

Reseña Sobre Modelos Unidireccionales de Calidad de Aguas en Rios

Alfredo E. Trento

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas - UNL - C.C. 217 - 3000 Santa Fe, Argentina
atrento@fich.unl.edu.ar

Recibido: 04/01/00 - revisão: 21/08/00 - aceito: 23/07/01

RESUMEN

El acelerado deterioro ambiental de cursos de agua debido a su empleo como receptores de desechos urbanos y rurales intensificó el estudio de los procesos de transporte de poluentes. Los procesos involucrados son básicamente la advección, la dispersión longitudinal y la cinética de reacciones químicas. Para escurrimientos que admiten su representación unidireccional, los modelos numéricos proporcionan un excelente recurso para aproximarse a la solución exacta de la ecuación, cuando no es posible obtener una solución analítica. En las últimas tres décadas se han elaborado muchos modelos numéricos, de distinto grado de complejidad y aplicables a diferentes configuraciones de cursos de agua. La gran mayoría de los algoritmos numéricos implementados pueden ser clasificados en tres grandes grupos: Eulereanos, Lagrangeanos y mixtos. Se presenta una reseña de la evolución histórica de los modelos unidireccionales más conocidos y se enfatizan sus principales rasgos.

Palabras-clave: calidad de aguas; modelos unidireccionales.

INTRODUCCIÓN

La problemática de polución en aguas, en particular en ríos, es quizás un área donde se han realizado los estudios ambientales más significativos, justamente por ser los cursos de agua uno de los primeros medios en ser amenazados desde el punto de vista de su calidad natural. En efecto, casi todas las civilizaciones conocidas hasta la actualidad, se han asentado sobre las márgenes de ríos. Sus aguas fueron y son usadas, para abastecimiento humano, regadíos, industrias, etc., y también como destino de los desechos orgánicos e inorgánicos de las poblaciones, volcados directa o indirectamente, con o sin tratamiento previo. El uso y abuso de manera casi ilimitada del agua de los cursos, tanto como agente receptor, depurador natural y medio de transporte de los poluentes, originó el fin de la fauna íctica en muchos cursos de agua y su amenaza en casi todos los restantes. Este, al igual que otros efectos, ya no están circunscriptos a una escala local, sino que tiende a tomar escalas regionales, en la que se ven involucradas millones de personas y numerosas especies animales y vegetales.

Los grandes avances tecnológicos logrados por la humanidad en los últimos años, han posibilitado la utilización de nuevos instrumentos para conocer mejor los procesos naturales y por lo tanto corregir o atenuar sus efectos negativos. El desarrollo de equipos con alta capacidad para obtener, procesar y transferir información

ambiental y el desarrollo de la microelectrónica, que posibilita contar con una compleja tecnología computacional, están permitiendo avanzar en dos grandes campos íntimamente relacionados:

- a. El aprovechamiento de un enorme flujo de información, a tiempo real (por ejemplo desde satélites, sensores remotos y locales, etc.) o diferido, relativa a variables hidrométricas, físico-químicas, hidro-ambientales, bioquímicas, etc.
- b. El desarrollo de medios computacionales, cada vez más veloces, con más capacidad de almacenamiento de información y, fundamentalmente, cada vez más baratos, está posibilitando el tratamiento digital de la información y la aplicación de modelos numéricos, capaces de resolver sistemas de ecuaciones diferenciales, que representan el comportamiento ambiental de los cursos de agua.

Con anterioridad a este avance se conocían las ecuaciones básicas de transporte y sus condicio-

nes de aplicación en general, pero sus soluciones sólo podían ser planteadas para casos muy especiales, mediante simplificaciones a veces groseras, como única forma de salvar la imposibilidad técnica del momento, y poder arribar a una solución. En la actualidad es relativamente común en los estudios de calidad de aguas efectuar la simulación numérica de los procesos de transporte de poluentes, mediante la resolución simultánea de muchas ecuaciones a cada intervalo de tiempo de cálculo y de varios constituyentes a la vez. Su empleo sistemático y con creciente grado de complejidad, justifica relatar brevemente la historia de su evolución hasta el presente, como tema central de este trabajo.

Este trabajo fue desarrollado en el marco de una Tesis de Maestría en Ingeniería de los Recursos Hídricos, defendida en diciembre de 1998, subvencionada por la Universidad Nacional del Litoral, en Santa Fe, Argentina.

MODELOS NUMERICOS DE TRANSPORTE PARA RÍOS

Existe una abundante bibliografía que define y describe la importancia, los alcances y limitaciones de los modelos numéricos. No es el objetivo de este trabajo reconsiderar esos conceptos ni hacer un estudio exhaustivo de los mismos. Es suficiente para nuestros fines definir los modelos numéricos como herramientas que permiten representar determinados aspectos del comportamiento de sistemas físicos, mediante técnicas numéricas. El desarrollo y aplicación de modelos numéricos constituye sólo una etapa más en el proceso del conocimiento de los fenómenos físicos estudiados. En efecto, por más elaborado que esté un modelo, sus resultados siempre serán apenas una aproximación a los aspectos más salientes de la realidad. Es fundamental tener este concepto en cuenta cuando se interpretan los resultados de un modelo. Ello es así por varias limitaciones: tecnológicas, de información, etc., pero fundamentalmente porque los resultados dependen, en última instancia, de la calidad del modelo teórico, es decir de la capacidad de conceptualización del fenómeno estudiado en hipótesis centrales y supuestos auxiliares. Es en esta etapa donde se introducen las inevitables simplificaciones, que condicionan luego en mayor o menor medida la calidad de los resultados.

