debido a que en general en el escurrimiento en cauces con pendientes suaves se presenta esta condición y para perfiles hidráulicos definidos como de tipo M (**Fig. 6**). Un perfil M2, por ejemplo, ocurre cuando el fondo del cauce en el extremo de aguas abajo se sumerge en un embalse con una profundidad menor que la normal, o también en la desembocadura de un río cuando el nivel medio del mar es superior al de la superficie libre del agua del río. Los parámetros que arroja el modelo hidrodinámico longitudinal

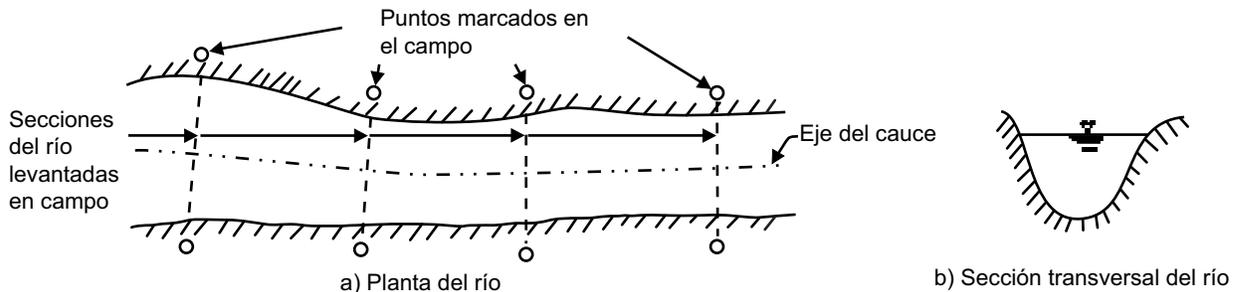


Fig. 4. Esquema de las secciones transversales en un cauce natural

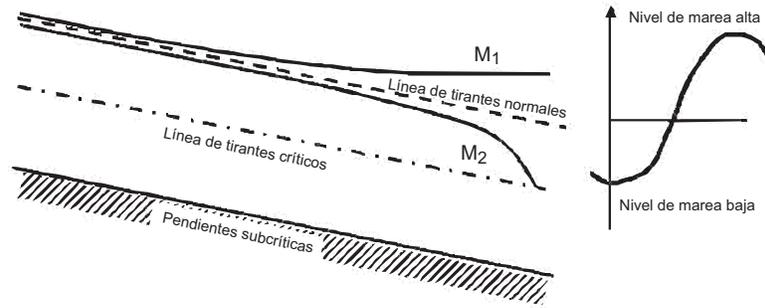


Fig. 6. Los perfiles típicos M1 y M2 de acuerdo a la condición de la marea en la sección de control

son el ancho de la superficie libre, velocidad media, tirante, y radio hidráulico. En el **cuadro I** se presenta un extracto de los resultados arrojados por el modelo para la última sección de cálculo del río Magdalena; en forma similar se obtienen estos parámetros para cada sección que se considere.

**Los perfiles horizontales, perfiles x-y**

La segunda parte del módulo hidrodinámico genera un campo hidrodinámico en el plano superficial e interpola linealmente a un  $\Delta X_{ij}$  determinado, más refinado e independiente de los  $\Delta X$  considerados en el cálculo del perfil hidráulico longitudinal. De igual forma calcula un  $\Delta Y_{ij}$  con base en la variación del ancho del canal a lo largo de la distancia. Este módulo tiene como función primordial determinar la hidrodinámica bidimensional del río, de la que se adquiere el campo de velocidades superficial con el que se realizará el transporte de los contaminantes.

El campo de velocidades superficial se obtiene a partir de la velocidad media obtenida con el modelo hidrodinámico unidimensional (**Fig. 7**), a la que se le aplica la ley de distribución de velocidades para canales naturales rugosos (Chow 1994). La fórmula utilizada para este cálculo es la siguiente:

$$V = U^* \cdot \left( A_0 + 5.75 \log \frac{R_c}{k} \right) \tag{3}$$

$$U^* = \frac{\sqrt{gU}}{C} \tag{4}$$

$$C = 28.6 \text{Re}^{(1/8)} \tag{5}$$

donde:

$V$ : velocidad [LT<sup>-1</sup>]

**CUADRO I. PARÁMETROS GEOMÉTRICOS E HIDRÁULICOS CALCULADOS POR EL MÓDULO HIDRODINÁMICO UNIDIMENSIONAL**

Sección No. 29						
Elev. (m)	Área (m <sup>2</sup> )	Perímetro (m)	Radio Hid. (m)	Ancho (m)	Caudal, Qc (m <sup>3</sup> /s)	Factor de pendiente S
-1.00	13.85	81.09	0.17	81.08	17.93	0.372E-04
-0.50	92.79	261.12	0.36	261.10	173.25	0.312E-06
0.00	266.48	362.46	0.74	362.38	715.72	0.143E-07
0.50	451.80	379.07	1.19	378.92	1545.18	0.262E-08
1.00	645.40	395.68	1.63	395.47	2582.38	0.845E-09
1.50	847.27	412.29	2.06	412.02	3805.49	0.360E-09
.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.
7.00	3613.99	595.03	6.07	594.06	27919.06	0.467E-11
7.50	3915.15	611.64	6.40	610.61	31051.14	0.371E-11
8.00	4224.59	628.25	6.72	627.15	34341.95	0.298E-11
8.50	4542.31	644.86	7.04	643.70	37792.61	0.243E-11
9.00	4868.30	661.47	7.36	660.25	41404.30	0.199E-11

