

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

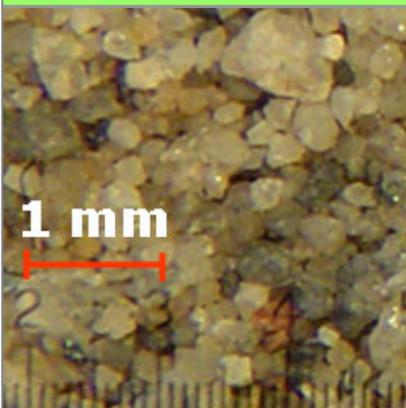
María Luisa Sámano Celorio

DIRECTORES

Andrés García Gómez

José Antonio Revilla Cortezón

Santander, 2011



2. ESTADO DEL CONOCIMIENTO

Este capítulo presenta la recopilación de la información existente con respecto al modelado numérico de sistemas estuarinos así como de las posibilidades de su integración en un Sistema de Información Geográfica (SIG).

En primer lugar, dicha recopilación se inicia con los fundamentos matemáticos que permiten llevar a cabo tales modelizaciones. Posteriormente, incide de forma breve sobre los esquemas numéricos necesarios para lograr la resolución de las ecuaciones de gobierno. Asimismo, presenta algunos modelos hidrodinámicos y de calidad utilizados actualmente para el desarrollo de aplicaciones prácticas tales como el modelado del material en suspensión y de los sedimentos así como el modelado de contaminantes de naturaleza química.

Asimismo, en este capítulo se destacan, además de las formulaciones necesarias para calcular las variables genéricas requeridas por este tipo de modelos, los elementos necesarios para llevar a cabo la calibración de parámetros específicos que dependen de la zona de estudio en la que se lleve a cabo su aplicación.

Por otro lado, la recopilación sobre el actual estado del conocimiento aborda temas tales como: la definición de los Sistemas de Información Geográfica, las potencialidades que ofrecen hasta el momento, las posibilidades de integrar en dicho entorno modelos numéricos para añadir nuevas funcionalidades de análisis y los antecedentes que hasta ahora han sustentado este campo del conocimiento.

2.1. MODELADO DE LOS SISTEMAS ESTUARINOS

Una buena representación de la realidad física es la base necesaria para cualquier modelo de calidad del agua. Por ello, es importante tener presente que el sistema estuarino es extremadamente complejo e incluye muchas variables y procesos que implican interacciones altamente no lineales. No obstante, en la actualidad, la mayoría del modelado ha abordado solo una parte del sistema o considera sistemas sumamente simplificados a fin de poder comprenderlos mejor. En general, dentro de un modelo, puede llevarse a cabo una buena representación de los fenómenos físicos, aún sin considerar aquellos biológicos y químicos. Las condiciones físicas que incluyen: corrientes, marea, oleaje, turbulencia, luz, temperatura, salinidad, materiales del lecho marino y partículas en suspensión, determinan el transporte y dispersión de todo el material, ya sea disuelto o particulado, presente en el medio marino, incluyendo tanto contaminantes como nutrientes (James, 2002).

Los modelos estuarinos usualmente se constituyen a partir de dos componentes: el hidrodinámico y el de calidad. En términos generales, los componentes hidrodinámicos son independientes de los de calidad de agua, sin embargo, estos últimos, dependen de los procesos de transporte. Por tal motivo, para cualquier modelo estuarino es necesario el entendimiento de dichas condiciones físicas para poder generar información útil basada en una representación apropiada y específica de los fenómenos físicos que se quieran estudiar en un momento concreto para un caso determinado.

La selección de un modelo numérico apropiado resulta una tarea altamente especializada, puesto que estas herramientas predictivas, inevitablemente, implican ciertas suposiciones o limitaciones y, pueden ser aplicadas únicamente por personal experimentado que conozca las teorías subyacentes. Por tal motivo, existen enormes carencias tanto en las expectativas, como en el entendimiento entre los creadores y los usuarios de un modelo (Chau, 2006). Si bien es cierto que el modelado numérico de los sistemas estuarinos requiere del conocimiento profundo de las teorías que encierran los modelos correspondientes, el acoplamiento de éstos últimos a un entorno SIG capaz de englobar el conjunto de requerimientos para el modelado de una forma amigable para el usuario, representa un valor añadido capaz de potencializar su uso, incluso, por personal menos especializado.

2.2. FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS

Tal y como se ha comentado, la modelización del comportamiento de las sustancias en el medio estuarino implica la intervención de muchas variables físicas que dirigen los procesos de transporte y transformación. Por tal motivo, para poder establecer la evolución de la concentración de las sustancias presentes en el medio a través del tiempo, es necesario hacer uso de la ecuación de transporte o de advección – difusión. A continuación se describe dicha ecuación, la cual, se constituye como el corazón de cualquier modelo numérico de este tipo.

2.2.1. Ecuación de transporte o de advección – difusión

La evolución de la concentración de una sustancia presente o introducida en un medio acuático depende de la acción conjunta de tres procesos: la advección (o transporte por las corrientes existentes en el medio acuático), la difusión turbulenta o dispersión (que conduce a un esparcimiento de la concentración de la sustancia de interés) y los procesos de transformación (físicos, químicos o biológicos, que actúan en el caso de que la sustancia sea no conservativa) (Koutitas, 1988; Fennel y Neumann, 2004; García, 2004).

Tanto la advección como la difusión pueden causar que partículas que originalmente estaban juntas se separen, sin embargo, la advección es, en principio, reversible si se invierten los campos de velocidades, mientras que la difusión no lo es. La advección por remolinos puede causar, por ejemplo, que una mancha de tinte rojo se corte en finos rayos rojos, mientras que la difusión generaría una mancha rosa de agua tintada.

La proporción en que los mecanismos de advección y difusión contribuyen al transporte final del contaminante se cuantifica en términos del número de Péclet (Ecuación 2-1):

$$Pe = \frac{uL}{D} \quad (2-1)$$

donde

u: velocidad característica de transporte del fluido (m/s)

L: longitud característica del dominio de flujo (m)

D: coeficiente de difusión (m²/s)

De este modo, para valores de $Pe > 1$ la advección domina sobre la difusión.

El efecto combinado de los tres procesos (advección – difusión – reacción) se recoge, como ya se ha mencionado, en la denominada ecuación de transporte o de advección-difusión. Dicha ecuación de conservación de masa, describe la variación de la concentración de una sustancia en un punto fijo del espacio a lo largo del tiempo, contabilizando la contribución de cada uno de los procesos anteriores.

En su expresión tridimensional dicha ecuación adquiere la siguiente forma (Lin y Shiono, 1992; Wu y Falconer, 2000):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(uC)}{\partial x} + \frac{\partial(vC)}{\partial y} + \frac{\partial(wC)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + R \quad (2-2)$$

donde

C: concentración de contaminante

t: tiempo

u, v, w: componentes de velocidad

D_x, D_y, D_z : coeficientes de difusión turbulenta en las direcciones x, y, z

R: término de reacción

mientras que en su forma bidimensional promediada en profundidad queda formulada tal y como se indica en la ecuación 2-3 (Kleinschmith y Pearce, 1992; García et al., 2010):

$$\frac{\partial(HC)}{\partial t} + \frac{\partial(uHC)}{\partial x} + \frac{\partial(vHC)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(HD_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(HD_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + R \quad (2-3)$$

donde

C: concentración promediada en profundidad

H: profundidad

t: tiempo

u, v: componentes de velocidad promediadas en profundidad

D_x, D_y : coeficientes de dispersión horizontal en las direcciones x, y

R: término de reacción

Del mismo modo, en su mínima expresión, la ecuación unidimensional de advección – difusión promediada en superficie (Ecuación 2-4), a lo largo de la dirección x, por ejemplo, quedaría definida como (Aristodemou et al., 1992; Clark et al., 1992):

$$\frac{\partial AC}{\partial t} + \frac{\partial(uAC)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x A \frac{\partial C}{\partial x} \right) + R \quad (2-4)$$

donde

C: concentración promediada en superficie

A: área

t: tiempo

u: componente de velocidad promediada en superficie

D_x : coeficiente de dispersión en la dirección x

Las condiciones de contorno que completan este modelo pueden presentar la siguiente forma (Tabla 2-1):

Condición de contorno	Expresión
Contornos cerrados	$\frac{\partial C}{\partial n} = 0$
Contornos abiertos	$\frac{\partial}{\partial n} \left(D \frac{\partial C}{\partial n} \right) = 0$ ó $\frac{\partial^2 C}{\partial n^2} = 0$ para $D \cong \text{constante}$
Fuentes de contaminación	Concentración de contaminante conocida (prefijada)

Tabla 2-1. Condiciones de contorno para la ecuación de advección – difusión (Koutitas, 1988).