Los modelos matemáticos de calidad de aguas están compuestos por ecuaciones diferenciales que describen los mecanismos principales del transporte: la advección y la dispersión. El primero representa el transporte de poluentes debido al campo de velocidades, y el segundo el transporte debido a los procesos combinados de difusión turbulenta (por remolinos),

advección diferencial (por perfiles de velocidad turbulentos no uniformes en la corriente que inducen "corte") y en menor medida por la difusión molecular. Existen además procesos propios de la cinética de las reacciones químicas de las sustancias, que dan cuenta de su degradación y que dependen de la interacción de las sustancias entre sí y con el medio, por ejemplo los procesos de hidrólisis, adsorción, absorción, oxidación, reducción, decaimiento, reareación, sedimentación, resuspensión, entre los más importantes.

La ecuación de transporte o ecuación de advección-dispersión unidireccional (EAD) representa el balance de masa de una sustancia y puede ser escrita del siguiente modo (Fischer et al., 1979):

$$\frac{\partial(AC)}{\partial t} + \frac{\partial(AUC)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(AD_L \frac{\partial C}{\partial x} \right) + S \quad (1)$$

donde A representa el área de las secciones transversales [L^2], C representa la concentración media de la sustancia en la sección transversal del cauce [ML^{-3}], U es la velocidad media [LT^{-1}] del escurrimiento considerada positiva, usualmente conocida o calculada en forma independiente, D_L es el coeficiente de dispersión [L^2T^{-1}], S es un término fuente debido a los aportes y/o pérdidas externas de masa [$ML^{-1}T^{-1}$], t es el tiempo [T], y x es la coordenada espacial [L], considerada positiva en la dirección del escurrimiento. La aplicación de la Ecuación (1) es válida si se considera que la sustancia está completamente mezclada a lo ancho de la sección transversal de un escurrimiento estacionario. En efecto, el transporte de una sustancia en un flujo turbulento puede ser descrito por un modelo matemático unidireccional (Ecuación 1), si ha transcurrido un cierto tiempo luego de la inyección de la sustancia. Ese tiempo fue llamado período advectivo de Taylor, o período inicial de Fischer, dado que este último autor fue el primero en cuantificarlo para ríos en función de parámetros adimensionales (Fischer et al., 1979).

Las concentraciones indican un determinado nivel de calidad de aguas; no dicen nada por sí solas si no se las relaciona con otros estudios que describen, tipifican y dan una escala adecuada a la relación concentración-grado de polución para situaciones bien concretas. Esos estudios están referidos principalmente a los distintos usos del agua.

Por ejemplo, determinadas concentraciones de *Escherichia coli* en un tramo de río, pueden ser peligrosas para aguas de uso balneario con inmersión total, pero tolerables para otros usos como deportes acuáticos, con mínimo contacto o riego artificial.

Los modelos numéricos aproximan las ecuaciones en derivadas parciales o totales, por ecuaciones en diferencias, discretizadas en cantidades espaciales y temporales finitas. La solución del sistema de ecuaciones algebraicas produce luego soluciones aproximadas para las variables en el campo discreto, ante determinadas condiciones iniciales y de borde. Los términos de las ecuaciones son expandidos en series por las computadoras hasta una extensión finita, en donde se trunca la serie. Ello origina errores de truncamiento, que de acuerdo a su magnitud pueden desbaratar al modelo mejor elaborado.

RESEÑA DE LA EVOLUCION DE LOS MODELOS NUMERICOS UNIDIRECCIONALES DE CALIDAD DE AGUAS EN RIOS

El primer modelo matemático aplicado a un curso de agua fue elaborado por W. B. Streeter y E. B. Phelps en 1925 (Orlob, 1983) y aplicado al río Ohio (EE. UU.). Estos autores desarrollaron una ecuación que representa el decaimiento de oxígeno disuelto (OD) por la demanda bioquímica de oxígeno (DBO) y su recuperación por reareación con oxígeno atmosférico. El modelo de Streeter-Phelps consistió en una ecuación de balance de oxígeno para una descarga puntual a una tasa constante con condiciones hidrodinámicas estacionarias y para un tramo con geometría uniforme. Luego, recién entre las décadas del '50 y '60, se desarrollaron modelos de dinámica de población y de eutroficación aplicables a ríos, modelos que fueron reconocidos como de segunda generación (Jørgensen, 1994). A mediados de los años '70 se elaboraron nuevos modelos numéricos de calidad de aguas, enfocados a resolver las concentraciones de "poluentes convencionales", entendiéndose por ellos a las siguientes variables de estado: OD, DBO, bacterias termotolerantes, nitrógeno orgánico, amoniacal, nitrito, nitrato, fósforo disuelto, particulado y poluentes arbitrarios, entre las más comunes. Por poluentes arbitrarios se designa a los constituyentes que pueden ser especificados por el usuario según las opciones del modelo. Estos modelos fueron caracterizados como de tercera generación (Jørgensen, 1994), pudiéndose mencionar el EXPLORE-I (Baca et al., 1973), el PIONEER (Waddel et al., 1974) entre otros. Una detallada descripción de los más difundidos puede consultarse en McCutcheon y French (1988); entre 1973