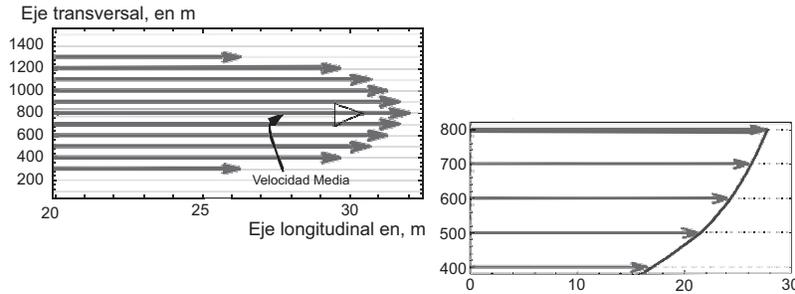


Fig. 7. Generación del perfil hidrodinámico en los planos superficiales

k: altura de rugosidad de Nikuradse,  
1.55 es el valor típico para ríos naturales [•]  
A<sub>0</sub>: factor de forma, para este caso se utilizó  
un valor de 6.25 (Keulegan, 1938) [•]  
U\*: velocidad de fricción en las paredes [LT<sup>-1</sup>]  
U: velocidad media del flujo [LT<sup>-1</sup>]  
C: coeficiente de Chezy [L<sup>1/2</sup>T<sup>-1/4</sup>]  
Re: número de Reynolds [•]

U: velocidad media de la corriente [LT<sup>-1</sup>]  
B: ancho medio [L]  
H: profundidad media [L]  
U\*: velocidad al cortante [LT<sup>-1</sup>]

La velocidad al cortante es evaluada con:

$$U^* = \sqrt{gHS_0} \tag{7}$$

en la que

g: aceleración debida a la gravedad [LT<sup>-2</sup>]  
S<sub>0</sub>: pendiente del fondo del canal [•]

**Los coeficientes de dispersión longitudinal y transversal**

*Coficiente de dispersión longitudinal*

Para la evaluación de este coeficiente se utiliza el siguiente criterio (Fischer 1968):

$$E_x = 0.011 \frac{U^2 B^2}{HU^*} \tag{6}$$

donde:

E<sub>x</sub>: coeficiexnte de dispersión longitudinal  
dirección x [L<sup>2</sup>T<sup>-1</sup>]

*Coficiente de dispersión transversal*

Para este coeficiente, se utilizó la siguiente formulación (Elder 1959):

$$E_y = \phi HU^* \tag{8}$$

donde:

CUADRO II. EXTRACTO DE LOS DATOS DE ENTRADA PARA EL MODULO HIDRODINÁ-MICO BIDIMENSIONAL

Secc	Ancho (m)	Longitud (m)	Tirante (m <sup>2</sup> )	Radio hidráulico (m)	Vel. (m/s)	E <sub>x</sub> (m <sup>2</sup> /s)	E <sub>y</sub> (m <sup>2</sup> /s)
29	660.25	546.00	9.75	6.886	0.68	218.0634	0.1875259
28	1400.10	695.00	9.78	8.150	0.26	215.2130	0.1875074
27	1673.03	558.00	9.78	8.287	0.21	212.4338	0.1874889
26	812.04	1648.00	9.91	4.921	1.33	209.7230	0.1874703
25	620.31	853.00	10.02	5.256	1.56	142.0012	0.1888295
24	580.20	543.00	9.14	4.982	1.05	140.2038	0.1887898
.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.
6	544.49	617.00	11.95	6.964	0.88	142.0012	0.1886705
5	496.23	1061.00	11.99	9.333	0.66	140.2038	0.1826394
4	504.90	460.00	12.00	10.124	0.58	138.4559	0.1822683
3	561.73	458.00	12.01	9.555	0.54	136.7555	0.1818973
2	599.16	626.00	11.91	8.102	0.61	135.1008	0.1815267
1	736.05	661.00	11.92	7.519	0.52	107.8016	0.1811562

$E_y$ : coeficiente de mezclado lateral [L<sup>2</sup>T]  
 $\phi$ : coeficiente particular que depende de cada río, se utiliza un valor de 0.23 recomendado por Elder (1959) [·]

En el **cuadro II** se muestra otro grupo de datos que son generados por el modelo para cada una de las secciones consideradas; estos parámetros son utilizados por los módulos de calidad del agua.

## LOS MÓDULOS DE CALIDAD DEL AGUA

Las partes constitutivas del modelo de calidad del agua están divididas en tres módulos identificados y compuestos de la siguiente manera:

MODCA 1. En el que se resuelven las variables físicas, como la temperatura y la salinidad.

MODCA 2. Resolución de las variables químicas y biológicas; OD, DBO, coliformes fecales, nitrógeno orgánico, fósforo orgánico, etc.

MODCA 3. Correspondiente a la resolución de sustancias tóxicas, propiamente metales pesados; zinc, hierro y manganeso. Aunque también se tiene la capacidad de modelar hidrocarburos.

Las ecuaciones diferenciales de cada uno de los componentes modelados están escritas con base en la ecuación de advección-difusión-reacción:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( E_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( E_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \pm \Gamma_c \quad (9)$$

en donde:

$C$ : representa alguna variable de calidad del agua: e.g. OD, DBO, nitrógeno total, etc. [ML<sup>-3</sup>]  
 $U$ : velocidad media de la corriente longitudinal [LT<sup>-1</sup>]  
 $V$ : velocidad media de la corriente transversal [LT<sup>-1</sup>]  
 $E_x$ : coeficiente de dispersión longitudinal [L<sup>2</sup>T<sup>-1</sup>]  
 $E_y$ : coeficientes de dispersión transversal [L<sup>2</sup>T<sup>-1</sup>]  
 $\Gamma_c$ : los mecanismos de reacción de las variables de calidad del agua [ML<sup>-3</sup>T<sup>-1</sup>]

El término ( $V \partial C / \partial y$ ) se incluye cuando las descargas laterales lleven una velocidad importante con respecto a la de la corriente principal; de otra forma

este término generalmente se anula en los ríos.