Esta ecuación es aplicable a cualquier sustancia presente en la columna de agua, caracterizada por su concentración y por los procesos de transformación (o reacción) que pudiera experimentar en el medio acuático. Muchos de estos procesos, entre los que se encuentra la desaparición de algunas sustancias tóxicas, se pueden aproximar por una cinética de primer orden ($R = -k \cdot C$). No obstante, su resolución analítica sólo es posible en algunos casos en los que se consideran geometrías sencillas, flujos constantes y coeficientes de difusión turbulenta o de dispersión constantes. En la realidad, estas asunciones resultan demasiado simplificadas, por tal motivo, la resolución de la ecuación de transporte debe abordarse mediante herramientas numéricas.

2.3. APROXIMACIONES NUMÉRICAS

La variedad de comportamientos de los contaminantes obliga a desarrollar un algoritmo propio, capaz de describir el proceso de modelado para cada caso específico. Esto implica o bien una ecuación de paso de tiempo de concentración (modelos Eulerianos), o bien, una rutina de seguimiento de partículas (modelos Lagrangianos).

Ambos tipos de esquemas numéricos, son más eficaces frente a determinadas circunstancias, así pues, los esquemas numéricos eulerianos de advección pueden causar excesiva difusión cerca de gradientes de concentración pronunciados, mientras que esto no representa un problema cuando se utilizan rutinas de seguimiento de partículas. En contrapartida, la utilización de estos últimos, requiere del uso de un gran número de partículas que garanticen la retención de suficiente material en cada celda a fin de poder representar la concentración adecuadamente.

2.3.1. Modelos Eulerianos

Los métodos eulerianos trabajan en un marco de referencia fijo, lo cual, repercute en que su cálculo resulte sencillo. Además, el esquema numérico euleriano es el que demanda menores recursos computacionales. En contrapartida, la principal desventaja que presentan, es el tratamiento impreciso de la advección.

De acuerdo con García (2004), los esquemas basados en aproximaciones de primer orden para los términos advectivos resultan en un algoritmo estable a expensas de la introducción de una gran dispersión artificial. Como ejemplo de estos esquemas, cabe mencionar, el esquema *UPWIND* que a pesar de presentar una excesiva difusión numérica, es el método más sencillo de diferencias finitas que es estable y a la vez está libre de oscilación numérica. Además, de que su implementación en los códigos numéricos resulta sumamente sencilla. Cabe mencionar que tal difusión numérica derivada del uso del esquema *UPWIND* es menor que la difusión real, por tal motivo, el error resultante no será consecuencia de su uso únicamente, sino también, incluirá otras fuentes de error derivadas de aproximaciones y suposiciones que deben realizarse durante la modelización. Este esquema ha sido utilizado por varios autores que consideran que resuelve eficientemente la fracción advectiva de las ecuaciones derivadas de la ecuación de gobierno (Gross et al., 1999; García et al., 2008; García et al., 2010a)

Por su parte, la aproximación *LEAPFROG* centrada (Gross et al., 1999a), por ejemplo, siendo sencilla y eficiente, proporciona una solución que no tiene disipación, pero sí error dispersivo. Por tal motivo, este esquema requiere de un filtro capaz de controlar las oscilaciones generadas en zonas con elevados gradientes de concentración. No obstante, tras este control, los resultados obtenidos mediante este esquema pueden ser similares a los obtenidos utilizando un esquema *UPWIND*.

Entre muchos otros, cabe mencionar también los esquemas *QUICK* y *QUICKEST* (Leonard, 1979). Estos esquemas se corresponden con un orden de precisión superior. El esquema *QUICK*, de elevada eficiencia computacional y sencillez, reduce el error debido a la difusión numérica. Sin embargo, a pesar de su mejor precisión, en ausencia de difusión física o para bajos niveles de ésta, genera soluciones oscilatorias. Por su parte, el esquema *QUICKEST* proporciona una solución precisa sin fuertes oscilaciones que resulta estable para advección pura. Estos métodos de orden superior proporcionan mejores resultados a expensas de la inclusión de un mayor número de puntos en el esquema numérico, lo cual, conlleva a la aparición de ciertas dificultades en los contornos. Finalmente, el esquema *ULTIMATE QUICKEST* (Lin y Falconer, 1997; Kashefipour et al., 2007), es una variante del anterior que reduce las oscilaciones de las diferencias centradas y la difusión artificial mediante la introducción de un limitador denominado "*Universal Limiter for Transient Interpolation Modeling of the Advective Transport Equation*" (*ULTIMATE*).

2.3.2. Modelos Lagrangianos

Los modelos matemáticos Lagrangianos, basados en métodos de movimiento aleatorio, son herramientas bien establecidas para la gestión de la dispersión de las descargas de contaminantes en el ambiente acuático. Estos modelos tratan tales descargas como sueltas regulares de partículas discretas, quedando representada una cantidad definida de contaminante en cada una de ellas.

Durante el modelado, dichas partículas se mueven bajo la influencia de las corrientes de flujo previamente establecidas. La cantidad de contaminante representado por cada partícula en el modelo puede decrementarse a través del tiempo para representar procesos de desaparición. Por otro lado, si se requiere conocer la concentración en un punto determinado, solamente es necesario llevar a cabo un sencillo cálculo para relacionar el número de partículas contenidas en un espacio fijo con el número de partículas incluidas en una malla de concentración conocida. Esto es, por ejemplo, si se sabe que 20 partículas dentro de una malla se corresponden con una concentración de 10 ppm, entonces, 5 partículas, equivaldrían a 2.5 ppm.

En este tipo de modelos la difusión se representa a través del movimiento aleatorio de dichas partículas determinado por el valor de la difusividad de remolino. Su uso es aconsejable para resolver problemas que implican grandes gradientes de contaminación debido a que minimizan los efectos de la difusión numérica, no obstante, una desventaja puede ser el número de partículas necesario para asegurar que las celdas no queden vacías (James, 2002). La simulación de la dispersión de trazadores conservativos, radionucléidos o derrames de hidrocarburos en el entorno marino son algunos ejemplos de las aplicaciones en las que se han utilizado este tipo de modelos de seguimiento de partículas (Periáñez, 2007).

Adicionalmente, entre los beneficios de estos modelos sobre los modelos de advección – difusión pueden incluirse la eficiencia computacional, la minimización de la difusión numérica y el esfuerzo computacional dirigido (Mead, 2004). No obstante, requieren del uso de sistemas de coordenadas móviles que incrementan de forma significativa la carga computacional (Suh, 2006). Además, ante la necesidad de disponer de un gran número de partículas, éstos demandan, en general, grandes recursos de memoria e introducen un tiempo de cálculo adicional para la determinación de las trayectorias de éstas dentro de cada paso de tiempo (García, 2004).

2.3.3. Modelos Eulerianos – Lagrangianos

Los métodos de aproximaciones Lagrangianas se han utilizado en el análisis de la dispersión debido a que comparados con los métodos Eulerianos, generan menos errores numéricos y mantienen mejor el significado físico durante el seguimiento e identificación de la localización de las partículas. Sin embargo, tal y como se ha comentado, los métodos Lagrangianos requieren de un sistema de coordenadas móvil, lo cual incrementa sustancialmente el esfuerzo computacional. Por tal motivo, se han desarrollado métodos combinados aplicables a sistemas en los que domina la advección, explotando así las fortalezas de ambos métodos.

Estos métodos híbridos surgen en el intento de compatibilizar la información del flujo de los métodos Lagrangianos mientras se mantiene la sencillez y la utilidad de la malla euleriana fija. En los esquemas semilagrangianos la parte advectiva de la ecuación de transporte se resuelve mediante el uso de técnicas numéricas lagrangianas mientras que el término difusivo se aproxima por diferencias finitas, elementos finitos o técnicas similares.

La principal ventaja de usar un método Euleriano – Lagrangiano estriba en la posibilidad de usar números de Courant grandes, lo cual resulta de

particular interés para aguas superficiales cuyos flujos están dominados por la advección (Casulli, 1990).

No obstante, a pesar de las ventajas que proporcionan estos métodos, generan resultados erróneos cerca de los puntos de emisión, por tal motivo, se han desarrollado métodos de seguimiento aleatorio de la trayectoria de las partículas (random walk particle tracking) que evitan los errores numéricos provocados por los métodos numéricos de malla fija (Suh, 2006). Asimismo, cabe reconocer también, que una desventaja significativa de estos métodos radica en sus pobres propiedades en cuanto a conservación de masa se refiere (García, 2004). Al respecto, se ha podido constatar que estos errores provienen del uso en estos modelos de la forma no conservativa de la ecuación de advección – difusión (Gross et al., 1999a) pudiendo eliminarse empleando técnicas de interpolación basadas en el flujo (Manson y Wallis, 1999).

2.4. MODELOS HIDRODINÁMICOS

El estudio conjunto de la hidrodinámica y la calidad del agua en zonas litorales requiere el desarrollo de una estructura común que permita la resolución de las ecuaciones que representan, por un lado, el comportamiento físico del agua (conservación de masa y ecuaciones de cantidad de movimiento) y por otro lado, las ecuaciones de transporte de masa (ecuaciones de advección-difusión-reacción de sustancias disueltas en el agua) (Pinho et al., 2004).