y 1976 inclusive, la proliferación de modelos alcanzó una tasa de cuatro por año, decreciendo posteriormente. Tal auge fue en parte debido al gran avance de la tecnología computacional tanto en equipos como en programas. Sus limitaciones no fueron computacionales ni matemáticas, sino propias de la limitación del conocimiento de la dinámica ambiental de los ecosistemas. Los resultados emergentes de este período pueden sintetizarse en los tres aspectos siguientes: a) se definieron criterios más exigentes para la formulación y funcionamiento de los modelos matemáticos; b) se tendió a lograr un balance entre la información necesaria, la definición del problema y el conocimiento conceptual del ecosistema; c) se mejoraron las técnicas de medición de parámetros, ya sea por procedimientos de laboratorio o por métodos de medición *in situ*.

En paralelo, se registraron dos importantes avances: en primer lugar se verificó un enorme adelanto en el desarrollo de modelos numéricos hidrodinámicos unidimensionales en rama, apropiados para la simulación del escurrimiento de cauces interconectados. Gracias a ello se logró un conocimiento mucho más detallado acerca de la distribución espacial y temporal de los niveles del agua y campos de velocidades en los cursos de agua. Esta información permitió una estimación mejor de los términos advectivos en las ecuaciones de transporte y coadyuvó en la estimación de los parámetros básicos, por ejemplo, los coeficientes de dispersión de poluentes. El otro avance importante, digno de mención, se relaciona con las investigaciones cuantitativas realizadas por los investigadores del campo de la ecología acuática, las cuales permitieron precisar en ecuaciones diferenciales las relaciones simultáneas que se dan entre distintas sustancias en un mismo curso de agua. Los resultados de estos desarrollos se vieron reflejados en los modelos de cuarta generación, surgidos a mediados de los años '70 y '80. En este período surgieron numerosos modelos de distinta complejidad, algunos aptos para realizar pronósticos ante eventos hipotéticos, y otros aptos para manejar los recursos hídricos a escala regional. Estos modelos se caracterizan por la presencia de una fuerte base ecológica dirigida a una mejor representación de los procesos biológicos. Sin entrar a describir los modelos capaces de tratar problemas no convencionales de calidad de aguas en cursos fluviales, como por ejemplo, la temática de la estratificación por dife-

rencias de densidad, situación común en estuarios, o los problemas térmicos generados por corrientes de agua a distintas temperaturas.

Entre todos los modelos unidimensionales desarrollados en los años '80 y que en la actualidad continúan empleándose, pueden mencionarse los siguientes: El modelo QUAL2E, que es uno de los más difundidos para simular calidad de aguas en sistemas fluviales (Chapra, 1997). Su origen se remonta al modelo QUAL-I desarrollado por Masch y Asociados en 1970. Luego, en 1972, la compañía Water Resources Engineers, bajo contrato con la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (United States Environmental Protection Agency - US EPA), modificó y lanzó la primera versión del QUAL-II. Se presentaron posteriormente varias versiones modificadas, por ejemplo en 1977, 1981, 1987 (Brown y Barnwell) y en 1995 la versión para Windows 3.1 y Windows '95 (EPA, 1995), conocida en forma abreviada como QUAL2E. El modelo es mantenido y distribuido libremente por el Center for Water Quality Modeling de la EPA en Atenas, Georgia, EE.UU. Admite la parametrización de secciones irregulares y simula el transporte de poluentes arbitrarios conservativos y no conservativos, oxígeno disuelto (OD), demanda bioquímica de oxígeno (DBO), ciclos del nitrógeno (N) y fósforo (P), algas y temperatura del agua. La última versión del modelo permite realizar análisis de incertidumbre, de interés para los casos en que la información disponible sea insuficiente (Melching y Yoon, 1996). Su hidrodinámica es estacionaria, pudiéndose variar por tramos. Una limitación consiste en la suposición de mezcla completa de sustancias en la sección en que se produce una confluencia. El modelo no admite la implementación de descargas instantáneas ni de bifurcaciones de los cursos de agua.