Las variables  $C$ ,  $U$ ,  $V$ ,  $E_x$ ,  $E_y$  y  $\Gamma_c$  se pueden modificar con el tiempo y la ubicación, en el plano ( $x$ ,  $y$ ). Esta ecuación está sujeta a varias condiciones de frontera e iniciales cuya formulación varía dependiendo de la aplicación. Las variables  $U$ ,  $V$ ,  $E_x$  y  $E_y$ , son independientes de la concentración  $C$  y son determinadas externamente por el módulo hidrodinámico para el modelo de calidad del agua.

## Solución numérica de la ecuación de advección-difusión

La ecuación de advección-difusión que se resuelve es la (9); esta ecuación es resuelta utilizando diferencias finitas centradas, lo cual facilita el tratamiento numérico que se le aplica. En particular, el término netamente advectivo es resuelto en el programa por dos métodos, el de diferencias centradas o bien por un esquema completamente euleriano. Ambos procedimientos se describen a continuación.

## Método de diferencias finitas con esquemas centrados

Si se considera que en cada incremento de tiempo ( $\Delta t$ ), las velocidades  $U$  y  $V$  y los coeficientes de dispersión  $E_x$  y  $E_y$  son estacionarios, se puede plantear una solución general como se indica en la ecuación (10), sin considerar por ahora el término de decaimiento:

$$C_{i,j}^{n+1} = A_1 C_{i,j}^n + A_2 C_{i+1,j}^n + A_3 C_{i-1,j}^n + A_4 C_{i,j+1}^n + A_5 C_{i,j-1}^n + f(ET) \quad (10)$$

El término  $f(ET)$  representa el error de truncamiento que contiene esencialmente errores de aproximación de alto orden; se ha comprobado el aporte de este término a través de diferentes trabajos (Ekebjær y Justesen 1991, Laurel 2004), en donde se verifica el nivel de estabilidad de estos términos. Particularmente, en Laurel (2004) se hace una revisión utilizando diferentes esquemas de solución fundamentalmente para los términos advectivos.

Si se consideran diferencias centradas para aproximar tanto los términos advectivos como los términos difusivos, se pueden encontrar los siguientes valores de los coeficientes  $A_i$ :

$$A_1 = 1 - 2\lambda_x - 2\lambda_y; A_2 = \lambda_x + \frac{C_{r-x}}{2}; A_3 = \lambda_x - \frac{C_{r-x}}{2}; A_4 = \lambda_y + \frac{C_{r-y}}{2}; A_5 = \lambda_y - \frac{C_{r-y}}{2} \quad (11)$$

Los coeficientes  $A_i$  son funciones de números característicos de estabilidad numérica, que para la dirección en  $x$ , por ejemplo, se escriben como:

$$\begin{aligned} C_{r-x} &= \frac{U\Delta t}{\Delta x}, \text{ número de Courant}; \\ \lambda_x &= \frac{\Delta t E_x}{\Delta x^2} = \frac{C_{r-x}}{P_{e-x}}, \text{ número difusivo}; \\ P_{e-x} &= \frac{U\Delta t}{E_x}, \text{ número de Peclet} \end{aligned} \quad (12)$$

El término que incluye los errores de truncamiento, resulta:

$$\begin{aligned} ET &= \left(\frac{\Delta t}{2}\right) \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \left(\frac{\Delta t^2}{6}\right) \frac{\partial^3 C}{\partial t^3} + \\ &U \left(\frac{\Delta x^2}{6}\right) \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} + V \left(\frac{\Delta y^2}{6}\right) \frac{\partial^3 C}{\partial y^3} + \text{TAO} \end{aligned} \quad (13)$$

En donde TAO se refiere a términos de truncamiento de alto orden, que no son considerados en estos desarrollos.

Sustituyendo las ecuaciones (11), (12) y (13) en la (10), puede obtenerse la formulación siguiente:

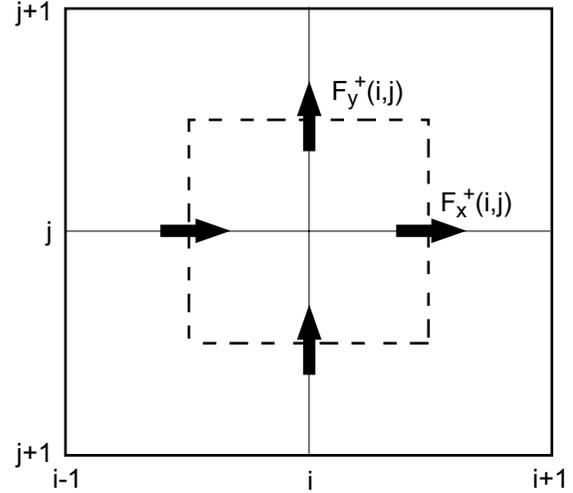
$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^n + \{F_x^- + F_x^+ + F_y^- + F_y^+\} \quad (14)$$

En donde  $F_{x_{i,j}} = [C_{r-x,y}, \lambda_{x,y}]$  y las concentraciones  $C$  alrededor del nodo  $(i, j)$ . Los signos  $(-)$  se refieren a la evaluación de la función antes del nodo  $(i, j)$  y el  $(+)$  después del nodo (**Fig. 8**). Las funciones  $F$  incluyen la optimización de los términos en la ecuación (13).