Tal y como se desprende de la ecuación de advección – difusión, para realizar el estudio de la evolución de cualquier sustancia u organismo presentes en la columna de agua en el medio marino, es condición indispensable conocer el campo de velocidades en cada punto de la zona de interés.

En general las corrientes predominantes obedecen a cuatro causas fundamentales: marea, viento, rotura del oleaje y corrientes baroclínicas. Además, pueden existir otras corrientes generadas por fenómenos de gran escala difíciles de predecir y modelar que no tienen periodicidad ni magnitud suficiente, por lo que resulta habitual prescindir de ellas en la mayor parte de los casos (GIOC, 1990; Álvarez, 1996).

Actualmente, el campo del modelado hidrodinámico incluye una variedad de aproximaciones comúnmente empleadas en diversos estudios. La rápida evolución de la informática ha permitido el desarrollo del área

correspondiente al modelado hidrodinámico favoreciendo que la mayoría de los modelos sean de código libre, es decir, que estén disponibles de forma gratuita para su uso con fines científicos. En todos ellos, las ecuaciones básicas que sustentan al modelo hidrodinámico son universalmente conocidas, no obstante, existe una gran variedad de métodos para resolverlas. Por tal motivo, es necesario contar con una amplia variedad de técnicas de modelado a fin de satisfacer las diversas aplicaciones que puedan presentarse.

De este modo, la mayoría de estos códigos resuelven alguna forma de las ecuaciones tridimensionales de Navier-Stokes complementándolas con ecuaciones de conservación del volumen de agua y de la salinidad. Dichos códigos utilizan mallas estructuradas o no estructuradas y se basan, comúnmente, en diferencias finitas, elementos finitos o aproximaciones híbridas que implican volúmenes finitos.

Los modelos de **diferencias finitas** requieren que la totalidad de la malla de cálculo contenga celdas de las mismas dimensiones, no obstante, a fin de resolver el flujo con mayor precisión, es posible implementar un refinamiento de la malla en la región de interés de modo que se resuelva primero el dominio completo con una malla gruesa y después, el subdominio con celdas de mayor resolución, siempre y cuando sea viable.

Por su parte, los métodos de **elementos finitos** permiten una mayor flexibilidad mediante la subdivisión del sistema en triángulos que pueden variar en forma y tamaño. Asimismo, permiten seguir fielmente la morfología y la batimetría de la zona de estudio además de que hacen posible una mejor representación de aquellas áreas donde la actividad hidrodinámica es más interesante e importante. Actualmente, esta aproximación es ampliamente utilizada para la descripción hidrodinámica de lagunas y áreas costeras. Esto se debe a que en estas zonas, usualmente caracterizadas por su compleja batimetría y morfología, la técnica de elementos finitos tiene la ventaja de poder proveer una adecuada resolución en las distintas áreas de interés dentro de la zona de estudio (alta resolución en las entradas y canales y baja resolución en las zonas llanas).

Con respecto al método de **volúmenes finitos**, cabe mencionar que es un procedimiento de discretización que integra la ecuación diferencial original sobre un volumen finito, es decir, un trozo de intervalo (1D), superficie (2D) o volumen (3D) cuya forma concreta depende de la malla y del sistema de coordenadas que se esté empleando. Independientemente de la dimensionalidad del problema se sigue hablando de volúmenes finitos cuando uno se refiere a los trozos en los que se ha subdividido el dominio. De este modo se obtienen los balances para cada una de las zonas discretas en las que se ha subdividido el dominio global.

En la literatura científica se encuentran numerosos ejemplos de casos de aplicación de diferentes modelos hidrodinámicos de capacidades distintas, pero que, en su mayoría, comparten las aproximaciones previamente descritas. Algunos están diseñados para el análisis bidimensional, mientras que otros son capaces de resolver la forma tridimensional de las ecuaciones correspondientes.

Así, por ejemplo, el modelo **BFHYDRO** es un modelo hidrodinámico bidimensional de coordenadas esféricas dependiente del tiempo que ha sido aplicado exitosamente en aguas costeras y estuarinas. Este modelo resuelve un sistema de ecuaciones diferenciales que describen la conservación de masa, momento, salinidad y temperatura (Sankaranarayanan y French McCay, 2003). Su aplicación se ha concretado de forma satisfactoria en escenarios tales como, la región del Puerto de Nueva York (Sankaranarayanan, 2005), la interconexión del estuario australiano del Río Nerang con el sistema de los Lagos Burleigh (Zigic et al., 2005), la Bahía de San Francisco (Sankaranarayanan y French McCay, 2003) o la Bahía Buzzards en Massachusetts (Sankaranarayanan, 2007) entre otros.

El modelo **LAMFE** puede ser utilizado en ríos y estuarios cuya hidrodinámica presente un patrón verticalmente bidimensional, es decir, en aquellos en los que los parámetros de calidad de agua varíen tanto en la dirección vertical como en la longitudinal, pero que permanezcan relativamente homogéneos en la dirección lateral. Este modelo asume presión hidrostática y la aproximación de Boussinesq. Aunque este modelo utiliza coordenadas cartesianas sin ningún tipo de transformación, puede ajustarse a la topografía del fondo utilizando celdas que se adaptan a éste, resultando así en un sistema híbrido que contiene en el interior celdas rectangulares, mientras que en la superficie y en las cercanías del fondo, celdas irregulares. Ha sido aplicado, por ejemplo, en el estuario del río Alafia (Florida) con el objetivo de simular las trayectorias de partículas conservativas en ríos estrechos y estuarios de anchura variable (Chen, 2007).

El modelo de volumen finito **FVCOM** (Finite Volume Coastal Ocean Model) es un modelo hidrodinámico diseñado para la simulación de procesos hidrodinámicos y de transporte en ríos, lagos, estuarios y aguas costeras. Este modelo resuelve, simultáneamente, las ecuaciones tridimensionales de movimiento para velocidad y elevación de superficie así como las ecuaciones de transporte para la temperatura y salinidad en el marco de un volumen finito. Para representar la geometría horizontal, este modelo utiliza una malla triangular, mientras que para la dirección vertical utiliza la coordenada sigma a fin de ajustarse mejor a la morfología del fondo (Frick et al., 2007). Su utilización queda evidenciada en numerosas experiencias tales como: el estudio de circulación e intercambio entre el Lago Ontario y

la cuenca Kingston ubicada al noreste de éste (Shore, 2009), el análisis de los procesos que afectan el desarrollo de hipoxia estacional en la plataforma Louisiana-Texas (Wang y Justic, 2009), el estudio numérico de las asimetrías de marea en el arroyo Okatee (Carolina del Sur) (Huang et al., 2008), la simulación de la circulación de marea y la estratificación salina en la región intermareal del estuario del Río Skagit (Washington) (Yang y Khangaonkar, 2009) o el estudio de las fuentes de variabilidad en los patrones de circulación del Golfo de Maine (Pringle, J. M. 2006), por mencionar algunos.

El modelo **ROMS** (Regional Ocean Modelling System) es el resultado de la evolución del modelo SCRUM (S-coordinate Rutgers University Model) que se ha expandido para incluir una variedad de opciones tales como: esquemas de advección de orden superior, algoritmos de gradientes de presión más precisos, diversas parametrizaciones a escala de sub-malla y algunos módulos específicos (atmosférico, oceánico, bentónico, biológico, etc.). Este modelo ha sido utilizado para simular la circulación del agua en distintas regiones de los océanos del mundo a distintas escalas (local y de cuenca) (Grifoll et al., 2009). Ha sido ampliamente utilizado en diversos estudios llevados a cabo en distintas localizaciones geográficas. Por citar algunos ejemplos, cabe comentar: la aplicación a un sistema costero baroclínico con upwelling (Di Lorenzo et al., 2007); la búsqueda de la combinación óptima entre algoritmos numéricos, paso de tiempo y modo de partición (splitting) (Shchepetkin y McWilliams, 2005); la simulación de la dinámica oceánica en el sudoeste tropical del Atlántico a lo largo de la costa brasileña (Silva et al., 2009); la simulación numérica de la circulación estival en la Bahía de Todos Santos en Ensenada, B.C. Mexico (Mateos et al., 2009) o la investigación sobre los efectos del upwelling en los brotes de algas en la costa occidental de Florida (Lanerolle et al., 2006).

El modelo **POM** (Princeton Ocean Model) es un modelo hidrodinámico tridimensional de diferencias finitas semi-implícito que puede ser utilizado para determinar la variación temporal y espacial de elevación de superficie, salinidad, temperatura y velocidad en función del viento, marea, flotabilidad y fuerzas de Coriolis. Este modelo utiliza la coordenada sigma en la dirección vertical (para ajustarse a la topografía del lecho) y la coordenada ortogonal curvilínea para la dirección horizontal (para ajustarse a la línea de costa). Asimismo, resuelve un sistema acoplado de ecuaciones diferenciales que describen la conservación de masa, momento, calor y salinidad en cada elemento de la malla. Además, incorpora un submodelo de segundo orden que provee la viscosidad de remolino y la difusividad de mezclado vertical (Zhang, 2006; Huang, 2007). Cabe mencionar que cuenta con un esquema, desarrollado también en la Universidad de Princeton, para trabajar con mallas que presentan fenómenos de inundación y secado (Oey, 2005).