El modelo Water-Quality Simulation Program, WASP (Lung y Larson, 1995) en su versión cinco simula: a) el transporte y transformación de sustancias tóxicas considerando los procesos de transferencia más usuales (sorción, volatilización, etc.) como procesos de primer o segundo orden; b) el transporte de oxígeno disuelto y dinámica del fitoplancton. El sedimento es tratado como una sustancia conservativa que es advectado y dispersado a lo largo de los cursos. Tanto la versión más reciente, WASP5, como todas las antecesoras han sido usadas y validadas en un amplio rango de estudios, con datos de campo y de laboratorio. Una versión modificada de WASP5 para simular la dinámica de población algal fue desarrollada por Warwick et al. (1997). Una versión modificada del WASP4, el modelo IPX (Velleux, Gailani y Endicott, 1996), fue especialmente diseñada para superar las limitaciones del módulo de transporte de sedimentos de su antecesor, además de expandir la capacidad de simulación del transporte de contaminantes del WASP4.

El Hydrologic Simulation Program Fortran, HSPF (Johanson, Imhoff y Davis, 1980), permite una simulación integrada de procesos de contaminación en suelos de la cuenca con el transporte en cursos de nutrientes, pesticidas y carga de sedimentos. Calcula sedimentación y resuspensión de arenas, arcillas y limos, para lo cual requiere abundante información de las condiciones sedimentológicas. Las rutinas de cálculo de la cinética de los constituyentes utilizadas por el HSPF son similares a las del modelo Stanford Watershed Model, SWM-IV (Maidment, 1992), originalmente desarrolladas en 1959.

El Delft Water Quality Model, DELWAQ (Postma, 1989), elaborado por el Laboratorio de Hidráulica de Delft a fines de los '80 está estructurado en tres bloques, el de procesamiento y control de la información, el de simulación de procesos de calidad de aguas, y finalmente el de posprocesamiento de los resultados. Los procesos de transporte pueden ser simulados con grillas regulares o irregulares, y está diseñado para simular transporte de nutrientes, sólidos suspendidos, eutroficación, poluentes orgánicos, metales pesados, etc. El programa acepta escurrimientos estratificados y el acople de procesos 1D con otros 3D. Ha sido aplicado con éxito al estuario del Rhin, al mar del Norte, al estuario Ems-Dollard, y al golfo de Papua, entre otros escenarios.

El modelo Simulator for Water Resources in Rural Basins Water Quality, SWRRBWQ, desarrollado por el Departamento de Agricultura de Estados Unidos en 1990 (Arnold et al., 1990) es capaz de simular el transporte de escurrimiento en subcuencas y cauces, transporte de sedimentos, nutrientes, pesticidas en extensas y complejas configuraciones de cuencas con diferentes tipos de suelos. A su vez se implementó una interface para Windows que facilita el ingreso de información (EPA, 1994).

El modelo MIKE 11, desarrollado por el Danish Hydraulic Institute, DHI, (Danish Hydraulic Institute, 1990), es apto para representar la hidrodinámica completa de redes de canales y sistemas de rios, además de transporte de sedimentos

y procesos de calidad de aguas. Admite la simulación de escurrimientos supercríticos y subcríticos en ríos de complejas configuraciones, incorporando toda la gama conocida de modelos de propagación de crecidas. Además de los módulos básico e hidrodinámico, cuenta con el de advección-dispersión, el de transporte de sedimentos cohesivos y no cohesivos y el de calidad de aguas. Este modelo ha sido ampliamente usado en distintas partes del mundo. En 1994 se introdujo el MIKE 12, una versión mejorada del modelo MIKE 11, que incluye un módulo de transferencia de calor y nuevas rutinas para intrusión salina, eutroficación, oxígeno disuelto y transporte de poluentes en dos capas. El modelo MIKE 21, también desarrollado por el DHI, es un código apto para simulaciones bidimensionales.

En la actualidad, una comisión de la International Association on Water Quality (IAWQ) se encuentra trabajando para desarrollar un modelo de última generación. El propósito fundamental de esa comisión, IAWQ Task Group on River Water Quality Modelling (Shanaham y Somlyódy, 1998), es realizar una formulación matemática no fundada en los conceptos clásicos de Streeter-Phelps sino en los principios que se derivan de los Modelos de Barros Activados (ASM-1 y ASDM-2). La comisión, dirigida por el Profesor Somlyódy de la Budapest University of Technology, tiene planificado presentar sus resultados en la Conferencia Bienal de la IAWQ a celebrarse en París en el año 2000. En la Tabla 1 se muestra una síntesis de esta reseña de la evolución de los modelos de calidad de aguas.

MÉTODOS NUMÉRICOS EN LOS MODELOS DE TRANSPORTE

Bajo el supuesto de que la hidrodinámica de los cursos de agua es conocida, la calidad de los resultados posibles de obtener de un proceso de simulación numérica de calidad de aguas depende de los siguientes aspectos:

- El método numérico empleado para resolver los términos advectivo y dispersivo.
- La determinación y/o ajuste del coeficiente de dispersión y de su variación espacial y temporal.
- La formulación matemática de los submodelos de cada sustancia.
- La determinación de los parámetros de las ecuaciones de cada submodelo. Es frecuente ver en los manuales de usuarios de algunos de los modelos mencionados una gran cantidad de espacio dedicado a los dos últimos puntos, c) y d), es decir, al tratamiento de las ecuaciones

diferenciales propias de los submodelos para la cinética de las sustancias transportadas, y a la determinación de los parámetros específicos de la cinética de las sustancias mediante fórmulas empíricas o tablas, así como las diferentes opciones para salidas gráficas o rutinas de posprocesamiento de resultados. Ahora bien, la mayoría de los modelos descriptos anteriormente suelen emplear las mismas ecuaciones diferenciales para los submodelos de cada sustancia (Jørgensen y Gromiec, 1989) con la misma clase de parámetros. En cuanto al cálculo del coeficiente de dispersión en cada tramo, los modelos ofrecen la posibilidad de seleccionar alguna de las fórmulas empíricas más verificadas, que permiten calcular la dispersión en función de las variables del escurrimiento y la geometría de los tramos.

