

UNIVERSIDAD DE CANTABRIA



**DEPARTAMENTO DE CIENCIAS Y TÉCNICAS
DEL AGUA Y DEL MEDIO AMBIENTE**

TESIS DOCTORAL

**DESARROLLO E INTEGRACIÓN DE
MODELOS NUMÉRICOS DE CALIDAD
DEL AGUA EN UN SISTEMA DE
INFORMACIÓN GEOGRÁFICA**

AUTORA

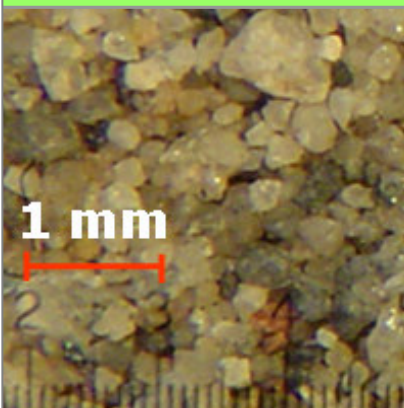
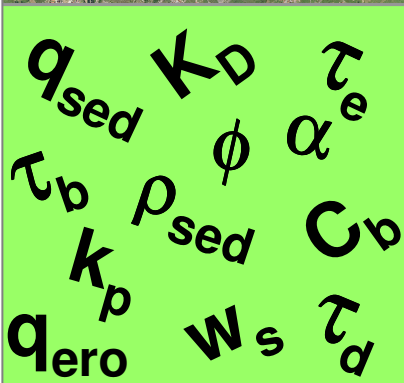
María Luisa Sámano Celorio

DIRECTORES

Andrés García Gómez

José Antonio Revilla Cortezón

Santander, 2011



ÍNDICE

RESUMEN

1. INTRODUCCIÓN

- 1.1. Exposición de motivos1-2
- 1.2. Objetivo y estructura de la tesis1-12

2. ESTADO DEL CONOCIMIENTO

- 2.1. Modelado de los sistemas estuarinos2-2
- 2.2. Fundamentos matemáticos2-3
 - 2.2.1. Ecuación de transporte o de advección – difusión2-3
- 2.3. Aproximaciones numéricas2-6
 - 2.3.1. Modelos Eulerianos2-6
 - 2.3.2. Modelos Lagrangianos2-7
 - 2.3.3. Modelos Eulerianos – Lagrangianos2-8
- 2.4. Modelos hidrodinámicos2-9
- 2.5. Modelos de calidad2-19
 - 2.5.1. Modelado del material en suspensión y de los sedimentos 2-26

2.5.1.1. Calibración de los parámetros sedimentarios	2-45
2.5.2. Modelado de contaminantes de naturaleza química	2-48
2.5.3. Influencia de las propiedades del medio	2-61
2.6. Conceptos relativos a la validación de modelos numéricos	2-66
2.7. Sistemas de Información Geográfica	2-68
2.7.1. Capacidades y potencialidades de los SIG	2-69
2.7.2. Integración de nuevas funcionalidades de análisis	2-71
2.7.3. Antecedentes de integración de modelos numéricos en entornos SIG	2-72
2.8. Análisis del estado del conocimiento	2-74
2.9. Objetivos específicos de la tesis	2-77
2.10. Consideraciones finales	2-78
3. RESOLUCIÓN NUMÉRICA Y VALIDACIÓN TEÓRICA DEL MODELO DESARROLLADO	
3.1. Modelos hidrodinámicos	3-2
3.2. Modelo de transporte	3-6
3.2.1. Módulo de cálculo I: Sólidos en suspensión	3-7
3.2.2. Módulo de cálculo II: Sustancias contaminantes	3-11
3.2.3. Módulo de cálculo III: Sustancias contaminantes asociadas a los sólidos en suspensión	3-14
3.3. Resolución numérica	3-17
3.3.1. Condiciones de estabilidad del modelo	3-20
3.3.2. Condiciones de contorno	3-21
3.4. Esquema de funcionamiento	3-22
3.4.1. Datos de alimentación (Inputs)	3-22
3.4.1.1. Velocidad de sedimentación	3-24
3.4.1.2. Tensiones de lecho, erosión y sedimentación	3-25

3.4.1.3. Tasas de erosión y sedimentación	3-26
3.4.2. Subrutinas y cálculos	3-26
3.4.3. Resultados generados (Outputs)	3-29
3.5. Validación teórica	3-32
3.5.1. Transporte de sólidos en suspensión	3-32
3.5.2. Desaparición de sustancias contaminantes	3-34
3.6. Conclusiones	3-35
4. PROCEDIMIENTOS METODOLÓGICOS PARA LA INTEGRACIÓN DEL MODELO DESARROLLADO EN UN SISTEMA DE INFORMACIÓN GEOGRÁFICA (SIG)	
4.1. Antecedentes: AQUALAB 2.0	4-2
4.2. Procedimientos de integración en el entorno SIG	4-7
4.2.1. Generación de mallas de cálculo en el entorno SIG	4-7
4.2.2. Gestión de mallas de cálculo	4-12
4.2.2.1. Transformación .AGD → .TXT	4-12
4.2.2.2. Gestión de mallas .TXT dentro del entorno SIG	4-17
4.2.2.3. Transformación .TXT → .AGD	4-32
4.2.2.4. Transformación UTM → celdas	4-33
4.2.3. Generación de mapas de sólidos en suspensión	4-42
4.3. Procedimientos de visualización de resultados	4-51
4.3.1. Visualización de resultados generados dentro del entorno AQUALAB 2.0	4-51
4.3.1.1. Resultados que implican magnitud y dirección	4-52
4.3.1.2. Resultados que implican únicamente magnitud ...	4-62
4.3.2. Visualización de resultados generados fuera del entorno AQUALAB 2.0	4-68
4.3.2.1. Resultados que implican magnitud y dirección	4-69