El modelo **EFDC** (Environmental Fluid Dynamics Code) es un modelo multipropósito para la simulación tridimensional de flujo, transporte y procesos biogeoquímicos en aguas superficiales tales como ríos, lagos, estuarios, embalses y áreas costeras que utiliza una coordenada vertical sigma y coordenadas horizontales curvilíneas ortogonales. Su estructura se compone de cuatro módulos principales: i) hidrodinámico, ii) de calidad de agua, iii) de transporte de sedimentos y iv) de tóxicos. El módulo hidrodinámico se compone, a su vez, de otros seis bloques que incluyen dinámica (profundidad de agua, velocidad, mezclado, etc.), trazadores, temperatura, salinidad y vertidos de campo cercano y lejano. Dicho módulo se ha visto fortalecido con la introducción de la resistencia de la vegetación, los procesos de inundación – secado y la representación de la estructura hidráulica, entre otros. De este modo, es posible su aplicación sobre marismas o sistemas de flujo controlado, por ejemplo. (Ji et al., 2001; Liu y Huang, 2009). Este modelo ha sido aplicado, por ejemplo, para llevar a cabo el modelado tridimensional de los procesos hidrodinámicos del estuario de Santa Lucía, en la costa sur de Florida (Ji et al., 2007); para realizar simulaciones de procesos estuarinos que implican fenómenos de inundación – secado (Ji et al., 2001) o para desarrollar estudios numéricos de estratificación salina (Jiang y Shen, 2009). Por último, cabe comentar que este modelo provee la información hidrodinámica necesaria al modelo de calidad de agua WASP.

El modelo **COHERENS** es un modelo tridimensional multipropósito de diferencias finitas. Este modelo permite el acoplamiento de distintos submodelos que simulan procesos físicos y biológicos, así como el transporte y transformación de sedimentos y contaminantes. En este modelo las ecuaciones diferenciales para temperatura y salinidad no solo representan ecuaciones regulares de advección - difusión de tipo escalar, sino que incluyen operadores de difusión horizontal y términos de fuentes y sumideros (Marinov et al., 2006). Mediante este modelo ha sido posible, entre otras aplicaciones, calcular las escalas de tiempo de renovación del agua (Ribbe et al., 2008), explorar el ciclo térmico de las aguas costeras (Umgiesser et al., 2002) y analizar los efectos del oleaje en el coeficiente de arrastre superficial así como la longitud de mezclado superficial (Liang et al., 2006).

El modelo tridimensional **MOHID** ha demostrado su habilidad para simular flujos estuarinos y costeros complejos en numerosas aplicaciones (Coelho et al., 1999; Cancino y Neves, 1999a; Martins et al., 2001; Vaz et al., 2007; Vaz et al., 2009) que tratan con lagunas costeras mesomareales, canales mareales y sistemas estuarinos. Asimismo, resuelve la ecuación de transporte para salinidad y temperatura. Este modelo asume un equilibrio hidrostático y una aproximación de Boussinesq. Utiliza una aproximación de volumen finito para discretizar la ecuaciones, de este modo, la forma discreta de las ecuaciones gobernantes se aplica macroscópicamente al

volumen de control (celda), lo que hace que las ecuaciones sean independientes de la geometría de la celda y, por tanto, permite el uso de una coordenada vertical genérica (Ruiz-Villarreal et al., 2002).

El modelo **SELFÉ** es un modelo tridimensional semi-implícito Euleriano-Lagrangiano de elementos finitos que resuelve las ecuaciones de Reynolds y de Navier-Stokes para la conservación de masa, momento y salinidad bajo las aproximaciones hidrostática y de Boussinesq para obtener elevaciones de superficie libre, velocidad del agua en las tres dimensiones y valores de salinidad (Zhang y Baptista, 2008). Este modelo ha sido aplicado, por ejemplo, en el estudio del tiempo de residencia y de la edad de las sustancias disueltas en un estuario parcialmente mezclado (Liu et al., 2008).

El modelo **MIKE 3** es un modelo hidrodinámico tridimensional general para la simulación de flujo en estuarios, bahías y zonas costeras y oceánicas. Este modelo usa un sistema multi-coordenada en la dirección vertical y un sistema de coordenadas rectangulares en la dirección horizontal. A diferencia de la coordenada sigma que utiliza el mismo número de capas en zonas someras y profundas, el sistema multi-coordenada permite usar menos capas en las zonas someras que en las zonas profundas. Este modelo permite simular la distribución de salinidad y temperatura (Pietrzak et al., 2002). La aplicación de este modelo en aguas costeras de Singapur demostró que tanto las elevaciones de marea, como las velocidades de corriente predichas por el modelo coincidían satisfactoriamente con las mediciones de campo (Zhang, 2006).

Entre algunos otros ejemplos de modelos hidrodinámicos utilizados en aplicaciones de aguas estuarinas o costeras cabe destacar: el modelo promediado lateralmente **LAEM** desarrollado a partir de un modelo bidimensional de embalses mediante la incorporación de mareas, salinidad y los contornos constituyentes (Kurup et al., 2000); el modelo bidimensional de elementos finitos **SHYFEM** (Ferrarin y Umgiesser, 2005); el modelo **TISAT** (promediado lateralmente) que permite reproducir adecuadamente los fenómenos de estratificación (Kurup et al., 2000); el modelo **MARS3D** capaz de calcular, además del transporte de calor y salinidad, corrientes, elevaciones de superficie libre y concentraciones de sustancias disueltas bajo la influencia de la marea, el viento y, si ha lugar, los aportes fluviales (Jouon et al., 2006); o los modelos de diferencias finitas **LMT2D** y **LMT3D** que se corresponden, respectivamente, con un modelo bidimensional promediado en profundidad y con un modelo tridimensional baroclínico no lineal (Rajar y Cetina, 1997).

Por último, los modelos hidrodinámicos **H2D** y **H2DZ**, desarrollados por la Universidad de Cantabria, permiten, respectivamente, analizar las corrientes debidas a la onda de marea integrando las ecuaciones de onda

larga promediadas en vertical y el estudio cuasi-tridimensional de las corrientes debidas al viento. El modelo H2D se deriva de las ecuaciones de Navier-Stokes y emplea un método implícito de dirección alternada para resolver el sistema de ecuaciones. A medida que se resuelve cada paso de tiempo, se van obteniendo los valores de velocidad y de superficie libre en cada punto de la malla de cálculo. Seguido por el cálculo de la densidad, al resolver de forma explícita las ecuaciones de transporte de temperatura y salinidad (GIOC, 1990; García et al., 2010; García et al., 2010a). Por su parte, el modelo H2DZ resulta válido para la evaluación del campo de velocidades originado por un viento estacionario en dirección y velocidad en zonas de plataformas suaves con profundidades pequeñas. La mecánica operativa para la resolución de este modelo consiste en el cálculo de las componentes U y V promediadas en vertical y la posterior obtención de la distribución de las componentes de velocidad puntual u y v en profundidad, mediante una aproximación parabólica. En el caso de profundidades muy pequeñas podría admitirse que el efecto del viento es totalmente transmitido hasta el fondo, con lo que las ecuaciones de Navier-Stokes de continuidad y cantidad de movimiento siguen siendo representativas (Álvarez, 1996; García et al., 2010).

Adicionalmente, cabe comentar que para simulaciones que implican **masas de agua estratificadas**, es esencial modelar adecuadamente las picnoclinas, es decir, los gradientes acentuados de densidad, puesto que éstas pueden formar barreras para los procesos de intercambio, o incluso, representar un factor importante en la distribución de momento.

La densidad varía en el espacio tridimensional debido a las variaciones de salinidad y de temperatura, tanto en horizontal como en vertical. Con base en el principio de conservación de calor y de sales se establecen dos ecuaciones (Ecuaciones 2-5 y 2-6) necesarias para adaptar un modelo homogéneo (de densidad constante en el que la fuerza de gravedad está uniformemente distribuida a través de la masa del fluido) a uno no homogéneo (en el que la no homogeneidad es precisamente el factor generador de flujo o el factor que influye en las condiciones hidrodinámicas) (Koutitas, 1988).

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial(cu)}{\partial x} + \frac{\partial(cv)}{\partial y} + \frac{\partial(cw)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_h \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_h \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_v \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (2-5)$$

donde:

c: temperatura o salinidad

D_h : coeficiente de difusión horizontal

D_v : coeficiente de difusión vertical

de este modo, queda representada la difusión advectiva turbulenta de una sustancia conservativa con coeficientes de difusión horizontal y vertical diferentes. La ecuación de estado que relaciona la densidad (ρ) con la salinidad y la temperatura, puede aproximarse a una ecuación lineal (Ecuación 2-6):

$$\rho = \rho_o(1 + ac) \quad (2-6)$$

donde a , en el caso de la función $\rho(t)$, es el coeficiente de expansión volumétrica.