### Solución del término advectivo por el método euleriano-lagrangeano

Otra implementación que tiene el modelo ANAITE es la solución de los términos advectivos a través de una formulación euleriano-lagrangeana. Este método consiste en desplazar una partícula desde un punto  $P$  viajando a una velocidad constante  $U$  (tomando el caso unidimensional como ejemplo) y llegando a una nueva posición  $(x + U\Delta t)$  en un tiempo  $(t + \Delta t)$ , generalizando este concepto para cualquier número de Courant. Siendo  $p$  un factor de peso entre las concentraciones más próximas al punto  $P$ , es necesario adicionarle otra variable que represente el número de nodos hacia atrás en el que se encuentra el segmento de interpolación, designado en este caso como  $s$ .

Así, una concentración que incluye un esquema flexible en cuanto a la restricción de Courant-Frederich-Lewy (Rodríguez 2003) para la interpolación lineal se escribe como:



**Fig. 8.** Definición del esquema numérico

$$C_p = C_{i-a} = C_{i-s} - p(C_{i-s} - C_{i-s-1}) \quad (15)$$

donde  $a$  es el número de Courant en la dirección  $x$ ,  $s$  es la parte entera y  $p$  la fraccionaria del mismo, por lo tanto  $a = s + p$  donde  $s$  es el número de nodos que recorre la curva característica y  $p$  es la fracción de  $\Delta x$  entre los nodos  $(i-s)$  e  $(i-s-1)$ .

Generalizando para el caso bidimensional, pero ahora considerando la ecuación de advección pura, podemos escribir la siguiente formulación:

$$\begin{aligned} F_{i-a,j-b} &= (1-r) \left[ (1-p)(F_{i-\ell,j-m} + F_{i-1,j-m-1}) + \right. \\ &\left. pF_{i-\ell-1,j-m} \right] + r \left[ (1-p)F_{i-1,j-m} + pF_{i-\ell-1,j-m} \right] \end{aligned} \quad (16)$$

donde  $(\ell, m)$  son las partes enteras de  $(a, b)$ , respectivamente y  $(p, q)$  sus correspondientes partes decimales, de tal manera que  $a = \ell + p$ ;  $b = m + q$ . La formulación  $F$  es válida para la parte advectiva de la ecuación (9), de tal forma que:

$$F = \frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} - V \frac{\partial C}{\partial y} \quad (17)$$

Con esto, la ecuación (9) es resuelta en dos tiempos, primero para la parte advectiva (16) y en segunda instancia la parte difusiva-reactiva, para cada  $\Delta t$  (Laurel 2004).

### Requerimientos de estabilidad

Para garantizar la estabilidad de la solución numérica es necesario cumplir con los siguientes criterios Abbot (1979):

$$C_r < \frac{1}{2} P_e; P_e < 2; \lambda < \frac{1}{2}$$

En la práctica suelen encontrarse recomendaciones usuales que establecen que:

$$0.5 \leq C_r < 1; P_e \approx 1.5; 1/6 < \lambda < 1/2$$

Con lo cual deben de definirse los tamaños de  $\Delta t$ ,  $\Delta x$ , tomando además en cuenta el valor del coeficiente de dispersión, el cual a su vez, es definido por las características del flujo, tal y como se especificó en la sección 2.3.

### El mecanismo de reacción

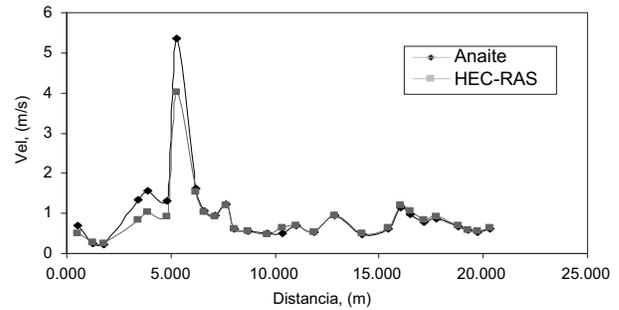
A la resolución del transporte de sustancias mediante el método previamente descrito, se le sumó la capacidad de analizar las interacciones del medio con los contaminantes y de diversos contaminantes entre sí. Esta capacidad está representada dentro de la ecuación de transporte presentada en la sección anterior (ec. 9), por el término  $\Gamma_c$ . Cada mecanismo de reacción es específico para cada una de las variables que cambian debido a procesos de conversión físicos, químicos y biológicos en función de la concentración de cada variable (Torres-Bejarano 2003).

### Pruebas de calibración y ajuste

#### El cálculo del perfil hidrodinámico longitudinal

Para la validación del módulo hidrodinámico unidimensional se llevó a cabo una comparación de los resultados obtenidos con el ANAITE y con los obtenidos de una simulación realizada con el software HEC-RAS (River Analysis system) de la U.S. Army Corps of Engineers. Las simulaciones fueron aplicadas a los últimos 21 Km del río Magdalena, Colombia (Torres-Bejarano 2003). En este tramo el río presenta una hidrodinámica compleja, ya que está influenciado por las descargas de los arroyos de la ciudad de Barranquilla y por el gran número de industrias ubicadas en su ribera, además de la influencia ocasionada por la marea del mar Caribe. Para este tramo se disponían de los levantamientos de 29 secciones transversales, se calibró el coeficiente de rugosidad de Manning para cada tramo en estudio, la pendiente del fondo fue considerada como  $S_0 = 4 \times 10^{-5}$  constante en todo el tramo de estudio. Se eligió un gasto de 3,000 m<sup>3</sup>/s, y una elevación conocida en la última sección aguas abajo de 8.0 m.