4.3.2.2. Resultados que implican únicamente magnitud ...	4-84
4.4. Análisis de la interacción entre el modelo desarrollado y el entorno SIG desde una perspectiva de gestión	4-92
4.4.1. Gestión de hidrogramas y polutogramas de vertido	4-93
4.4.2. Visualización del grado de cumplimiento de las Normas de Calidad Ambiental	4-95
4.4.3. Análisis estadístico	4-99
4.4.4. Superposición de distintas capas de información	4-106
4.4.4.1. Establecimiento de puntos de control y puntos de vertido/muestreo	4-106
4.4.4.2. Superposición de resultados hidrodinámicos y de transporte	4-108
4.4.4.3. Establecimiento de distintas estrategias de gestión	4-110
4.5. Conclusiones	4-111
5. APLICACIÓN DEL MODELO DESARROLLADO A LA RÍA DE SAN MARTÍN	
5.1. Descripción de la zona de estudio	5-2
5.2. Síntesis de la información disponible sobre la zona de estudio	5-3
5.2.1. Presiones existentes.....	5-3
5.2.2. Calidad del medio	5-6
5.2.3. Campaña de toma de datos	5-14
5.2.4. Determinación de propiedades físicas	5-20
5.2.5. Coeficiente de dispersión	5-27
5.2.6. Calibración de los parámetros sedimentarios	5-29
5.2.7. Análisis de sensibilidad de los parámetros involucrados en el modelo desarrollado	5-35
5.2.8. Validación de los parámetros sedimentarios	5-41

5.3. Modelado de sustancias contaminantes detectadas en la zona de estudio	5-44
5.3.1. Descripción de los casos de estudio	5-45
5.4. Discusión de resultados	5-56
5.5. Conclusiones	5-60
6. APLICACIÓN DEL MODELO DESARROLLADO A LA RÍA DE HUELVA	
6.1. Descripción de la zona de estudio	6-2
6.2. Síntesis de la información disponible sobre la zona de estudio	6-6
6.2.1. Presiones existentes	6-7
6.2.2. Calidad del medio	6-10
6.3. Análisis de los procesos de transporte de las sustancias contaminantes en la zona de estudio	6-19
6.3.1. Primera aproximación: compuesto conservativo	6-22
6.3.2. Segunda aproximación: compuesto no conservativo	6-23
6.3.3. Tercera aproximación: interacción con partículas sólidas ...	6-24
6.4. Discusión de resultados	6-28
6.4. Conclusiones	6-30
7. CONCLUSIONES Y FUTURAS LÍNEAS DE TRABAJO	
7.1. Conclusiones	7-2
7.2. Futuras líneas de trabajo	7-6
8. REFERENCIAS	

LISTA DE ESQUEMAS

Esquema 4-1. Procedimiento para la generación de mallas de cálculo	4-11
Esquema 4-2. Procedimiento para efectuar la rotación de mallas de cálculo	4-19
Esquema 4-3. Procedimiento de transformación de coordenadas UTM a celda ..	4-37
Esquema 4-4. Procedimiento para la generación de mapas de sólidos en suspensión	4-46
Esquema 4-5. Procedimiento para la visualización de resultados generados con AQUALAB 2.0 que implican magnitud y dirección	4-55
Esquema 4-6. Procedimiento para la visualización de resultados generados con AQUALAB 2.0 que implican únicamente magnitud	4-64
Esquema 4-7. Procedimiento para la visualización de resultados generados fuera del entorno AQUALAB 2.0 que implican magnitud y dirección ...	4-77
Esquema 4-8. Procedimiento para la visualización de resultados de variación temporal generados fuera del entorno AQUALAB 2.0 que implican únicamente magnitud	4-86
Esquema 4-9. Procedimiento para la visualización de resultados de variación espacial generados fuera del entorno AQUALAB 2.0 que implican únicamente magnitud	4-88

LISTA DE FIGURAS

- Figura 2-1. Discretización en capas de: a) espesor constante (coordenada z);
b) espesor proporcional a la profundidad (coordenada σ)2-19
- Figura 2-2. Líneas de ajuste para la calibración del parámetro de velocidad de
sedimentación a partir de datos experimentales2-46
- Figura 3-1. Diagrama de flujo del modelo de sólidos en suspensión utilizado3-9
- Figura 3-2. Funcionamiento del módulo de cálculo de la concentración de sólidos en
suspensión3-10
- Figura 3-3. Funcionamiento del módulo de cálculo de la concentración de
sustancias contaminantes3-14
- Figura 3-4. Funcionamiento del módulo de cálculo de la concentración de sustancias
contaminantes asociadas a los sólidos en suspensión3-17
- Figura 3-5. Esquema de celdas empleado para la discretización espacial3-19
- Figura 3-6. Esquema de resolución del método numérico de Runge-Kutta de cuarto
orden3-20
- Figura 3-7. Formato de resultados para los puntos de control3-29
- Figura 3-8. Formato de resultados para los mapas de distribución espacial3-30
- Figura 3-9. Esquema de funcionamiento del modelo desarrollado3-31

Figura 3-10. Condiciones para el estudio teórico del transporte de un frente unidimensional de concentración constante	3-32
Figura 3-11. Advección-difusión de un frente unidimensional de concentración constante	3-33
Figura 3-12. Condiciones para el estudio teórico de la desaparición de una sustancia contaminante	3-34
Figura 3-13. Valores de concentración obtenidos a partir de la solución analítica y de la solución numérica utilizando un esquema de tipo Runge Kutta de orden 4°	3-35
Figura 4-1. Barra de herramientas de AQUALAB 2.0	4-4
Figura 4-2. Malla mal georeferenciada (izq). Malla con la georeferenciación correcta (dcha)	4-5
Figura 4-3. Datos batimétricos sin tratar (izq.). Datos batimétricos tratados utilizando la propia ortofoto como guía	4-5
Figura 4-4. Malla con regiones de inundación-secado (izq.). Selección geográfica de las regiones que permanecen inundadas (arriba dcha.) y las que pueden secarse (abajo dcha.)	4-6
Figura 4-5. Representación de resultados a través de software convencional (izq.). Representación lograda con AQUALAB 2.0 (dcha.)	4-6
Figura 4-6. Incorporación de la información XYZ al SIG	4-13
Figura 4-7. Proyección de coordenadas ("Project")	4-13
Figura 4-8. Fragmentación de los puntos compuestos en elementos simples ("Multipart to Singlepart")	4-14
Figura 4-9. Despliegue de propiedades XYZ a cada punto ("Add XY Coordinates")	4-14
Figura 4-10. Unificación de la información en una única capa ("Append")	4-15
Figura 4-11. Interpolación de líneas batimétricas ("Raster Interpolation")	4-15
Figura 4-12. Delimitación de la malla de cálculo ("Extract by Mask")	4-16
Figura 4-13. Operaciones aplicables a un raster ("Raster Calculator")	4-16
Figura 4-14. Rotación de mallas con cierto ángulo de inclinación	4-19
Figura 4-15. Conversión de un raster a formato .TXT ("Raster to ASCII")	4-20