Finalmente, la última distinción entre los modelos homogéneos y no homogéneos de circulación de fluidos se refiere a la distribución de la magnitud de la viscosidad de remolino. Esta magnitud describe la tasa de difusión de momento sobre la profundidad. En el caso de un gradiente de densidad excesivo a lo largo de la interfase, el momento no puede difundirse a través de la pycnoclina. La parametrización de dicho proceso físico se lleva a cabo a través de la distribución de la viscosidad de remolino. Es en este punto donde se implica un parámetro adimensional, el número de Richardson (Ecuación 2-7), definido como:

$$R_i = \frac{g \frac{\partial \rho}{\partial z}}{\rho \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2} \quad (2-7)$$

Un R_i grande es reflejo de gradientes de densidad pronunciados en la pycnoclina. La cuantificación de la influencia de este parámetro en la viscosidad de remolino usualmente se lleva a cabo a través de la siguiente relación (Ecuación 2-8):

$$v_v = v_{v\text{homog}} \cdot (1 + aR_i)^{-b} \quad (2-8)$$

donde:

$v_{v\text{homog}}$: viscosidad de remolino para el fluido homogéneo

a y b : coeficientes fijados por mediciones in situ, $a \approx 10$ y $b \approx 0.5$.

Existen diversos modelos capaces de analizar los efectos de la densidad. La aproximación más simple es el modelo de flujo horizontal de un fluido no homogéneo bien mezclado en vertical. Este modelo describe la circulación con variaciones de densidad debidas a la advección – difusión en un dominio costero de aguas someras conectado con el mar abierto (un dominio infinito de densidad constante) y con los aportes de agua dulce que vienen desde fuentes de agua basadas en tierra. En él se asume que el

mezclado vertical es completo y que sólo las diferencias de la densidad horizontal dirigen o regulan la circulación (Tabla 2-2).

En la mayoría de los flujos de superficie libre en aguas naturales, la gravedad ejerce una influencia dominante tanto en la superficie libre como en la estratificación debida a la densidad (Tabla 2-3). En contrapartida, en la mayoría de los casos, la topografía del lecho ejerce una influencia marginal con respecto a la posición de la superficie libre, sin embargo, esta influencia es notable en las pycnoclinas.

Por tal motivo, una técnica comúnmente utilizada en aplicaciones de gran escala dependientes del tiempo para modelos de flujo 3D en estuarios y costas consiste en la transformación de las coordenadas Cartesianas (x,y,z) al sistema (x,y,σ), donde $\sigma=z/H(x,y)$ y $H(x,y)=h(x,y)+\zeta(x,y)$ es la profundidad local del agua. De este modo, la malla transformada es capaz de ajustarse tanto al movimiento de la superficie libre como a la topografía del fondo (Figura 2-1)(CHN, 1995; Castanedo y Medina, 2002; García, 2004).

Modelo de flujo horizontal de un fluido no homogéneo bien mezclado en vertical	
<p>Entrada de agua dulce q_d</p> <p>Agua salina</p> <p>ζ_i</p> <p>U_i S_i P_i U_{i+1}</p> <p>h</p> <p>Δx</p> <p>S₁ Salinidad conocida en el contorno</p>	<p>ζ: superficie libre t: tiempo x: longitud h: calado u: velocidad g: gravedad ρ: densidad k: coeficiente de fricción del lecho S: salinidad R: coeficiente de dispersión α: coeficiente de relación lineal ρ - S</p>
Ecuación de continuidad	$\frac{\zeta_i^{n+1} + \zeta_i^n}{\Delta t} = \frac{1}{2\Delta x} [(h_{i+1} + h_i) \cdot u_{i+1}^n - (h_i + h_{i-1}) \cdot u_i^n]$
Ecuación de equilibrio	$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -\frac{u_i^n}{2\Delta x} (u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) - \frac{g}{\Delta x} (\zeta_i^n - \zeta_{i-1}^n) - \frac{g(h_i + h_{i-1})}{4\Delta x} \cdot (\ln \rho_i^n - \ln \rho_{i-1}^n) - \frac{2ku_i^n}{(h_i + h_{i-1})}$
Ecuación de conservación de sales	$\frac{S_i^{n+1} + S_i^n}{\Delta t} = -\frac{1}{g\Delta x} \left[(S_{i+1}^n + S_i^n) \cdot u_{i+1}^n - (S_i^n + S_{i-1}^n) \cdot u_i^n + \frac{R}{\Delta x^2} (S_{i+1}^n - 2S_i^n + S_{i-1}^n) \right]$
Ecuación de estado	$\rho_i^{n+1} = \rho_o (1 + \alpha S_i^{n+1})$

Tabla 2-2. Ecuaciones que describen el flujo horizontal de un fluido no homogéneo bien mezclado en vertical (Koutitas , 1988).

Modelo de flujo estratificado (Modelo de 2 capas)	
	<p> ζ: superficie libre t: tiempo x: longitud h: calado u: velocidad en x v: velocidad en y g: gravedad f: factor de Coriolis ρ: densidad λ: razón de densidad (agua dulce/agua salada) τ_s: Tensión en la superficie τ_i: Tensión en la interfase τ_b: Tensión en el lecho k_w: coeficiente de fricción del viento $\approx 10^{-6}$ k_i: coeficiente de fricción de interfase $\approx 10^{-3}$ k_b: coeficiente de fricción del lecho $\approx 10^{-2}$ W_x: velocidad del viento en x W_y: velocidad del viento en y </p>
Ecuaciones de continuidad en ambas capas	$\frac{\partial \zeta_o}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u_o h_o) + \frac{\partial}{\partial y}(v_o h_o) = 0$ $\frac{\partial(\zeta - \zeta_o)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uh) + \frac{\partial}{\partial y}(vh) = 0$
Ecuaciones de equilibrio de fuerzas en x e y en ambas capas	$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -g \frac{\partial \zeta}{\partial x} + \frac{\tau_{sx} - \tau_{ix}}{\lambda \rho_o h} + fv$ $\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + u \frac{\partial v}{\partial y} = -g \frac{\partial \zeta}{\partial y} + \frac{\tau_{sy} - \tau_{iy}}{\lambda \rho_o h} - fu$ $\frac{\partial u_o}{\partial t} + u_o \frac{\partial u_o}{\partial x} + v_o \frac{\partial u_o}{\partial y} = -\lambda g \frac{\partial \zeta}{\partial x} - (1 - \lambda)g \frac{\partial \zeta_o}{\partial x} + \frac{\tau_{ix} - \tau_{bx}}{\rho_o h_o} + fv_o$ $\frac{\partial v_o}{\partial t} + u_o \frac{\partial v_o}{\partial x} + v_o \frac{\partial v_o}{\partial y} = -\lambda g \frac{\partial \zeta}{\partial y} - (1 - \lambda)g \frac{\partial \zeta_o}{\partial y} + \frac{\tau_{iy} - \tau_{by}}{\rho_o h_o} - fu_o$ $\frac{\tau_{sx}}{\rho_o} = k_w W_x \sqrt{(W_x^2 + W_y^2)} \qquad \frac{\tau_{sy}}{\rho_o} = k_w W_y \sqrt{(W_x^2 + W_y^2)}$ $\frac{\tau_{ix}}{\rho_o} = (u - u_o)k_i \sqrt{[(u - u_o)^2 + (v - v_o)^2]} \qquad \frac{\tau_{iy}}{\rho_o} = (v - v_o)k_i \sqrt{[(u - u_o)^2 + (v - v_o)^2]}$ $\frac{\tau_{bx}}{\rho_o} = k_b u_o \sqrt{(u_o^2 + v_o^2)} \qquad \frac{\tau_{by}}{\rho_o} = k_b v_o \sqrt{(u_o^2 + v_o^2)}$

Tabla 2-3. Ecuaciones que describen el flujo estratificado en dos capas (Koutitas , 1988).

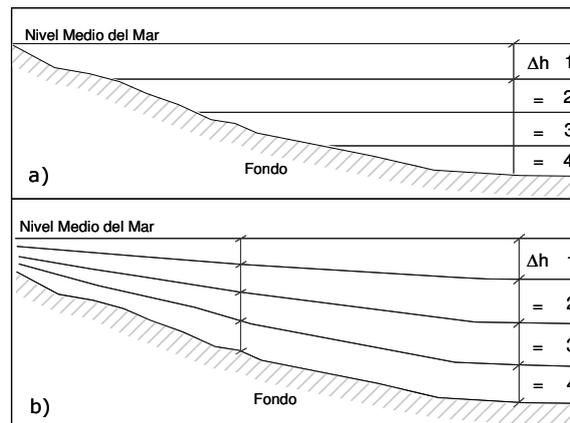


Figura 2-1. Discretización en capas de: a) espesor constante (coordenada z); b) espesor proporcional a la profundidad (coordenada σ).

2.5. MODELOS DE CALIDAD

Cuando el objetivo de llevar a cabo un modelado numérico consiste en la obtención de información sobre la evolución de la concentración de alguna sustancia contaminante, es necesario resolver la ecuación de advección – difusión utilizando técnicas numéricas. Al respecto, cabe mencionar que se considera como contaminante a cualquier sustancia capaz de provocar un cambio en la composición normal o natural del agua (Repetto, 1997).