La selección de un determinado método numérico para discretizar los términos advectivos y dispersivos de la ecuación de gobierno pasa a ser un aspecto distintivo y de fundamental importancia para la generación de resultados confiables. McCutcheon y French (1988) destacaron que la importancia de los códigos numéricos implementados no había sido investigada exhaustivamente para los distintos modelos de uso público de entonces. La relevancia de las dificultades numéricas involucradas en la simulación del fenómeno de transporte, se pone de manifiesto con mayor claridad cuando la advección domina sobre la dispersión. La naturaleza de ambos mecanismos competitivos puede ser puesta en evidencia si el transporte de la sustancia C, supuesta conservativa, se considera sobre un intervalo $a < x < b$. Luego, si se escribe la Ecuación (1) en forma adimensional (considerando el área A, la velocidad U y el coeficiente de dispersión D_L constantes) mediante el siguiente cambio de variables $C' = C/C_0$, $x' = x/L$, $t' = t/T$, siendo C_0 una concentración característica, L una escala de longitud (usualmente $L = b - a$) y $T = L/U$ una escala temporal advectiva, la ecuación se reduce a:

$$\frac{\partial C'}{\partial t'} + \frac{\partial C'}{\partial x'} = \frac{1}{P_e} \frac{\partial^2 C'}{\partial x'^2} \quad (2)$$

Tabla 1. Reseña de la evolución de los modelos de calidad de aguas.

| | | |
|--|-----------------------|--------------------|
| Modelo de Streeter – Phelps | 1925 | Primera generación |
| Modelos de dinámica de población y de eutroficación aplicables a ríos | décadas del '50 y '60 | Segunda generación |
| EXPLORE-I (Baca et al.,1973) | | |
| PIONEER (Waddel et al., 1974) | década del '70 | Tercera generación |
| Ver descripción detallada en McCutcheon y French (1988) | | |
| QUAL2E (EPA,1995), (Brown y Barnwell,1987) | | |
| WASP (Lung y Larson, 1995) | | |
| WASP-IPX (Velleux, Gailani y Endicott, 1996) DELWAQ, Delft Water Quality Model (Postma, 1989) | décadas del '80 y '90 | Cuarta generación |
| SWRRBWQ (USDA, 1990) | | |
| MIKE 11 (DHI, 1990) | | |
| Task Group on River Water Quality Modelling, IAWQ (Shanaham y Somlyódy, 1998) | 1998 | Quinta generación |

donde el parámetro adimensional P_e se conoce como el número de Peclet, definido por la relación:

$$P_e = \frac{U L}{D_L} \quad (3)$$

claramente, cuando $P_e \rightarrow 0$, la dispersión domina sobre la advección, y por lo tanto, la ecuación tiene un carácter predominantemente parabólico, aunque en este caso es conveniente retener el término temporal mediante una redefinición de la escala temporal. Por el contrario, cuando $P_e \rightarrow \infty$, la advección domina sobre la dispersión y la ecuación exhibe un comportamiento típicamente hiperbólico.

La solución numérica de la ecuación de advección-dispersión (EAD) ha sido abordada ampliamente en la Mecánica de Fluidos Computacional, demostrándose fehacientemente las dificultades que se presentan para obtener una solución próxima a la exacta cuando el término advectivo es importante (Anderson, Tannehill y Pletcher, 1984). Las ventajas y desventajas de diferentes esquemas numéricos disponibles para aproximarse a la solución de la EAD han sido descritos minuciosamente en los trabajos de

Roache (1972), Leonard (1979), Rood (1987), entre otros.

Desde el punto de vista del método numérico empleado, la mayor parte de los modelos de transporte pueden ser clasificados en tres grandes grupos: a) Eulereanos; b) Lagrangeanos y c) Eulereanos-Lagrangeanos. En los primeros, la ecuación de gobierno se discretiza en diferencias finitas o elementos finitos según una grilla fija en el espacio. Por su parte, los métodos Lagrangeanos, o bien se basan en una grilla deformable o bien sobre una grilla fija sobre coordenadas deformables. Los métodos del tercer grupo combinan la simplicidad de la grilla fija Eulereana con la potencialidad computacional que brinda la aproximación Lagrangeana (Neuman, 1981).