Figura 4-16. Conversión de formato .TXT a Raster (“ASCII to Raster”)4-21

Figura 4-17. Establecimiento de las propiedades del raster generado4-21

Figura 4-18. Rotación del raster generado (“Rotate”)4-22

Figura 4-19. Aspecto del raster generado originalmente y del raster rotado4-22

Figura 4-20. Identificación del eje de giro y trazado de un polígono de referencia4-23

Figura 4-21. Establecimiento del nuevo punto de origen4-23

Figura 4-22. Generación de un nuevo raster modificando el punto de origen4-24

Figura 4-23. Raster definitivo4-24

Figura 4-24. Generación de una capa editable de puntos a partir de un raster (“Raster to Point”)4-25

Figura 4-25. Procedimiento para llevar a cabo la remoción de puntos erróneos 4-28

Figura 4-26. Procedimiento para llevar a cabo la adición de puntos omitidos4-29

Figura 4-27. Procedimiento para llevar a cabo la modificación de puntos4-30

Figura 4-28. Procedimiento para llevar a cabo la modificación de puntos utilizando graduaciones de color como guía4-31

Figura 4-29. Conversión de una capa editable de puntos a raster (“Point to Raster”)4-38

Figura 4-30. Conversión del raster modificado a formato .TXT (“Raster to ASCII”)4-38

Figura 4-31. Adición de campos en una tabla de atributos (“Add Field”)4-39

Figura 4-32. Opciones de cálculo aplicables a los campos de una tabla de atributos (“Field Calculator”)4-39

Figura 4-33. Establecimiento de las propiedades de un campo creado en una tabla de atributos (“Field Properties”)4-40

Figura 4-34. Eliminación de campos innecesarios de una tabla de atributos (“Delete Field”)4-40

Figura 4-35. Adición de coordenadas en la tabla de atributos (“Add XY Coordinates”)4-41

Figura 4-36. Selección gráfica y tabular de celdas de interés	4-41
Figura 4-37. Adición de información en formato xyz ("Add XY Data")	4-47
Figura 4-38. Rotación de los puntos de muestreo para el establecimiento de coordenadas temporales	4-47
Figura 4-39. Reclasificación de intervalos de un raster ("Reclassify")	4-48
Figura 4-40. Marco para la delimitación de la zona de interpolación	4-48
Figura 4-41. Interpolación de la información dentro del marco de delimitación establecido ("Spline with Barriers")	4-49
Figura 4-42. Aspecto del raster generado mediante la herramienta "Spline with Barriers" (izq.) y del raster correspondiente a la máscara No Data/1 (dcha.)	4-49
Figura 4-43. Multiplicación de rasters ("Raster Calculator")	4-50
Figura 4-44. Generación de mallas de sólidos en suspensión a través de la interpolación de datos puntales	4-50
Figura 4-45. Visualización de corrientes de viento mediante un programa convencional (izq.) y un entorno SIG (dcha.)	4-52
Figura 4-46. Adición de capas para la visualización de resultados	4-56
Figura 4-47. Establecimiento de "símbolos graduados" como tipo de representación	4-56
Figura 4-48. Aumento de la capacidad de manejo de datos	4-57
Figura 4-49. Exclusión de datos con módulo cero	4-57
Figura 4-50. Establecimiento del ángulo de cada punto de la capa de resultados	4-58
Figura 4-51. Establecimiento de la forma de los símbolos	4-58
Figura 4-52. Establecimiento del color de los símbolos	4-59
Figura 4-53. Modificación del tamaño de los símbolos	4-59
Figura 4-54. Superposición de la información generada sobre la ortofoto de la zona	4-60
Figura 4-55. Almacenamiento de la simbología establecida en un fichero .LYR	4-60

Figura 4-56. Importación de simbología para la representación de la información4-61

Figura 4-57. Conversión de una capa de puntos a un raster ("Point to Raster") 4-61

Figura 4-58. Establecimiento de las propiedades del raster de resultados (Stretched)4-65

Figura 4-59. Representación del raster de resultados (Stretched)4-65

Figura 4-60. Visualización del raster de resultados (Stretched)4-66

Figura 4-61. Establecimiento de las propiedades del raster de resultados (Classified)4-66

Figura 4-62. Representación del raster de resultados (Classified)4-67

Figura 4-63. Visualización del raster de resultados (Classified)4-67

Figura 4-64. Transformación realizada por AQUALAB 2.0 sobre los ficheros de resultados para poder ser integrados al entorno SIG4-68

Figura 4-65. Referenciación espacial de los puntos de una malla inclinada utilizando un método analítico4-71

Figura 4-66. Adición de campos dentro de la tabla de atributos4-78

Figura 4-67. Ajuste de los datos de módulo y ángulo4-78

Figura 4-68. Eliminación de los campos innecesarios de la tabla de atributos4-79

Figura 4-69. Integración de la información de dos capas de puntos en una sola4-79

Figura 4-70. Selección del símbolo y tipo de rotación para visualizar en un SIG información generada fuera del entorno AQUALAB 2.04-80

Figura 4-71. Transformaciones requeridas para visualizar en un SIG información generada fuera del entorno AQUALAB 2.0 que implica magnitud y dirección4-83

Figura 4-72. Exportación de los atributos de una tabla a un fichero de texto4-83

Figura 4-73. Formato que debe presentar el fichero .XLS para poder ser introducido al entorno SIG4-89