Puesto que los ecosistemas marino y estuarino implican una unidad natural para componentes vivientes y no vivientes que interactúan para formar un sistema en el cual tienen lugar el intercambio de materiales y energía, todos los modelos que describen el comportamiento de los contaminantes en dichos sistemas encierran ciertas simplificaciones.

En la literatura científica se encuentra gran variedad de modelos de distinto nivel de complejidad utilizados en diversas aplicaciones tales como MIKE, WASP o MOHID, entre otros. Asimismo, es posible encontrar derivaciones de un mismo modelo a fin de incrementar su versatilidad en términos de aplicabilidad (CE-QUAL-ICM, CE-QUAL-W2, etc.).

En función de su complejidad, estos modelos pueden ser segregados en cuatro tipos (CCMCEOSB y WSTB, 2000): i) *Modelos de escritorio*: ocupan el nivel más bajo de complejidad y son capaces de calcular las concentraciones medias basadas en condiciones de estado estacionario y bajo simplificaciones en la estimación del tiempo de renovación; ii) *Modelos*

de estado estacionario o cuasi-dinámicos: ocupan el siguiente nivel de complejidad y, generalmente, utilizan una red de trabajo basada en cajas o compartimentos. Este tipo de modelos, simula el flujo neto de un ciclo de marea y es capaz de estimar el cambio estacional que sufre de forma gradual la calidad del agua; iii) *Modelos dinámicos unidimensionales o cuasi-bidimensionales*: son capaces de simular las variaciones en los niveles y velocidades de la marea en cada ciclo de marea. Los modelos de una dimensión, tratan a los estuarios como sistemas bien mezclados tanto en horizontal como en vertical y; iv) *Modelos dinámicos bidimensionales y tridimensionales*: ocupan el nivel de complejidad más alto y tratan de una forma mucho más realista que los modelos de una sola dimensión el mezclado dispersivo y los intercambios que ocurren en los contornos.

Por otro lado, en función de su aplicabilidad, existen modelos capaces de simular: i) la dispersión de la contaminación bacteriológica, ii) las fluctuaciones de oxígeno disuelto en el medio debidas a la presencia de contaminantes consumidores de este elemento, iii) los procesos de eutrofización, iv) los procesos de bioacumulación en ciertos moluscos; v) la dispersión de contaminantes conservativos y; vi) la dispersión de contaminantes específicos considerando los procesos de degradación que les atañen, es decir, considerándolos como sustancias no conservativas.

Frente a este universo de posibilidades y, de acuerdo con los objetivos planteados en esta tesis a nivel de gestión de vertidos, es preciso centrar la atención en aquellos modelos capaces de simular el comportamiento de las sustancias contaminantes como sustancias no conservativas que sufren procesos físicos y químicos capaces de modificar la concentración en la que se encuentran presentes tanto en la columna de agua como en los sedimentos.

A modo de ejemplo y, por mencionar algunos de los muchos modelos existentes, a continuación se destacan aquéllos cuyas capacidades de cálculo incluyen el modelado de material en suspensión y de los sedimentos, así como la simulación del comportamiento de sustancias contaminantes de naturaleza química.

El modelo **CE-QUAL-W2** es un modelo dinámico bidimensional (x-z) desarrollado para masas de agua estratificadas y consiste en modelos hidrodinámicos y de calidad de agua acoplados. Los cálculos hidrodinámicos se ven influenciados por la densidad variable del agua (en función de la temperatura y la salinidad) y de los sólidos disueltos y en suspensión. No obstante, los modelos de calidad acoplados se centran, fundamentalmente, en los procesos relacionados con el nivel de oxígeno del medio. Su uso está ampliamente extendido y de acuerdo con Kuo et al. (2006) ha demostrado consistencia entre los resultados que arroja y los datos de campañas de campo. Ha sido utilizado también como uno de los elementos componentes

de un Sistema de Gestión de la Información de Vertidos (SMIS por sus siglas en inglés) destinado a la gestión eficiente de los riesgos asociados con la liberación, accidental o deliberada, de sustancias peligrosas al agua (Martin et al., 2004).

Tal y como se ha comentado, el modelo **MIKE3** es un modelo tridimensional de superficie libre, dependiente del tiempo que considera la inundación y secado de zonas someras. El modelo hidrodinámico puede ligarse a un módulo de calidad de agua (**ECO Lab**) que se enfoca en aspectos tales como: oxígeno disuelto, materia orgánica, amonio, nitrato, fósforo, bacterias, clorofila a y procesos de eutrofización que incluyen los ciclos del carbono y de los nutrientes, el crecimiento del fitoplancton y zooplancton, balances de oxígeno y vegetación bentónica (DHI, 1995). Asimismo, permite la inclusión de módulos relacionados con el modelado de sedimentos tales como el módulo **AD** que resuelve la ecuación de advección-dispersión para el material disuelto o en suspensión (por ejemplo sal o sedimentos cohesivos) que usan un esquema implícito de diferencia finita; o el módulo **ST** utilizado para el estudio del transporte de sedimentos no cohesivos y las condiciones morfológicas en ríos (DHI, 2009). Cabe mencionar, que para este modelo, existen también versiones de una (**MIKE11**) y dos dimensiones (**MIKE21**) que acoplan modelos hidrodinámicos y de calidad de agua.

El modelo **CH3D-ICM** es un modelo tridimensional de diferencias finitas resultado del enlace del modelo hidrodinámico CH3D y el modelo de calidad de agua CE-QUAL-ICM. Este modelo puede ser utilizado para la predicción de la respuesta de nivel de agua, de velocidad de flujo, de salinidad y temperatura y del campo de velocidades en tres dimensiones en los sistemas acuáticos. El modelo CH3D realiza los cálculos hidrodinámicos sobre una malla curvilínea de contornos ajustados, lo cual, permite incluso, la modelización de canales profundos de navegación o de líneas de costa irregulares. Por su parte, el modelo ICM es un modelo de calidad de agua no estructurado de volumen finito que puede ser aplicado a la mayoría de masas de agua en una, dos o tres dimensiones ligándolo a cualquier modelo hidrodinámico. Este modelo predice las variaciones de la concentración de los constituyentes de calidad del agua con respecto al tiempo e incluye transporte advectivo – dispersivo. Un ejemplo de su utilidad queda evidenciado por el estudio llevado a cabo por Shen y Wang (2007) para investigar las propiedades de transporte a largo plazo de sustancias disueltas en la Bahía de Chesapeake. Los resultados aportados por este modelo permitieron conocer que los aportes fluviales, los efectos del viento y la circulación inducida por la densidad juegan un papel importante en el control del transporte de contaminantes a largo plazo.

El modelo cuasi-tridimensional **AD3D** resuelve la ecuación de transporte de masa integrándola numéricamente en diferencias finitas. Genera dos tipos

de resultados, por un lado, registra la concentración de la sustancia en estudio en todas las celdas de la malla en un instante determinado y en una capa concreta de profundidad. Por otro lado, registra la información de la evolución, a lo largo del periodo de modelado, de la concentración de la sustancia en estudio en un punto determinado en la malla. Entre otras capacidades, mediante el modelo AD3D es posible llevar a cabo el estudio de: la evolución de sustancias contaminantes (considerándolas como conservativas), la variación de oxígeno disuelto y la desaparición bacteriana (coliformes fecales) (CHN, 1995a). Actualmente, se ha añadido, además, un módulo para el cálculo de la concentración de coliformes fecales acumulada en moluscos (García et al., 2008).

El modelo **EFDC** enlaza un modelo hidrodinámico de diferencias finitas y un modelo de calidad de agua. Cabe resaltar que este modelo es capaz de resolver las ecuaciones que describen el transporte de sedimentos suspendidos, de contaminantes tóxicos y de variables de calidad de agua. De hecho, este modelo es capaz de simular el transporte de sedimento cohesivo y no cohesivo, así como el transporte y destino de contaminantes en agua y sedimento. Además resuelve procesos de dilución y de eutrofización (Ji et al., 2001; Liu y Huang, 2009). En la literatura científica se encuentran numerosos ejemplos de su aplicación tales como el estudio conducido por Ji et al. (2001) en la Bahía de Morro (California) o el modelado del impacto del sedimento en el transporte de bacterias fecales (Bai y Lung, 2005) a través del desarrollo de un nuevo módulo dentro del marco del modelo EFDC que incorpora una relación lineal de adsorción que permite el modelado explícito de las bacterias fecales ya sea que estén asociadas a partículas o se encuentren libres.

El modelo **WASP5** incluye especificaciones de flujo de sedimentación para contabilizar las pérdidas así como los aportes desde el sedimento por resuspensión. Este modelo, además, presenta un compartimento (**TOXI**) de transporte y destino de productos químicos orgánicos y metales para cualquier tipo de sistema acuático (SSG, 2006). Dicho compartimento maneja explícitamente muchos de los procesos fisicoquímicos relacionados con estas sustancias exceptuando aquellos concernientes a procesos de reducción y de precipitación-disolución. No obstante, si la cinética de éstos últimos es descrita por el usuario, pueden ser incluidos como reacciones adicionales. Este modelo es capaz de manejar de uno a tres químicos y de uno a tres tipos de material particulado (clases de sólidos). En su versión más reciente, el modelo **WASP 7.4** ayuda al usuario en la interpretación y predicción de las respuestas de la calidad de agua frente a distintos fenómenos de contaminación (EPA, 2009).