En la **figura 9** se presentan los resultados obtenidos para las velocidades promedio en cada una de las secciones. Como puede verse, los resultados son bastante satisfactorios por lo que esta primera etapa



**Fig. 9.** Comparación de velocidades obtenidas con el modelo ANAITE y el modelo HEC-RAS

del modelo nos garantiza la versatilidad del mismo. En particular se hizo énfasis en las velocidades, ya que éste parámetro es el que define el transporte de los contaminantes a lo largo del río y es la base para el desarrollo y funcionamiento apropiado del módulo hidrodinámico bidimensional, así como de los módulos de calidad del agua.

#### El módulo para el transporte de escalares

Se resuelve la ecuación de transporte de escalares para lo cual se seleccionaron los siguientes ejemplos que se mencionan a continuación.

Una primera verificación de la solución del modelo es hecha considerando una aproximación con la solución analítica de la ecuación (9) en su versión unidimensional, como sigue:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = E_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (18)$$

Cuya solución analítica puede escribirse como (Fetter 1992):

$$C = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left( \frac{L - U \cdot t}{2\sqrt{E_x \cdot t}} \right) + \exp \left( \frac{U \cdot L}{E_x} \right) \times \operatorname{erfc} \left( \frac{L + U \cdot t}{2\sqrt{E_x \cdot t}} \right) \right] \quad (19)$$

Los datos considerados son: velocidad del flujo,  $U = 0.5$  m/s, coeficiente de dispersión,  $E_x = 50$  m<sup>2</sup>/s, y longitud del cauce de  $L = 2,000$  m, con una concentración inicial,  $C_0 = 100$  mg/L en  $X_0 = 0$  y para  $t \geq t_0$ . Se trata de calcular la dispersión del contaminante en el tiempo. Los resultados de concentración obtenidos con el ANAITE y la solución analítica, en toda la longitud del cauce se muestran en la **figura 10**. Asimismo, se compara la evolución de la concentración en el tiempo en un punto fijo del tramo estudiado (**Fig. 11**).

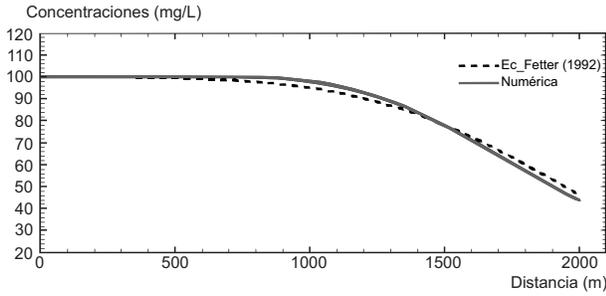


Fig. 10. Comparación de las concentraciones obtenidas con el ANAITE y la solución analítica a lo largo del cauce

Como se aprecia, los resultados muestran un comportamiento y un decaimiento de la concentración semejante para ambas soluciones tanto en la distancia como en el tiempo.

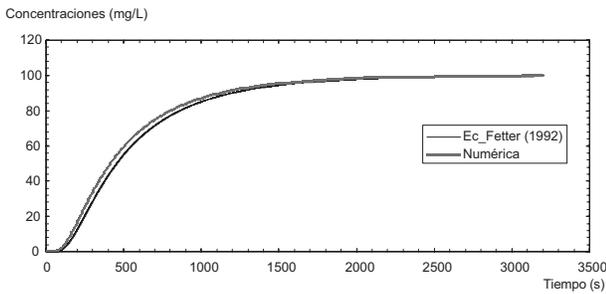


Fig. 11. Comparación de las concentraciones obtenidas con el ANAITE y la solución analítica en el tiempo

Se reproduce ahora un problema planteado en McCutcheon (1989) –ejemplo 3.2– en donde se tienen mediciones en un río localizadas a 2,400 y 4,100 m de un cierto punto de emisión las mediciones se muestran con línea punteada en la figura 12. La velocidad del río es constante e igual a 0.586 m/s.

En este caso se procedió a resolver la ecuación genérica (10), para lo cual se eligieron los siguientes parámetros, dadas las características del problema:  $\Delta x = 400$  m y  $\Delta t = 600$  s y  $E_x = 130$  m<sup>2</sup>/s. Con estos datos se procedió a satisfacer los requerimientos de estabilidad:

$$C_r = 0.88 ; P_r = 0.525 ; \lambda = 0.485$$

Los resultados obtenidos para este problema también se presentan en la figura 12, en donde al utilizar un incremento en x de 400 m, no se ajusta totalmente a la curva medida en la sección 4100, por ello se muestran dos curvas obtenidas por el programa ANAITE, una a los 4000 m y otra a los 4400 m. Los

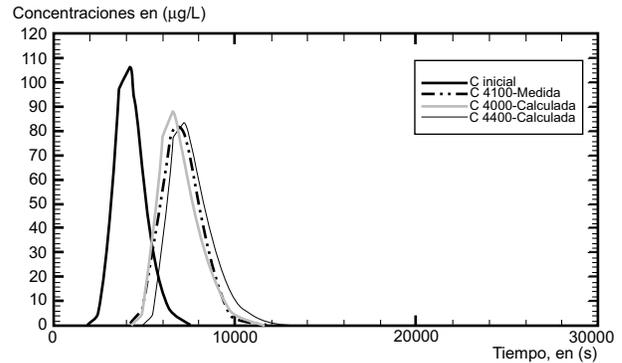


Fig. 12. Comparación de concentraciones medidas con las calculadas por ANAITE en su versión unidimensional

resultados obtenidos muestran buena concordancia con los resultados medidos en la sección 4100.

*El módulo MODCA-2, para el estudio de la calidad del agua*

Se presenta un ejemplo de aplicación y calibración del modelo de calidad de agua (MODCA-2) en su versión unidimensional, comparado con una simulación realizada con el modelo QUAL2K para las mismas condiciones.