Figura 4-74. Generación de gráficos de puntos de control4-89

Figura 4-75. Gestión de gráficos de puntos de control4-90

Figura 4-76. Adaptación de los ficheros de resultados generados por el modelo	4-90
Figura 4-77. Visualización de resultados mediante intervalos clasificados	4-91
Figura 4-78. Visualización de resultados mediante rampas de color	4-91
Figura 4-79. Visualización de resultados por intervalos clasificados (izq.) y rampa de color (dcha.)	4-92
Figura 4-80. Creación de un gráfico a partir de dos series de datos	4-94
Figura 4-81. Gestión de hidrogramas y polutogramas de vertido dentro de un entorno SIG	4-95
Figura 4-82. Visualización del grado de cumplimiento de las NCA	4-98
Figura 4-83. Visualización del tiempo de superación de la concentración máxima admisible de acuerdo con una NCA	4-103
Figura 4-84. Establecimiento de los límites de los intervalos de clasificación para la visualización de la probabilidad de rechazo	4-104
Figura 4-85. Establecimiento de los intervalos de clasificación y leyenda para la visualización de la probabilidad de rechazo	4-104
Figura 4-86. Análisis estadístico por celda ("Cell Statistics")	4-105
Figura 4-87. Análisis estadístico por zona ("Zonal Statistics")	4-105
Figura 4-88. Superposición de información de puntos de control, estaciones de muestreo y puntos de vertido	4-109
Figura 4-89. Superposición de información hidrodinámica y de transporte en un software convencional	4-109
Figura 4-90. Superposición de información hidrodinámica y de transporte en un entorno SIG	4-110
Figura 4-91. Superposición de información proveniente de modelos de transporte con capas de información propias de un entorno SIG	4-111
Figura 5-1. Zona de estudio y batimetría general de la Ría de San Martín (izq.). Batimetría de detalle (dcha.)	5-3
Figura 5-2. Vertidos significativos a la Ría de San Martín	5-4
Figura 5-3. Localización de los puntos de muestreo correspondientes a la Ría de San Martín	5-7

Figura 5-4. Distribución granulométrica de los sedimentos de la ría de San Martín (Datos campaña 2008)	5-12
Figura 5-5. Ondas de marea generadas	5-14
Figura 5-6. Puntos de muestreo seleccionados	5-15
Figura 5-7. Esquema de funcionamiento del equipo medidor de velocidades	5-16
Figura 5-8. Ejemplo de aplicación del método de eliminación del ruido de la señal Doppler	5-19
Figura 5-9. Apariencia del agua de uno de los puntos de muestreo (izq.) y de uno de los vertidos localizados en la zona de estudio (dcha.)	5-21
Figura 5-10. Aspecto de las partículas retenidas en los filtros de los puntos de muestreo bajo una lupa de 10 aumentos	5-22
Figura 5-11. Aspecto de las partículas retenidas en el filtro del vertido de Sniace bajo una lupa de 10 aumentos	5-23
Figura 5-12. Apariencia del sedimento húmedo de cuatro puntos de muestreo localizados en la zona de estudio	5-24
Figura 5-13. Apariencia del sedimento seco de cuatro puntos de muestreo localizados en la zona de estudio	5-25
Figura 5-14. Aspecto de las partículas de las muestras de sedimento seco bajo una lupa de 10 aumentos	5-27
Figura 5-15. Comparación de los valores de velocidad de corriente medidos y simulados en el punto de control AB-SB02S	5-31
Figura 5-16. Comparación de los valores de velocidad de corriente medidos y simulados en el punto de control AB-SB03S	5-31
Figura 5-17. Representación gráfica de la información obtenida en el punto de control AB-SB01S	5-32
Figura 5-18. Representación gráfica de la información obtenida en el punto de control AB-SB04S	5-32
Figura 5-19. Representación gráfica de la información obtenida en el punto de control AB-SB02S	5-33
Figura 5-20. Representación gráfica de la información obtenida en el punto de control AB-SB03S	5-33

Figura 5-21. Comparación de los valores simulados en los casos 2, 3, 5 y 6 con los valores medidos en los distintos puntos de control	5-40
Figura 5-22. Comparación de los valores de concentración de sólidos en suspensión medidos y simulados en el punto de control AB-SB02S	5-41
Figura 5-23. Comparación de los valores de concentración de sólidos en suspensión medidos y simulados en el punto de control AB-SB03S	5-41
Figura 5-24. Valores de sólidos en suspensión (mg/l) simulados y medidos durante la campaña 2009	5-42
Figura 5-25. Comparación de resultados medidos y simulados en distintos casos de estudio: (a) Punto de control Princes Pier (Estuario Mersey, noroeste de Inglaterra) (tomada de Wu et al., 2005); (b) y (c) Puntos de control AB-SB02S y AB-SB03S (Ría de Suances, norte de España) (generados a partir de la campaña de 2010)	5-43
Figura 5-26. Estudio de la evolución del zinc con una cinética de degradación simplificada (izq.) y considerando las interacciones que presenta con los sedimentos (dcha.)	5-48
Figura 5-27. Concentración de zinc en el agua de la zona afectada de forma más directa por los vertidos identificados en la Ría de Suances	5-49
Figura 5-28. Estudio de la evolución del cloroformo con una cinética de degradación simplificada (izq.) y considerando las interacciones que presenta con los sedimentos (dcha.)	5-51
Figura 5-29. Concentración de cloroformo en el agua de la zona afectada de forma más directa por los vertidos identificados en la Ría de Suances ...	5-52
Figura 5-30. Evaluación de la concentración de cobre en el agua de la Ría de Suances	5-54
Figura 5-31. Estudio de la evolución del plomo utilizando una concentración basal en sedimentos de 900 mg/l (izq.) y de 2100 mg/l (dcha.)	5-55
Figura 5-32. Resultados de variación espacial y temporal de sólidos en suspensión	5-57
Figura 6-1. Toponimia de las inmediaciones de la zona de estudio	6-3
Figura 6-2. Asentamiento de la actividad industrial en la Ría de Huelva	6-4
Figura 6-3. Zona de estudio y batimetría general de la Ría de Huelva	6-6
Figura 6-4. Vertidos significativos a la Ría de Huelva	6-7