Los métodos Eulereanos convencionales con sus problemas de difusión numérica, ya han

sido ampliamente analizados en la literatura especializada, donde pueden mencionarse los clásicos esquemas de Lax, Lax-Wendroff, Leap-frog, McCormack, Fromm, regresivos, centrados y otros, tanto implícitos como explícitos (Anderson et al., 1984). Entre los Eulereanos más empleados, se destaca el esquema QUICKEST (Leonard, 1979) que presenta un error de truncamiento de tercer orden espacial y temporal, y está relativamente poco afectado de las oscilaciones propias de los esquemas centrados y de la disipación numérica característica de los esquemas regresivos aún para condiciones altamente advectivas. Años más tarde, Leonard (1991) presentó una modificación del método para el caso de advección pura llamado ULTIMATE, una de cuyas aplicaciones a problemas bidireccionales de transporte fue realizada por Lin y Falconer (1997).

Celia et al. (1989a, 1989b) presentaron el método adjunto de la formulación de Petrov-Galerkin Adjunto (APG) en el método de los elementos finitos. El rasgo esencial del método APG radica en el uso de funciones de prueba adaptivas de carácter hiperbólico o parabólico de la ecuación de gobierno, según varíen los parámetros de la misma. Estas funciones fueron llamadas Funciones de Prueba Optimas (OTF) y poseen, según sus autores, inmejorables propiedades para simulaciones en problemas unidireccionales con un amplio rango de Peclet de grilla, $P_A = U \Delta x / D_L$, con Δx el intervalo espacial de discretización (Herrera, 1992).

Por otra parte, entre los métodos Lagrangeanos se distinguen aquellos que emplean una grilla variable y los que no necesitan grilla alguna. En los primeros se consideran mallas variables con el escurrimiento, o fijas con sistemas coordenados variables, para facilitar el tratamiento de la advección (Vinzón, 1991), mientras que en los segundos se requiere calcular la trayectoria de cada partícula de la sustancia transportada, como la simulación hidrodinámica efectuada por Jin (1993) y Kitanidis (1994). Una aplicación a redes de distribución de aguas fue realizada por Rossman y Boulos (1996), quienes destacan la mayor velocidad de cálculo logrado con los métodos Lagrangeanos en relación a los Eulereanos. Hathhorn (1997) ofrece una aproximación simplificada del método de Monte Carlo demostrando un considerable ahorro de esfuerzo computacional respecto a la tradicional aproximación Gaussiana que utiliza una distribución uniforme.

Los fundamentos de los métodos Eulereanos-Lagrangeanos fueron claramente expuestos por Neuman (1981), quien destaca las ventajas de desacoplar el tratamiento de la parte advectiva de la dispersiva. La advección es resuelta por el método de las características sobre una grilla fija en el espacio, mientras que la dispersión es resuelta sobre otra grilla con elementos finitos. Holly et al. (1984) emplearon el método Eulereano-Lagrangeano para simular transporte

bidimensional en un cuerpo de agua con escurrimiento de marea. La advección fue resuelta con polinomios bicúbicos de Hermite para el método de las características, y la difusión se resolvió con un operador clásico de Crank-Nicolson mediante un esquema implícito en Diferencias Finitas. Baptista (1987) fundamentó en detalle las ventajas del empleo del método de las características. Vinzón (1991) empleó un método similar para resolver el transporte de Coliformes Termoresistentes en el río de la Plata, frente a Montevideo, Uruguay. En 1994, Li y Yu presentaron esquemas conservativos basados en el método de las características con 4 y 6 nodos, con el aditamento de un limitador de flujo destinado a eliminar las clásicas oscilaciones de los perfiles abruptos de concentraciones. Las conclusiones de este trabajo fueron discutidas por Zoppou y Roberts (1996), quienes destacaron las limitaciones de los esquemas propuestos y demostraron la mayor precisión y tasa de convergencia del método QUICKEST.

La mayor parte de los modelos desarrollados en las décadas del '70 y '80 emplearon métodos regresivos o centrados para la advección. El modelo MIKE 11 utiliza un esquema implícito en diferencias finitas centradas para todos los puntos de la grilla y, por lo tanto debe emplear un término correctivo para minimizar la dispersión numérica, reducir el error de truncamiento de tercer orden y poder simular perfiles de concentración con frentes abruptos. De igual modo, un esquema Eulereano de primer orden está implementado en las distintas versiones del modelo WASP, incluso para las rutinas que se aplican a lagos y estuarios. El modelo Water Quality River-Reservoir Simulation, WQRRS, desarrollado por el Centro de Ingeniería Hidrológica del Ejército de Estados Unidos (HEC, 1974) emplea un esquema implícito en diferencias finitas, cuyas soluciones presentan discrepancias con las obtenidas de la solución analítica de la ecuación de Streeter-Phelps (McCutcheon y French, 1988).

El modelo Storm Water Management Model, SWMM (Huber y Dickinson, 1992) utiliza en su rutina de transporte en cursos de agua un método

explícito para cada volumen del segmento, tratándolo como un reactor completamente mezclado. Según sus autores, tal aproximación es equivalente a la introducción de dispersión artificial en los perfiles de concentración. Por su parte, el modelo QUAL2E, universalmente utilizado para simular problemas de calidad de aguas, se diseñó con un método implícito regresivo en diferencias finitas para la advección, lo que ocasiona excesiva disipación o amortiguamiento numérico cuando el término advectivo predomina sobre el dispersivo (Walton y Webb, 1994).