El módulo de calidad de agua incluido en el modelo **MOHID** es un modelo ecológico cero dimensional que ha sido desarrollado en términos de fuentes y sumideros a fin de proveer al modelo de cierta flexibilidad (IST, 2006).

Puede ser usado por módulos de transporte tanto eulerianos como lagrangianos. Por su parte, el módulo de interfase agua – sedimentos, es el responsable de manejar toda la información relativa a intercambios y procesos que puedan llevarse a cabo entre el agua y la columna de sedimento. A fines de modelización, dicha interfase se asume como una fina capa de sedimento de características transitorias tales como la erosión o sedimentación. Esta capa tiene una función separadora, lo cual, permite la consolidación del sedimento más profundo (IST, 2006a). Este modelo ha encontrado aplicación en numerosas ocasiones, además de haber sido defendido en varias tesis doctorales. Por citar algunos ejemplos concretos, cabe comentar el estudio llevado a cabo en el estuario del Tajo para analizar la dinámica del arsénico en este sistema (Fachada - Fernandes, 2005) o la aproximación integral utilizada por Pina (2001) para el estudio de la calidad del agua de dicho estuario.

El modelo **COHERENS**, tal y como se ha comentado, permite el acoplamiento de distintos módulos o submodelos. Esta característica ha sido aprovechada por algunos autores a fin de explotar las capacidades hidrodinámicas de este modelo en estudios para la simulación del transporte de sólidos o de sustancias tóxicas. Así pues, Liang et al. (2007) han acoplado un modelo tridimensional de sólidos en suspensión (SED) y un modelo de oleaje (SWAN). De este modo, el modelo COHERENS-SED ha sido adoptado para simular el transporte tridimensional de los sedimentos en suspensión en el Delta del Río Amarillo considerando la influencia tanto del oleaje como de las corrientes de marea. Los resultados obtenidos han mostrado un ajuste razonable de las velocidades y direcciones de corriente así como de los valores de concentración de sedimentos con respecto a las mediciones realizadas. Por su parte, Carafa et al. (2006) han acoplado a este modelo hidrodinámico un modelo de transporte y destino de herbicidas (atrazina, simazina y terbutilazina) para calcular la concentración de estos tóxicos tanto en la columna de agua como en los sedimentos, obteniendo, también, resultados satisfactorios.

Por su parte, el modelo de transporte de sedimento perteneciente al modelo **ROMS** considera dos capas de sedimento además de tomar en cuenta los efectos combinados del oleaje y de las corrientes en la tensión del lecho así como la parametrización de las olas superficiales y los pequeños canales del fondo. Como ejemplo de su aplicación se pueden encontrar estudios tales como el análisis del transporte de los sedimentos en suspensión en las Bahías de San Pedro y Santa Mónica en el sur de California (Blaas et al., 2007), el cual, reveló que la efectividad del transporte horizontal de limos depende fuertemente del mezclado vertical debido tanto a la tensión superficial del viento como a la tensión del lecho debida al oleaje. Asimismo, dichos autores concluyeron que las condiciones óptimas para el transporte de sedimento coinciden con eventos de oleaje intenso y fuertes vientos (que implican un fuerte mezclado vertical). No obstante, al igual

que otros modelos, éste permite el acoplamiento de otros módulos o modelos. Con base en ello, Warner et al. (2008) están desarrollando un modelo tridimensional que implementa algoritmos para el transporte de sedimentos y evolución de la morfología del lecho acoplable al modelo ROMS en combinación con el ya mencionado modelo SWAN de simulación de oleaje. Este modelo de transporte permite al usuario introducir tantas clases de sedimento no cohesivo como sean necesarias en función de propiedades características del mismo (diámetro, densidad, velocidad de sedimentación, tensión de erosión, etc.). Resuelve el transporte de sedimentos en la columna de agua con el mismo algoritmo de advección – difusión utilizado para el cálculo de trazadores conservativos y, adicionalmente, cuenta con otro algoritmo para la sedimentación vertical.

Tal y como puede deducirse de la descripción de los modelos anteriores, la mayoría de ellos presenta ciertas debilidades en términos del modelado de sustancias contaminantes no conservativas asociadas tanto al sedimento como al material en suspensión. En concreto, el modelo *CE-QUAL-W2* se encuentra más enfocado en procesos relacionados con el nivel de oxígeno disuelto en el medio. Por su parte, el modelo *MIKE*, a pesar de considerar los fenómenos de inundación y secado de zonas someras (no habitualmente estimados por otros modelos), es más bien un modelo ecológico puesto que a pesar de que puede ligarse a un módulo de calidad de agua capaz de simular procesos de eutrofización y ciclos de nutrientes, entre otros, no considera el modelado de sustancias tóxicas en el medio. Asimismo, el modelo *CH3D-ICM* resulta un modelo muy potente, pero de giro ecológico. Finalmente, el modelo *AD3D* considera a las sustancias tóxicas como sustancias conservativas, lo cual, si bien proporciona una idea aproximada de la evolución y transporte de éstas, hace que los resultados no sean tan próximos a la realidad física como podrían llegar a serlo si se considerasen los procesos de degradación correspondientes.

En contrapartida, los modelos *EFDC*, *WASP5* y *MOHID* si son capaces de desarrollar el modelado de la evolución de las sustancias contaminantes asociadas al material en suspensión y a los sedimentos. Más aún, para el modelo *EFDC* está siendo desarrollado un preprocesador que estará constituido por un generador de mallas curvilíneo y una interfaz SIG. Sin embargo, a la vista de las publicaciones halladas en la exhaustiva búsqueda realizada a lo largo de la literatura científica, tal parece que este modelo es una herramienta potente en términos hidrodinámicos puesto que los trabajos desarrollados con éste hacen referencia a estudios hidrodinámicos complejos analizando sobre todo los efectos de la salinidad y la temperatura en estuarios (Ji et al., 2001; Ji et al., 2007; Aiken et al., 2008; Xu et al., 2008; Gong y Shen, 2009; Liu y Huang, 2009). En contrapartida, presenta importantes debilidades en términos del modelado de sustancias químicas (no se ha podido encontrar ninguna referencia de su uso para este tipo de estudios), por tal motivo, encuentra el complemento ideal en el modelo

WASP que, por el contrario, no resulta el modelo más apropiado en términos hidrodinámicos, pero cuenta con enormes posibilidades en cuanto al modelado de sustancias químicas (Vuksanovic et al., 1996; Carroll et al., 2000; Zheng et al., 2004). Por su parte, el modelo *MOHID* cuenta ya con un preprocesador propio y una interfaz SIG con muchas oportunidades de desarrollo. Sin embargo, este último modelo parece estar más orientado al análisis de derrames de hidrocarburos y no es capaz de modelar todas las sustancias calificadas como prioritarias por la DMA.

Por último, con respecto al modelo *COHERENS* parece ser un potente modelo hidrodinámico que permite el acoplamiento de otros módulos, pero que no resuelve por sí mismo los procesos de transporte de sedimentos ni de sustancias contaminantes. Asimismo, el modelo *ROMS* permite el acoplamiento de otros modelos, no obstante, a diferencia del anterior, aunque éste cuenta con un módulo propio para la resolución del transporte de sedimentos, no cuenta con un módulo para el cálculo de sustancias contaminantes de naturaleza química.

Así pues, a la luz de la revisión efectuada, se ha llegado a la conclusión de que un modelo integral orientado a la gestión debería poder llevar a cabo el modelado de la evolución de las sustancias contaminantes asociadas al material en suspensión y a los sedimentos considerando:

- Salinidad y temperatura variables
- Situaciones de inundación – secado
- Corrientes de viento y marea
- Distintas sustancias tóxicas sin depender de la introducción de las cinéticas de cada una de ellas por parte del usuario
- Al menos, la totalidad de las sustancias consideradas como prioritarias por la DMA
- Una interfaz SIG

Asimismo, se ha observado que, en todos los casos, dicho modelado se lleva a cabo a través del acoplamiento de un modelo hidrodinámico y uno de calidad. Puesto que actualmente se cuenta con modelos hidrodinámicos propios, capaces de generar resultados coincidentes con la realidad física y que han sido validados a través de numerosos estudios llevados a cabo dentro de la Universidad de Cantabria por el Grupo de Emisarios Submarinos e Hidráulica Ambiental (GESHA) y por el Instituto de Hidráulica Ambiental IH-Cantabria (GESHA 1998; 1999; 1999a; 1999b; 2000; IH Cantabria 2008; 2010a; 2010b), se advierte la conveniencia de desarrollar el módulo o compartimento de calidad correspondiente para poder realizar este tipo de simulaciones considerando las condiciones previamente citadas.