Figura 6-5. Puntos de muestreo del Plan de Policía de la CMA de Andalucía	6-11
Figura 6-6. Evolución temporal de contaminantes en el Río Odiel	6-15
Figura 6-7. Evolución temporal de contaminantes en el Río Tinto	6-16
Figura 6-8. Evolución temporal de contaminantes en el Canal del Padre Santo	6-17
Figura 6-9. Puntos de muestreo AIQB	6-18
Figura 6-10. Estudio de la evolución de una emisión de zinc durante los meses de junio (izq.) y diciembre (dcha.) utilizando un modelo conservativo	6-23
Figura 6-11. Estudio de la evolución de una emisión de zinc durante los meses de junio (izq.) y diciembre (dcha.) utilizando un modelo no conservativo	6-24
Figura 6-12. Estudio de la evolución de una emisión de zinc en la columna de agua durante los meses de junio (izq.) y diciembre (dcha.) utilizando un modelo no conservativo que considera la interacción con partículas sólidas	6-26
Figura 6-13. Estudio de la evolución de una emisión de zinc en el lecho bentónico durante los meses de junio (izq.) y diciembre (dcha.) utilizando un modelo no conservativo que considera la interacción con partículas sólidas	6-27
Figura 6-14. Síntesis de resultados obtenidos mediante las tres aproximaciones planteadas	6-29
Figura 6-15. Zonas de mayor acumulación de sedimentos en la Ría de Huelva	6-30
Figura 6-16. Identificación de las masas de agua más vulnerables frente a una emisión de zinc	6-31

LISTA DE SÍMBOLOS UTILIZADOS EN EL MODELO DESARROLLADO

A	Área de intercambio entre agua y sedimento
C_0	Concentración inicial de tóxico
C_b	Concentración de sólidos en suspensión cercana al fondo
C_{bp}	Concentración de tóxico adsorbida en los sólidos en suspensión cercanos al fondo
C_{bT}	Concentración del tóxico en el lecho
C_D	Coefficiente de arrastre
C_d	Concentración del compuesto tóxico en forma disuelta
C_{dint}	Concentración del tóxico disuelta intersticial
C_p	Concentración del compuesto tóxico en forma particulada
C_T	Concentración total del compuesto tóxico
C_{T1}	Concentración total del tóxico en la columna de agua
C_{T2}	Concentración total del tóxico en el lecho
C_{wb}	Concentración de tóxico en el agua cercana al fondo
C_z	Coefficiente de fricción de Chezy
d	Diámetro de partícula
D	Función de distribución radiante
D_{liqO2}	Constante de difusión del oxígeno
D_w	Coefficiente de dispersión inducida por viento
D_x, D_y	Coefficientes de dispersión (dirección x e y)
D_z	Difusividad de remolino
E	Erosionabilidad
f_d	Fracción disuelta
f_{d1}	Fracción disuelta en el agua
f_{d2}	Fracción disuelta en el lecho
f_{oc}	Fracción masa de carbono orgánico total
f_p	Fracción particulada
f_{p1}	Fracción particulada en el agua
f_{p2}	Fracción particulada en el lecho

g	gravedad
H	Profundidad de la columna de agua
H ⁺	Concentración molar de iones hidrógeno
H _{ca}	Profundidad de la capa activa del sedimento
He	Constante de Henry en forma adimensional (He'/RT)
He'	Constante de Henry
I _o	Intensidad de la luz
K	Coeficiente lineal de desaparición
k	Constante de reacción
k _a	Tasa de hidrólisis ácida catalizada
k _{ads}	Tasa de adsorción
k _b	Tasa de hidrólisis básica catalizada
k _{B20}	Tasa de biodegradación a 20°C
k _{BT}	Tasa de biodegradación corregida por la temperatura
K _D	Coeficiente de partición
k _{deg}	Tasa de pérdida por procesos de degradación distintos de la volatilización
k _{des}	Tasa de desorción
k _{do}	Tasa de fotólisis en la superficie
k _{e(λ,max)}	Coeficiente de extinción de luz para la longitud de onda de mayor absorción luminosa
K _g	Coeficiente de intercambio de la capa gaseosa
k _H	Tasa de degradación por hidrólisis
K _l	Coeficiente de intercambio de la capa líquida
k _l	Coeficiente conjunto del proceso de volatilización en ambas capas
K _L	Tasa de transferencia de oxígeno
k _l /H	Tasa de volatilización
k _{lat}	Constante de difusión lateral
k _{long}	Constante de dispersión longitudinal
k _n	Tasa neutral de hidrólisis
K _{OC}	Coeficiente de partición de carbono orgánico
K _{OW}	Coeficiente de partición octanol – agua
k _p	Tasa de degradación por fotólisis
K _s	Coeficiente de fricción de Strickler
L	Distancia a la cual la fase disuelta penetra en el sedimento
M	Peso molecular
M _e	Coeficiente de tasa de erosión
M _{H2O}	Peso molecular del agua
M _{O2}	Peso molecular del oxígeno disuelto
mp	Punto de fusión del compuesto tóxico
M _{TOX}	Peso molecular del tóxico
n	coeficiente de rugosidad de Manning

OH^-	concentración molar de iones hidroxilo
P	Concentración del compuesto tóxico adsorbido
p_d	Probabilidad de sedimentación
Pe	Número de Pécelet
Q	Caudal
q_{ero}	Tasa de erosión
q_f	Tasa de erosión del flóculo
q_{sed}	Tasa de sedimentación
q_x, q_y	Velocidades integradas en profundidad
r	Radio de partícula
R	Constante universal de los gases ($8.206 \times 10^{-5} \text{ atm} \cdot \text{m}^3/\text{K}$)
S	Salinidad
s	Densidad específica de la partícula
S_i	Fuentes y sumideros de sólidos en suspensión
S_{Mw}	Solubilidad en agua en fracción mol
S_w	Solubilidad química en agua
T	Temperatura
u^*	Velocidad de fricción
u^*_d	Velocidad crítica de deposición
u^*_e	Velocidad crítica de erosión
u, v	Componentes de velocidad en las direcciones x e y
u^{2*_d}	Parámetro sedimentario de deposición
u^{2*_e}	Parámetro sedimentario de erosión
U_w	Velocidad del viento
V_w	Volumen de agua
v_r	Velocidad de resuspensión o erosión
w_s	Velocidad de sedimentación
w_s/H	Tasa de sedimentación
ϑ	Constante empírica equivalente a la tasa de resuspensión
α	Factor de esfericidad
α_{ero}	Coefficiente alfa de erosión
β	Coefficiente beta
δ	Porosidad
ϕ	Concentración de sólidos en suspensión en la columna de agua
ϕ_b	Concentración de sólidos en el sedimento
κ	Constante de Von Karman
λ_{burial}	Tasa de pérdida definitiva en capas más profundas del sedimento
μ_o	Viscosidad dinámica del agua dulce
μ_s	Viscosidad dinámica del agua salada
μ_w	Viscosidad dinámica del agua
v_d	Tasa de difusión
v_{Td}	Pérdida global por volatilización, fotólisis, hidrólisis y biodegradación en la fase disuelta