QUAL2K v 2.04 (o Q2K) es un modelo de calidad del agua para ríos y corrientes desarrollado por la Environmental Protection Agency (Chapra *et al.* 2006) como una versión modernizada del bien conocido modelo QUAL2E (Brown and Barnwell 1987).

Así como QUAL2E, QUAL2K simula el transporte y destino de contaminantes convencionales. El modelo representa el río como un canal unidimensional con flujo no uniforme en estado fijo y simula el impacto de descargas puntuales y difusas. Incluye el transporte y destino de constituyentes tales como, temperatura, demanda bioquímica de oxígeno, oxígeno disuelto, nutrientes, etc.

Los parámetros que se modelaron son la demanda bioquímica de oxígeno (DBO) y nitrógeno orgánico (NO). El ejercicio considera un tramo de río con longitud total de 4 km, que sufre una descarga continua de contaminante en el principio del tramo, con las características que se indican en el cuadro III.

CUADRO III. CONDICIONES DE DESCARGA

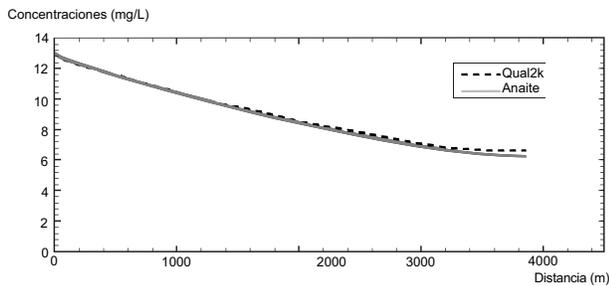
Parámetro	Unidad	Valor
$U$	m/s	2.0
$E_x$	m <sup>2</sup> /s	150
DBO	mg/L	13
N org	mg/L	280
P org	mg/L	16

Se trata de predecir con ambos modelos el efecto de la descarga del efluente a lo largo del cauce para un tiempo de simulación de 2 días:

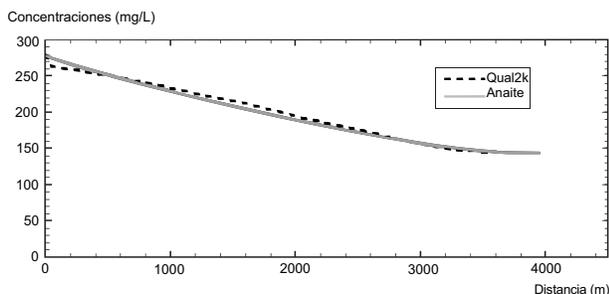
$$C_r = 0.60; \lambda = 0.45; P_e = 1.33$$

La revisión de los criterios de estabilidad dados anteriormente se establecen como óptimos a un  $\Delta t = 30$  s y un  $\Delta x = 100$  m, con lo cual se tiene que satisfacen los requerimientos de estabilidad.

Los resultados obtenidos para este problema se presentan en las **figuras 13 y 14**, en donde aparece también la solución obtenida con el QUAL2K, para las mismas condiciones de simulación. Como se aprecia, estos resultados muestran una concordancia aceptable entre ambos modelos. Los puntos de máxima concentración coinciden aproximadamente al 99 %, en tiempo e intensidad.



**Fig. 13.** Resultados de DBO obtenidos con ANAITE y QUAL2K

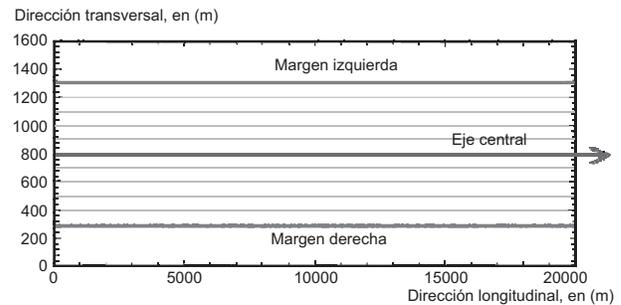


**Fig. 14.** Resultados para el nitrógeno orgánico obtenidos con ANAITE y QUAL2K

### El modelo bidimensional para el transporte de escalares

Como se discutió anteriormente, la ecuación de advección-difusión-reacción para el transporte de escalares que se incluye en el modelo es la ecuación (9). La cual fue probada para el módulo de calidad del agua MODCA1, que resuelve la temperatura

y la salinidad. Se eligió un dominio de estudio de 1,600 m de ancho constante y de 20 km de longitud (**Fig. 15**).



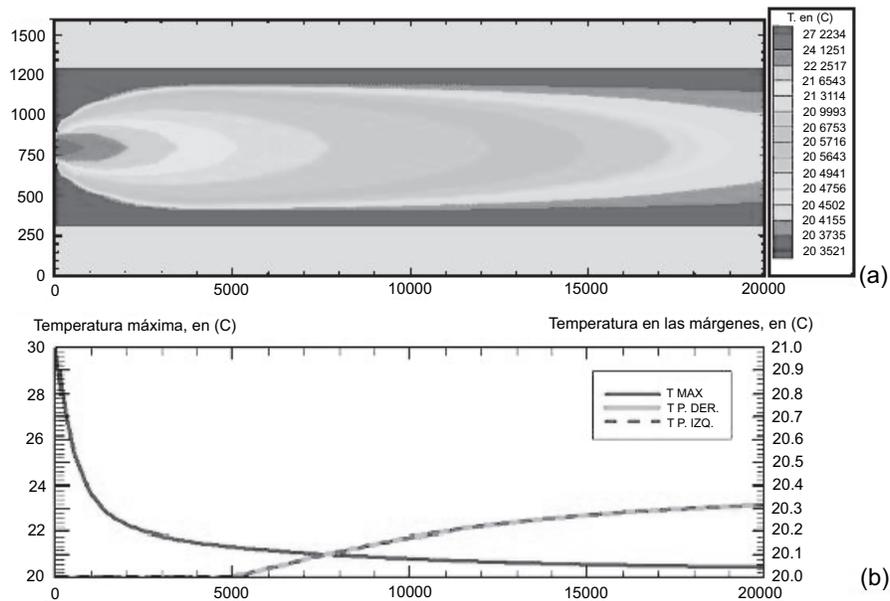
**Fig. 15.** Dominio de estudio y vectores de velocidad considerados