CONCLUSIONES

Se ha presentado una reseña de la evolución histórica de los modelos unidireccionales de calidad de aguas más conocidos y que fueron aplicados exitosamente en diferentes escenarios. Se ha descrito la potencialidad de cada modelo para cálculos de variables de calidad de aguas, como así también los esquemas numéricos empleados en cada caso, aspecto importante que sin embargo ocupa usualmente un segundo plano cuando se analiza la elección de un modelo.

Los esquemas numéricos existentes para resolver la ampliamente conocida ecuación de transporte unidireccional, han sido comentados en forma sintética y agrupados en las ya clásicas tres categorías de Eulereanos, Lagrangeanos y mixtos.

Se ha destacado la importancia de una adecuada selección del método numérico cuando el término advectivo predomina sobre el dispersivo, pues en esa circunstancia se ponen de manifiesto las dificultades involucradas en la representación numérica del fenómeno de transporte.

REFERENCIAS

- ANDERSON, D. A.; TANNEHILL J. C. & PLETCHER R. H. (1984). *Computational fluid mechanics and heat transfer*, Hemisphere Publishing Corporation, Mc. Graw Hill.
- ARNOLD, J. G.; WILLIAMS, J. R.; NICKS, A. D. & SAMMONS, N. B. (1990). *SWRRB - A Basin Scale Model for Soil and Water Resources Management*, Texas A&M University Press, College Station, Texas.
- BACA, R. G.; WADDEL, W. W.; COLE, C. R.; BRADSTETTER, A. & CEARLOCK, D. B. (1973). *Explore I: A River Basin Water Quality Model*, Pacific Northwest Laboratories of Battelle Memorial Institute. Richland. W. A. for U. S. Environmental Protection Agency, Washington, D. C.
- BAPTISTA, A. (1987). *Solution of advection-dominated transport by Eulerian-Lagrangian Methods using the backward method of characteristics*. Ph.D. Thesis, Dept. of Civil Engineering, Massachusetts Institute of Technology.
- BROWN L. C. & BARNWELL, T. O. Jr. (1987). *The Enhanced Stream Water Quality Models QUAL2E and QUAL2E - UNCAS: Documentation and Users Manual*, U. S. Environmental Protection Agency, Athens, GA, Report EPA/600/3-87/007.
- CELIA, M. A.; HERRERA, I.; BOULOUTAS, E. (1989). Adjoint Petrov-Galerkin Methods for Multi-Dimensional Flow Problems, *Proc. of the Seventh Int. Conference on Finite Elements Methods in Flows Problems*, Chung and Karr Editors, University of Alabama, Uah Press, p. 953 - 958.
- CELIA, M. A.; HERRERA, I.; BOULOUTAS, E. & KINDRED, J. S. (1989). A new numerical approach for the advection-diffusive transport equation, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 5, p. 203 - 226, J. Wiley & Sons.
- CHAPRA, S. C. (1997). *Surface Water-Quality Modeling*, WCB, McGraw-Hill.
- DANISH HYDRAULIC INSTITUTE (1990). *MIKE 11 a microcomputer based modelling systems for rivers and channels*, Horsholm, Denmark.
- ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (1994). *Simulator for Water Resources in Rural Basins Water Quality*, SWRRBWQ, EPA 823-C-94-002.
- ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (1995). *QUAL2E Windows interface user's guide*, EPA/823/B/95/003.
- FISCHER, H. B.; LIST, E. J.; KOH, R. C. Y.; IMBERGER, J. & BROOKS, N. H. (1979). *Mixing in inland and coastal waters*, Academic Press, New York.
- HATHHORN, W. (1997). Simplified approach to particle tracking methods for contaminant transport. *Journal of Hydraulic Engineering*, ASCE, 123 (12), p. 1157 - 1160.
- HERRERA, I. (1992). *Localized Adjoint Methods: A New Discretization Methodology*, Chapter 6, Comp. Methods in Geosciences, Eds. F. and Wheeler, SIAM, Philadelphia.
- HOLLY, F. M. Jr. & USSEGLIO-POLATERA, J. M. (1984). Dispersion Simulation in Two-Dimensional Tidal Flow, *Journal of Hydraulic Engineering*, 110 (7), July.
- HUBER, W. C. & DICKINSON, R. E. (1992). Storm Water Management Model User's manual, Version 4, *Water Resources Publications*.
- HEC - HYDROLOGIC ENGINEERING CENTER (1974). *WQRRS, generalized computer program for river-reservoir systems*. US Army Corps of Engineers, HEC, Davis, CA User's Manual 401 - 100, 100A, p. 210.
- JIN, X. Y. (1993). *Quasi Three-Dimensional Numerical Modelling of Flow and Dispersion in Shallow Water*. Department of Civil Engineering, Delft Univ. of Technology.