ν_w	Viscosidad cinemática del agua
χ	Varianza del diámetro de las partículas
θ	Factor corrector de temperatura
ρ_d	Densidad del sedimento seco
ρ_{global}	Densidad global
ρ_o	Densidad del agua dulce
ρ_p	Densidad de partícula
ρ_s	Densidad del agua salada
ρ_w	Densidad del agua
ρ_{wb}	Densidad del sedimento húmedo
τ_b	Tensión del lecho
τ_d	Tensión crítica de sedimentación
τ_e	Tensión crítica de erosión

LISTA DE TABLAS

Tabla 2-1. Condiciones de contorno para la ecuación de advección – difusión	2-5
Tabla 2-2. Ecuaciones que describen el flujo horizontal de un fluido no homogéneo bien mezclado en vertical	2-17
Tabla 2-3. Ecuaciones que describen el flujo estratificado en dos capas	2-18
Tabla 2-4. Procesos que experimentan los sedimentos cohesivos en el medio marino	2-29
Tabla 2-5. Concentración de sólidos en suspensión en distintos medios acuáticos	2-34
Tabla 2-6. Ecuaciones para el cálculo de los coeficientes de difusión turbulenta	2-34
Tabla 2-7. Constantes involucradas en el cálculo de los coeficientes de difusión turbulenta	2-35
Tabla 2-8. Ecuaciones para el cálculo de los sumideros de sólidos en suspensión	2-35
Tabla 2-9. Ecuaciones para el cálculo de las fuentes de sólidos en suspensión ...	2-36
Tabla 2-10. Constantes involucradas en el cálculo de la tasa de erosión	2-36
Tabla 2-11. Ecuaciones para el cálculo de la velocidad de sedimentación (sedimento no cohesivo)	2-37
Tabla 2-12. Ecuaciones para el cálculo de la velocidad de sedimentación (sedimento cohesivo)	2-38

Tabla 2-13. Factor de esfericidad para partículas de distinta geometría	2-39
Tabla 2-14. Constantes involucradas en el cálculo de la velocidad de sedimentación	2-40
Tabla 2-15. Ecuaciones para el cálculo de la concentración de sedimentos cercana al lecho	2-41
Tabla 2-16. Constantes involucradas en el cálculo de la concentración de sedimentos cercana al lecho	2-41
Tabla 2-17. Ecuaciones para el cálculo de la tensión del lecho	2-42
Tabla 2-18. Constantes involucradas en el cálculo de la tensión del lecho	2-43
Tabla 2-19. Ecuación para el cálculo de la tensión de sedimentación	2-43
Tabla 2-20. Constantes involucradas en el cálculo de la tensión de sedimentación	2-43
Tabla 2-21. Ecuaciones para el cálculo de la tensión de erosión	2-44
Tabla 2-22. Constantes involucradas en el cálculo de la tensión de erosión	2-44
Tabla 2-23. Ecuaciones para el cálculo de la consolidación del lecho	2-45
Tabla 2-24. Perfil de densidades del estuario de Loire en función del tiempo	2-45
Tabla 2-25. Procesos que experimentan las sustancias contaminantes en el medio marino	2-53
Tabla 2-26. Formas en las que pueden presentarse los contaminantes	2-57
Tabla 2-27. Formulaciones para el cálculo del coeficiente de partición	2-58
Tabla 2-28. Formulación para el cálculo de los procesos de degradación que experimentan las sustancias contaminantes	2-59
Tabla 2-29. Valores de porosidad en función de la concentración de sólidos en el sedimento	2-61
Tabla 2-30. Constante de Henry para algunos gases ligeramente solubles en agua	2-63
Tabla 2-31. Propiedades físicas del agua	2-63
Tabla 3-1. Sistema de ecuaciones que componen el modelo H2D	3-3
Tabla 3-2. Ecuaciones implicadas en el modelo H2DZ	3-5

Tabla 3-3. Ecuaciones que describen las componentes u y v promediadas en vertical	3-6
Tabla 3-4. Coeficientes y constantes correspondientes a las sustancias que pueden ser analizadas	3-13
Tabla 4-1. Formulaciones para la asignación de una referencia espacial a cada dato	4-81
Tabla 4-2. Intervalos de clasificación para la visualización del cumplimiento de la Norma de Calidad Ambiental (NCA)	4-97
Tabla 5-1. Localización y magnitud de los vertidos generados por empresas autorizadas a verter en la Ría de San Martín	5-4
Tabla 5-2. Límites de vertido autorizados para distintas empresas en la Ría de San Martín	5-4
Tabla 5-3. Aportación mensual de la vertiente Saja-Besaya correspondientes al período comprendido entre Octubre 1970 y Septiembre 2008	5-5
Tabla 5-4. Aportación media mensual aproximada proveniente de la confluencia Saja-Besaya (régimen natural)	5-6
Tabla 5-5. Puntos de muestro del Programa de Seguimiento Sistemático de las Masas de Agua Litorales de Cantabria localizados dentro de la zona de estudio	5-7
Tabla 5-6. Valores de salinidad determinados en la Ría de Suances entre 2005 y 2009	5-8
Tabla 5-7. Valores de temperatura determinados en la Ría de Suances entre 2005 y 2009	5-9
Tabla 5-8. Valores de pH determinados en la Ría de Suances entre 2005 y 2009	5-9
Tabla 5-9. Valores de sólidos en suspensión determinados en la Ría de Suances entre 2005 y 2009	5-10
Tabla 5-10. Valores de algunas de las sustancias prioritarias determinadas durante los análisis preliminares para su detección en aguas litorales (Junio y Noviembre de 2008)	5-11
Tabla 5-11. Distribución granulométrica de los sedimentos de la Ría de San Martín	5-11
Tabla 5-12. Escala granulométrica	5-12