En la primera simulación se presenta una descarga puntual y al centro del dominio con las siguientes características: temperatura total de descarga igual a 30 °C y en el centro de la frontera inicial del dominio, la velocidad media del flujo,  $U = 5.0$  m/s, los coeficientes de dispersión longitudinal y lateral,  $E_x = 150$  m<sup>2</sup>/s y  $E_y = 10$  m<sup>2</sup>/s, respectivamente.

La temperatura natural del agua establecida para este ejemplo es de 20 °C. La temperatura máxima se encuentra elementalmente en el punto de la descarga, con una rápida disminución en la dirección de la corriente, predominando en la mayor parte del dominio una temperatura que oscila entre 20.5 a 21.4 °C para la **figura 16a**.

En la **figura 16b** se puede confirmar con claridad lo ilustrado en la figura anterior, esto es, el decaimiento normal de la temperatura con la distancia tendiendo a la temperatura natural del cuerpo de agua. En cuanto a la temperatura en las paredes izquierda y derecha, se observa que estas comienzan a incrementarse a una distancia aproximada de 5,000 m del punto de descarga; se nota también que ambas temperaturas a la pared, tienen idéntico comportamiento y valor, lo cual se debe a la forma regular del dominio.

Se resuelve ahora el mismo problema, considerando además una descarga lateral ubicada a 5 km sobre la margen derecha y una descarga difusa de 3 km de longitud a partir del kilómetro 12 sobre la margen izquierda. Para este ejemplo, la descarga al centro del dominio tiene un valor de 35 °C, la descarga lateral es de 30 °C y la temperatura para la descarga difusa es de 25 °C constante; la temperatura natural del agua es de 20 °C. La velocidad

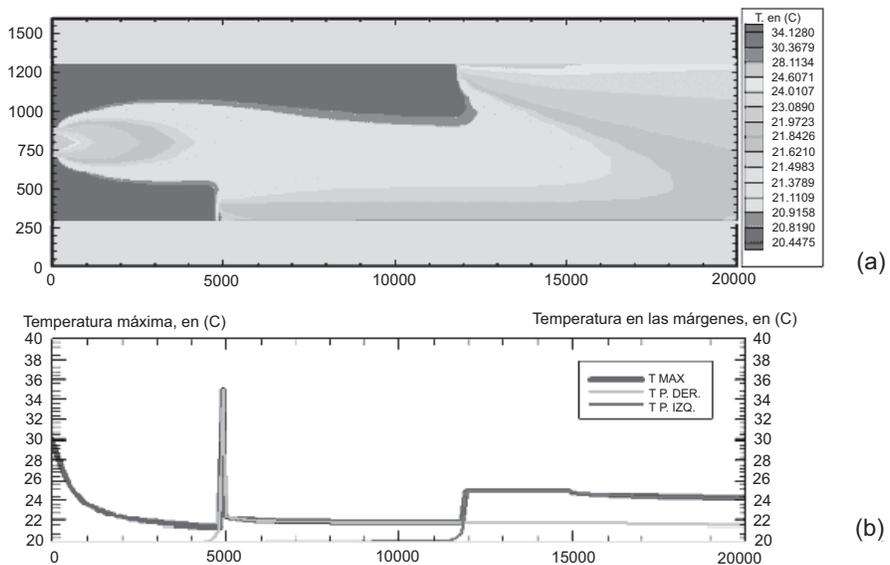


**Fig. 16.** Plano de concentración de la temperatura. Descarga puntual y al centro del dominio. (a) Temperatura total (b) Evolución al centro del dominio y en las márgenes izquierda y derecha

media del flujo,  $U = 5.0$  m/s, los coeficientes de dispersión longitudinal y lateral,  $E_x = 150$  m<sup>2</sup>/s y  $E_y = 10$  m<sup>2</sup>/s, respectivamente.

Una vez resuelto el problema se concluye que el comportamiento presentado por este escenario de descarga es muy singular, resaltándose principalmente

que la temperatura se distribuye en casi todo lo largo y ancho del dominio de estudio manteniendo valores mayores a los de la temperatura natural. Para la descarga difusa, se puede notar en este ejemplo, cómo una descarga aunque relativamente pequeña en comparación con la descarga puntual al centro, mantiene valores



**Fig. 17.** Plano de concentración de la temperatura. Descargas puntual, al centro del dominio, lateral, y descarga difusa. (a) Temperatura total (b) Perfiles al centro y en ambas márgenes

importantes y aún mayores que si se considerara como una descarga puntual, siendo ésta el tipo de descarga más influyente en el aumento de temperatura en gran parte del dominio de estudio (**Fig. 17a**).

Los perfiles de temperatura para este escenario de descarga presentan un comportamiento característico, principalmente para los perfiles a las márgenes. La temperatura máxima tiende a su disminución gradual encontrándose con incrementos en su valor en los puntos de la descarga puntual y difusa, para luego tender a su decaimiento normal tratando de llegar a la temperatura normal. La temperatura para la pared derecha inicia con un incremento súbito en el punto de la descarga lateral; la temperatura a la pared izquierda se mantiene constante a 20 °C hasta llegar al punto de inicio de la descarga difusa (km 12), la cual hace que se incremente el valor de la temperatura a aproximadamente 25 °C conservándose constante en todo el tramo de la descarga para luego decaer gradualmente (**Fig. 17b**).