- JOHANSON, R. C.; IMHOFF, J. C. & DAVIS, H. H. (1980). *User's Manual for Hydrological Simulation Program-Fortran (HSPF)*, Hydrocomp. Inc., Palo Alto, CA. Report EPA-600/9-80-015. U. S. Environmental Protection Agency. Athens. GA.
- JØRGENSEN, S. E. & GROMIEC, M. (1989). *Mathematical Submodels of Water Quality Systems*, Elsevier, Amsterdam.
- JØRGENSEN, S. E. (1994). *Fundamentals of ecological modelling*, Elsevier, 2nd Ed.
- KITANIDES, P. (1994). Particle - tracking equations for the solution of the advection- dispersion equation with variable coefficients, *Water Resources Research*, 30 (11), 3225 - 3227.
- LEONARD, B. P. (1979). A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 19, 59 - 98.
- LEONARD, B. P. (1991). The ULTIMATE conservative difference scheme applied to unsteady one-dimensional advection, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 88, 17 - 74.
- LI, C. W. & YU, T. S. (1994). Conservative Characteristics-Based Schemes for Mass Transfer, *Journal of Hydraulic Engineering*, ASCE, 120 (9).
- LIN, B. & FALCONER, R. A. (1997). Tidal Flow and Transport Modeling Using ULTIMATE QUICKEST Scheme, *Journal of Hydraulic Engineering*, ASCE, 123 (4).
- LUNG, W. S. & LARSON, C. E. (1995). Water Quality Model of Upper Mississippi River and lake Pepin, *Journal of Environmental Engineering*, ASCE, 121 (10).
- MAIDMENT, D. R. (1992). *Handbook of Hydrology*, McGraw Hill, Inc.
- MCCUTCHEON, S. & FRENCH, R. (1988). *Water Quality Modeling*, I, CRC Press.
- MELCHING, C. S. & YOON, C. G. (1996). Key Sources of Uncertainty in QUAL2E Model of Passaic River, *Journal of Water Resources Planning and Management*, ASCE, 122 (2).
- NEUMAN, S. (1981). A Eulerian - Lagrangian numerical scheme for the dispersion-convection equation using conjugate space-time grids, *Journal Computational Physics*, 41, 270 - 294.
- ORLOB, G. T. (1983). *Mathematical Modeling of Water Quality: Streams, Lakes and Reservoirs*, Int. Series on Applied Systems Analyses, J. Wiley.
- POSTMA, L. (1989). *DELWAQ Model*, Delft Hydraulics, Delft, The Netherlands.
- ROACHE, P. (1972). *Computational fluid dynamics*, Hermosa Publ., New Mexico.
- ROOD, R. B. (1987). Numerical advection algorithms and their role in atmospheric transport and chemistry models, *Reviews of Geophysics*, 25 (1), 71 - 100.
- ROSSMAN, L. & BOULOS, P. F. (1996). Numerical methods for modeling water quality in distribution systems: a comparison, *Journal of Water Resources Planning and Management*, ASCE, 122 (2).
- SHANAHAM, P. & SOMLYÓDY, L. (1998). Task Group progress on river water quality model, *Water Quality International*, May/June.
- VELLEUX, M.; GAILANI, J. & ENDICOTT, D. (1996). Screening-Level Approach for Estimating Contaminant Export from Tributaries, *Journal of Environmental Engineering*, ASCE, 122 (6).
- VINZÓN, S. (1991). *Modelação de transporte de substâncias passivas em corpos de água rasos*, Tesis de Maestria, UFRJ/COPPE, Rio de Janeiro, Brasil.
- WADDEL, W. W.; COLE, C. R. & BACA, R. G. (1974). *A water quality model for the south platte river basin - Documentation Report*, Battelle Pacific Northwest Laboratories, Richland W. A. for U. S. Environmental Protection Agency.
- WALTON, R. & WEBB, M. (1994). QUAL2E simulations of pulse loads, *Journal of Environmental Engineering*, ASCE, 120 (5).
- WARWICK, J.; COCKRUM, D.; HORVATH, M. (1997). Estimating non-point-source loads and associated water quality impacts, *Journal of Water Resources Planning and Management*, ASCE, 123 (5).
- ZOPPOU C.; ROBERTS S. (1996). Discussion, *Journal of Hydraulics Eng.*, ASCE, 118 - 119.

Review on Unidirectional River Water Quality Models

ABSTRACT

The quick environmental deterioration of water bodies due to urban and rural pollutant discharges has intensified the study of the transport processes. They are mainly: advection, longitudinal dispersion and kinetics of chemical reactions. For flows where a one-dimensional approach is suitable, numerical models provide an excellent resource to obtain equation solutions, where it is not possible to achieve an analytic one. In the last three decades numerous numerical models have been created, with different degrees of complexity and applicable to many configurations of water bodies. The numerical algorithms adopted can be classified mainly according to the three following groups: Eulerian, Lagrangian and mixed. In this study a review of the historical evolution of the better known unidirectional transport models is presented and the main features of each model are emphasized.

Keywords: water quality; unidirectional models.