Tabla 5-13. Valores medios de algunas sustancias contaminantes detectadas en los sedimentos de la Ría de San Martín entre 2005 y 2008	5-13
Tabla 5-14. Propiedades fisicoquímicas determinadas durante la campaña en los puntos de muestreo seleccionados	5-17
Tabla 5-15. Parámetros utilizados para configurar la grabación y resultados de velocidad y dirección de corriente en los puntos de muestreo seleccionados	5-20
Tabla 5-16. Dimensión y forma de las partículas de mayor tamaño retenidas en los filtros	5-23
Tabla 5-17. Determinación de la densidad de sedimento húmedo	5-24
Tabla 5-18. Determinación de la densidad de sedimento seco	5-25
Tabla 5-19. Determinación de la densidad global del lecho	5-26
Tabla 5-20. Dimensión y forma de las partículas de mayor tamaño de las muestras de sedimento seco	5-27
Tabla 5-21. Datos de velocidad de corriente y sólidos en suspensión en la zona de muestreo	5-30
Tabla 5-22. Parámetros sedimentarios correspondientes a la Ría de Suances ...	5-34
Tabla 5-23. Valores de diámetro medio de partícula de las muestras de sedimento en los cuatro puntos de muestreo seleccionados. Campañas 2008 y 2009	5-36
Tabla 5-24. Resultados del análisis de sensibilidad aplicado sobre el parámetro de tensión de sedimentación	5-38
Tabla 5-25. Determinación de los distintos errores entre los valores simulados y medidos en función de la variación del parámetro de tensión de sedimentación	5-39
Tabla 5-26. Casos de estudio planteados para el análisis del efecto de la concentración basal de zinc en agua y sedimentos	5-47
Tabla 5-27. Casos de estudio planteados para el análisis de la evolución del cloroformo en agua	5-50
Tabla 5-28. Síntesis de resultados obtenidos	5-58
Tabla 6-1. Localización y magnitud de los vertidos generados por empresas autorizadas a verter en la Ría de Huelva	6-7

Tabla 6-2. Límites de vertido autorizados para distintas empresas en la Ría de Huelva	6-8
Tabla 6-3. Evolución de los aportes metálicos industriales y de los Ríos Tinto y Odiel a la Ría de Huelva	6-8
Tabla 6-4. Datos mensuales de caudal en régimen real correspondientes al periodo comprendido entre Febrero 2002 y Enero 2004	6-9
Tabla 6-5. Aportaciones naturales de la zona 9 (Ríos Piedras, Odiel y Tinto) de la Confederación Hidrográfica del Guadiana	6-9
Tabla 6-6. Aportación media mensual aproximada de los ríos Tinto y Odiel	6-10
Tabla 6-7. Localización de las estaciones de muestreo del Plan de Policía de la CMA de Andalucía coincidentes con la zona de estudio	6-11
Tabla 6-8. Valores máximos, mínimos y medios determinados en las aguas de la Ría de Huelva entre los años 1999 y 2003	6-12
Tabla 6-9. Evolución temporal de los valores medios registrados en aguas de la Ría de Huelva entre los años 1999 y 2003	6-12
Tabla 6-10. Valores máximos, mínimos y medios determinados en los sedimentos de la Ría de Huelva entre los años 1999 y 2003	6-13
Tabla 6-11. Evolución temporal de los valores medios registrados en los sedimentos de la Ría de Huelva entre los años 1999 y 2003	6-13
Tabla 6-12. Concentración media de metales pesados en la Ría de Huelva	6-18
Tabla 6-13. Concentración de metales pesados presente en los aportes fluviales recibidos por la Ría de Huelva	6-20
Tabla 6-14. Distribución de los elementos metálicos presentes en los Ríos Tinto y Odiel	6-20
Tabla 6-15. Concentración individualizada de metales presentes en los Ríos Tinto y Odiel	6-20
Tabla 6-16. Casos de estudio planteados en función de los vertidos identificados en la Ría de Huelva	6-21
Tabla 6-17. Comparación de valores medios (modelados y reales) en agua	6-27

RESUMEN

En la presente tesis se aborda el desarrollo de un modelo de calidad del agua orientado al estudio de sustancias prioritarias y peligrosas teniendo en cuenta los efectos de la dinámica sedimentaria a fin de facilitar la gestión de zonas estuarinas. Además, con el objeto de poder llevar a cabo la integración del modelo desarrollado dentro de un Sistema de Información Geográfica (en adelante SIG), se establecen los procedimientos metodológicos necesarios. La conjugación de estas tareas permitirá fusionar los beneficios de ambos instrumentos bajo un único entorno a fin de obtener una herramienta de gestión de vertidos que aporte respuestas técnicas tomando en consideración las exigencias legislativas de la normativa vigente.

Para ello, se ha llevado a cabo una exhaustiva revisión bibliográfica con respecto a la información existente sobre el modelado numérico de sistemas estuarinos y sobre las potencialidades y funcionalidades propias de un SIG así como las posibilidades de integración de ambas herramientas. Como fruto de esta recopilación ha sido posible el planteamiento de objetivos específicos centrados, principalmente, en el desarrollo, calibración y validación de un modelo de calidad del agua euleriano bidimensional cuya integración en un entorno SIG permita, además del análisis de las 33 sustancias prioritarias y algunas sustancias peligrosas considerando su interacción con la materia en suspensión y con el lecho bentónico, el establecimiento de estrategias de gestión que puedan ser complementadas con la información espacial que proporcionan estos sistemas. De este modo, el modelo desarrollado considera aspectos que, en términos generales, se ven simplificados u omitidos en los modelos numéricos actualmente utilizados para el análisis de la evolución y transporte de sustancias

contaminantes, constituyéndose así, como una herramienta de gestión sencilla en su manejo y de gran valor en términos de la toma de decisiones sobre las medidas a aplicar en las zonas estuarinas.