## CONCLUSIONES

El modelo ANAITE demuestra una gran versatilidad para reproducir la hidrodinámica de una corriente unidimensional y bidimensional y puede ser aplicado con gran facilidad a cualquier sistema con variación irregular o de sección constante. Asimismo, en su módulo de calidad del agua puede manejar diferentes tipos de descargas, ya sean éstas difusas, puntuales o transversales en todo el dominio como se vio anteriormente.

Requiere relativamente de poca información para su ejecución: algunas secciones transversales del tramo o longitud en estudio; para cada una de las secciones transversales necesita un número de puntos dispuestos en coordenada ( $x$ ,  $y$ ), requiere de una sección de control en donde se identifique el gasto que pase en un instante así como la elevación de la superficie libre. El programa estima coeficientes de rugosidad de Manning, velocidades medias y elevaciones de la superficie libre. Una vez generada la hidrodinámica se pueden aplicar los módulos de calidad del agua, para lo que se requiere conocer algunas características del sitio y el nivel de descarga. Tiene además la capacidad de incluir los términos de creación/destrucción de los compuestos seleccionados (Torres-Bejarano 2003).

Aunque los modelos de calidad del agua bidimensionales aún hoy en día son menos usados en ríos que los modelos unidimensionales, es más que nada por el desconocimiento de los procesos físicos,

químicos, biológicos, tóxicos, etc. Actualmente se ha ganado conocimiento experimental al respecto que aunado al desarrollo de equipo informático, permiten incluir aspectos como el mezclado lateral que ha sido un tema de auge en los últimos años y son particularmente útiles en ríos anchos en donde la aproximación unidimensional puede resultar cuestionable. La tendencia mundial de los modelos hidrodinámicos y de calidad del agua de los ríos es incluirlos en sistemas de información geográfica, en modelos de tiempo real y para evaluar indicadores ambientales. El modelo ANAITE continua desarrollándose en este sentido (Islao *et al.* 2003, Laurel 2004).

## REFERENCIAS

- Abbott M.B. (1979). *Computational hydraulics: Elements of the theory of free surface flows*. Pitman, Londres. 326 pp.
- Berezowsky M. y Ramírez H. (1985). Calibración de la rugosidad a lo largo del río Colorado, Instituto de Ingeniería, UNAM, México. Informe técnico, Proyecto No 4309, pp 150.
- Brown L. y Barnwell T. (1987). The enhanced stream water quality models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: Documentation and User Manual, Report EPA/600/3-87/007, U.S. EPA, Athens, GA, USA.
- Calow P. and G. Petts (1994). *The Rivers Handbook: Hydrological and Ecological Principles*. Volume 2. Boston, MA. Blackwell Scientific Publications.
- Chapra S.C., Pelletier G.J. y Tao H. (2006). QUAL2K: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality, Version 2.04: Documentation and Users Manual. Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, Medford, MA.
- Chow V.T. (1994). *Hidráulica de canales abiertos*. McGraw-Hill, Trad. Saldarriaga, J., Bogotá, 667 p.
- Elder J. (1959). The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow. *J. Fluid Mech.* 5, 544–560.
- Ekebjærge L. y Justesen P. (1991). An explicit scheme for advection–diffusion modelling in two dimensions. *Comp. Method. Appl. M.* 88, 287–297.
- Fetter C.W. (1992). *Contaminant Hydrogeology*. Macmillan, Nueva York, 458 p.
- Fischer H.B. (1968). Methods for predicting dispersion coefficients in natural streams, with applications to lower reaches of the Green and Duwamish rivers. Washington, U.S. Geological Survey Professional Paper, 582-A.
- Islao J.P., Ramírez León H., Navarro J.M. y Torres F.M. (2003). Modelación numérica e indicadores de sensibilidad ambiental. Aplicación a la desembocadura

- del río panuco. IX Congreso de Dinámica de Fluidos. Cd. México.
- Keulegan G.H. (1938). Laws of turbulent flow in open channels. *Journal of Research*, Vol. 21, U.S. National Bureau of Standard, artículo de investigación RP 1151, 707-741.
- Laurel A. (2004). El sistema ANAITE para el estudio de la dinámica, contaminación y el diagnóstico ambiental en ríos. Tesis de Licenciatura, Escuela Superior de Ingeniería y Arquitectura del IPN, México.
- Liu H. et al. (FALTAN) (1977). Predicting dispersion coefficient of streams. *J. Environ. Eng. Div-ASCE*, 103, EE1, pp. 59-69.
- McCutcheon S. (1989). *Water quality modeling*. Vol. I, CRC Press, Boca Raton, FL. EUA, 334 pp.
- Maskell J. (1991). Hydrodynamic and physical considerations for water quality modeling. IWEM Water Quality Modeling Symposium, Harrogate. The Institution of Water and Environmental Management, Londres.
- Rodríguez C. (2003). Modelación hidrodinámica en 2D y 3D para lagos. Aplicación a la laguna de Coyuca y al embalse de Valle de Bravo. Tesis de Maestría en Ingeniería Hidráulica, DEPFI-UNAM.
- Shanahan P., Borchardt D., Henze M., Rauch W., Reichert P., Somlyódy L. y Vanrolleghem P. (1998). River water quality No 1: I. Modeling Approach. *Wat. Sci. Tech*, 38, 245-252.
- Torres-Bejarano F. (2003). El programa ANAITE para el estudio de la calidad del agua en sistemas de cauces naturales. Aplicación al río Magdalena, Colombia. Tesis de Maestría en Ingeniería, DEPFI-UNAM.