Estas zonas soportan una fuerte presión antrópica debida, principalmente, a la rápida industrialización y el aumento poblacional, lo cual, se traduce en fuentes de contaminación representadas por descargas de efluentes domésticos e industriales. Tal es el caso, por ejemplo, de la Ría de San Martín en la que la extracción mineral y la actividad industrial han ido dejando huella tanto en los sedimentos como en la propia columna de agua. Otro ejemplo de ello se pone de manifiesto en la Ría de Huelva en la que, además de la presión que representa la propia actividad industrial y portuaria, los vertidos mineros y la erosión de terrenos piríticos acidifican las aguas más lejanas al mar permitiendo que los metales se mantengan en forma disuelta. Debido a la problemática que presentan, estos estuarios han sido seleccionados como zonas de estudio.

En este contexto, se ha desarrollado un modelo fundamentado en un modelo general de transporte que resuelve los términos advectivo, dispersivo y de reacción a través de la técnica de "splitting" mediante esquemas numéricos explícitos upwind y centrado y el método de Runge-Kutta de orden 4º, respectivamente. En su esquema general, gestiona información relativa a vertidos de sustancias prioritarias y peligrosas tomando en consideración el tiempo, caudal y concentración de vertido. Por su parte, a través de subrutinas específicas profundiza en el estudio de los sólidos en suspensión y de la dinámica sedimentaria a fin de determinar con un mayor nivel de detalle el transporte y evolución de sustancias contaminantes en el medio estuarino tomando en consideración las interacciones entre dichas variables.

De este modo, se ha implementado un módulo capaz de analizar el comportamiento de los sólidos en suspensión así como las interacciones que presentan con las sustancias prioritarias y peligrosas presentes en el medio, tanto en agua, como en sedimentos. Ello ha implicado la modelización de algunos procesos tales como: sedimentación y resuspensión, difusión entre la columna de agua y el lecho bentónico, degradación (hidrólisis, fotólisis y biodegradación), volatilización y pérdida definitiva en capas más profundas del sedimento.

A pesar de que, en términos generales, la forma disuelta de los contaminantes suele ser más tóxica y más reactiva química y biológicamente, el impacto de la forma particulada resulta más significativo a largo plazo debido a su capacidad de acumulación y a su habilidad de actuar como una fuente secundaria de contaminantes disueltos. Por tal motivo, se ha considerado fundamental incluir la dinámica de los sólidos en suspensión puesto que la contaminación de sedimentos es considerada por

varios organismos ambientales internacionales como el mayor riesgo en los ambientes acuáticos. En consecuencia, la predicción del transporte, erosión y deposición de los sedimentos es una labor de suma importancia para el entendimiento de las características de la calidad de las aguas. No obstante, debe tenerse presente que aunque la introducción de un mayor número de variables en el modelo permite realizar un análisis más preciso, requiere también de una mayor cantidad de información para alimentarlo.

En este sentido, con el objeto de llevar a cabo la calibración del modelo desarrollado, durante la elaboración de esta tesis se determinaron experimentalmente algunas propiedades físicas de los sedimentos de la Ría de San Martín. Asimismo, se llevó a cabo una campaña de campo específica que permitió conocer la variabilidad temporal de los sólidos en suspensión durante un período completo de marea en esta zona. Esto, a su vez, hizo posible la calibración y validación de los parámetros sedimentarios propios de esta Ría. El conocimiento de dichos parámetros permitió la calibración y validación del modelo desarrollado logrando ajustes satisfactorios en la predicción de sólidos en suspensión y de sustancias contaminantes tales como el zinc o el cloroformo cuyas cinéticas de degradación son totalmente distintas.

Adicionalmente, la validación teórica del modelo desarrollado demostró, a través de la aplicación a casos con solución analítica, que el transporte de sólidos en suspensión y de sustancias contaminantes, dentro de su dominio de aplicación, posee un rango de precisión satisfactorio.

Con base en ello, a pesar de que no fue posible la obtención de todos los parámetros necesarios para aplicar el modelo desarrollado con la misma precisión en otra zona de estudio, la utilización de parámetros genéricos permitió llevar a cabo el análisis de la evolución del zinc en otro caso real enclavado en la Ría de Huelva (concretamente en la zona portuaria). Este análisis genérico se abordó desde tres aproximaciones distintas: i) considerando al zinc como una sustancia conservativa, ii) como una sustancia no conservativa y, iii) como una sustancia no conservativa que interactúa con los sedimentos y el material en suspensión. Aún a pesar del uso de parámetros genéricos, esta última aproximación permitió observar diferencias significativas con respecto a los resultados obtenidos a través de las dos primeras en cuanto a una mejor representación de la realidad de se refiere.

Por otro lado, la propuesta de metodologías para la adecuada integración del modelo numérico desarrollado dentro de un entorno SIG representa una aportación sustancial puesto que permite establecer un referente en términos de la utilización de los resultados obtenidos de los modelos numéricos desde una perspectiva de gestión puesto que proporcionan,

además de una interfaz amigable para su uso, extraordinarias capacidades de visualización y una mayor precisión espacial.

Dicha integración permitiría la generación de una herramienta de uso general que facilitaría la toma de decisiones con respecto a las medidas que habrán de aplicarse para prevenir o, cuando menos, controlar la contaminación que experimentan los estuarios en función de los vertidos que soportan. Tal es el caso, por ejemplo, del establecimiento de las zonas de mezcla en las inmediaciones de vertidos de fuentes puntuales, la gestión de hidrogramas y polutogramas de vertido, el análisis estadístico de los resultados por celda o por zona y la superposición de información de distinto tipo, ente otros.

Todo ello posibilitaría un adecuado establecimiento de puntos de control y muestreo así como la implantación de distintas estrategias de gestión de acuerdo con las condiciones particulares del entorno cercano a la zona afectada.

En consecuencia, una herramienta como esta brindaría al gestor, además del apoyo técnico previamente mencionado, la posibilidad de reducir costes de forma significativa indicando, por ejemplo, las zonas en las que puede ser prescindible llevar a cabo campañas de campo y resaltando aquellas que, por el contrario, requieren de un control más estricto con respecto a determinados parámetros, época del año, etc. de tal forma que los recursos necesarios para ello podrían ser optimizados.