Por tal motivo, en los siguientes epígrafes se tratarán en detalle los fundamentos teóricos del modelado del material en suspensión y de los sedimentos, así como de las sustancias contaminantes consideradas como prioritarias. Por su parte, la descripción y resolución numérica del modelo de calidad que se ha desarrollado para acoplar a los modelos hidrodinámicos H2D y H2DZ, queda recogido en el Capítulo 3.

2.5.1. Modelado del material en suspensión y de los sedimentos

Para llevar a cabo simulaciones de calidad de agua, generalmente, se consideran como sustancias conservativas parámetros que estrictamente hablando, no lo son. Tal es el caso de los sólidos disueltos totales (debido a la dificultad que supone simular todos los procesos en los que se ven involucrados, como por ejemplo la adsorción y desorción), los iones cloruro, la alcalinidad y la salinidad, por ejemplo.

Los modelos utilizados a tal efecto, suelen incluir una expresión de balance de materia en la que se asume que la tasa de decaimiento es igual a cero. Por tal motivo, las ecuaciones que gobiernan el modelado de las sustancias conservativas consideradas dentro de un modelo de calidad de agua son simples ecuaciones de advección – difusión dependientes del tiempo.

La interacción entre partículas en suspensión a menudo es despreciada en los modelos de transporte (James, 2002). No obstante, el considerar que los sedimentos experimentan procesos de sedimentación, degradación, resuspensión y difusión en el lecho marino, así como fenómenos de cohesión y floculación, puede representar una diferencia significativa en las predicciones de dispersión de un contaminante.

Así pues, con el objetivo de optimizar la gestión y toma de decisiones relacionadas con el medio estuarino, deben conocerse los mecanismos de flujo dentro del estuario, tales como los efectos de fricción y los movimientos del sedimento. Así pues, los procesos hidrodinámicos en los estuarios originan altas concentraciones de sólidos en suspensión en la parte alta de los mismos, lo cual, provoca una turbidez máxima en esta zona.

Por su parte, los mecanismos de bombeo y de circulación dirigida por la densidad, pueden generar también una turbidez máxima. En concreto, los gradientes de densidad inducen un transporte residual aguas arriba cerca del fondo, hasta un punto donde el flujo residual de agua dulce se

encuentra del lado del mar y en la parte alta de la columna de agua. Cualquier partícula más densa que el fluido tiende a sedimentarse, no obstante, las partículas fluviales pueden experimentar mayores velocidades de sedimentación cuando entran en la zona de máxima turbidez debido a que los procesos de floculación se ven favorecidos por las aguas salinas (Le Hir et al., 2001).

Por tal motivo, el modelado del sedimento debe ser llevado a cabo tomando en consideración la dinámica sedimentaria. Así pues, la tensión ejercida sobre los sedimentos del lecho (tensión en el lecho - τ_b) depende, principalmente, de la velocidad del agua y de la altura de la marea y, a su vez, define las tasas de sedimentación (q_{dep}) y erosión (q_{ero}). Cuando las velocidades del agua son muy elevadas, la resuspensión del sedimento se incrementa y la turbulencia evita que se deposite nuevamente en el lecho. De este modo, la erosión ocurre cuando la tensión en el lecho es mayor que un valor crítico de erosión (tensión de erosión - τ_e), mientras que si la tensión en el lecho se encuentra por debajo de un valor crítico de deposición (tensión de sedimentación - τ_d) las partículas sedimentan a una determinada velocidad de acuerdo con su tamaño y las propiedades físicas del fluido en el que se encuentran inmersas (velocidad de sedimentación - w_s). Durante este proceso, el sedimento puede abandonar la columna de agua de forma temporal o permanente, experimentando, posteriormente, procesos de resuspensión o consolidación, respectivamente. De este modo, cuando ocurre una sedimentación, la capa activa es decir, la capa más superficial del lecho incrementa su volumen. En contrapartida, cuando ocurre una erosión neta, el volumen de la capa activa se ve reducido. Cuando la capa activa se ve erosionada por completo, la siguiente capa del lecho queda expuesta y se convierte en la capa activa.

Cabe comentar también, que de acuerdo con Pejrup (1986), las velocidades orbitales de onda debidas a las ondas inducidas por el viento, son el parámetro crítico para la suspensión de los sedimentos del fondo. No obstante, en áreas someras, donde la profundidad y la amplitud de la onda cambian rápidamente, la velocidad orbital de onda no puede ser relacionada adecuadamente con la concentración de sólidos en suspensión si dichos sólidos se corresponden con materiales de grano fino.

Asimismo, ha de tenerse en cuenta que para describir adecuadamente los procesos de transporte de sedimento es necesario recurrir a una adecuada discretización a fin de reproducir las complejas variaciones batimétricas y sus efectos en los gradientes de corrientes de marea (atrapamiento de sedimento, ciclos de erosión - sedimentación, etc.) (Thouvenin et al., 2007).

Debido a que la materia en suspensión presenta una diversidad de características en sí misma, antes de poder dar inicio al análisis de la

formulación matemática que describe todos los procesos asociados a ella, resulta necesario hacer una primera clasificación del sedimento como cohesivo y no cohesivo. No obstante, en todo caso, dentro de la columna de agua, las partículas cohesivas son transportadas por advección del mismo modo que las partículas no cohesivas, por tal motivo, se utiliza la misma ecuación de transporte para describir el movimiento del sedimento, independientemente de su clase (Ji, 2008).

Sedimento cohesivo

A pesar de que no existe un límite exacto para la diferenciación entre sedimento cohesivo y no cohesivo, se considera que los sedimentos con un tamaño de partícula menor a $2\ \mu\text{m}$ (arcillas, por ejemplo) son cohesivos. El limo ($2\ \mu\text{m} - 60\ \mu\text{m}$) se encuentra por encima de este valor, no obstante, a efectos prácticos, se considera como cohesivo, debido a que presenta ciertas propiedades cohesivas gracias a la presencia de arcilla en su composición (Huang et al., 2006). Otra clasificación, más general, considera como materiales cohesivos a las partículas cuyo diámetro es menor a las 63 micras (Vidal et al., 2005). La fuerza del enlace cohesivo depende tanto de las propiedades características de las partículas (composición mineralógica, contenido orgánico, etc.) como de las propiedades del agua del medio en el que se encuentran (temperatura, pH, salinidad, etc.). De este modo, por ejemplo, un limo grueso que presenta un comportamiento no cohesivo mientras se encuentra inmerso en agua dulce de río puede volverse cohesivo al entrar al estuario, por tal motivo, resulta más apropiado definir al sedimento cohesivo por su comportamiento más que por su tamaño (Ji, 2008).

De este modo, se considera que el sedimento cohesivo es aquel que está formado, principalmente, por material fino con fuerzas intraparticulares intensas debido a la carga iónica que tiene en su superficie. Mientras más pequeño es el tamaño de la partícula, el área superficial específica (área superficial por unidad de volumen) aumenta, provocando que los procesos del sedimento sean dominados por las fuerzas intraparticulares y no por la gravedad. Cabe mencionar que, puesto que los sedimentos cohesivos sedimentan más bien por flóculos y no como partículas independientes, la velocidad de sedimentación se encuentra íntimamente relacionada con la concentración de los sedimentos cohesivos suspendidos.

La sedimentación de los flóculos formados por sedimento cohesivo es distinta a la que experimentan las partículas de forma individual y requiere que la tensión crítica de sedimentación sea mucho menor que la de erosión para poder llevarse a cabo (Ji, 2008). Para este tipo de sedimento, ha de tenerse en consideración que una vez que una partícula se ha depositado en el lecho, los enlaces cohesivos con otras partículas hacen que su remoción en conjunto sea más difícil que si se tratase de una partícula individual, por

tal motivo, la tensión de erosión suele ser significativamente mayor que la tensión de sedimentación.

Tal y como puede observarse en la Tabla 2-4, los sedimentos cohesivos experimentan una variedad de procesos que les permiten interactuar de forma dinámica con el medio. Por tal motivo, en términos de calidad de agua, los sedimentos cohesivos suelen ser motivo de preocupación, puesto que, muchos contaminantes, como por ejemplo metales pesados, pesticidas o nutrientes, tienden a adsorberse en ellos. Adicionalmente, cabe comentar que este tipo de sedimento es el responsable de la aparición de la turbidez, la cual, impide la entrada de la luz solar al cuerpo de agua.

Proceso	Definición
Agregación o Floculación	Los sedimentos cohesivos tienden a agruparse para formar unidades más grandes (flóculos). Este proceso depende fuertemente del tipo de sedimento, del tipo y concentración de los iones presentes en el agua y de las condiciones de flujo. Los flóculos pueden aumentar su tamaño cuando entran en contacto con pequeñas partículas o con otros flóculos, y pueden romperse debido a la turbulencia. La estructura del flóculo (tamaño, densidad y forma) determina la velocidad de sedimentación.
Adsorción – Desorción de contaminantes	Muchos contaminantes como los metales pesados, los pesticidas o los nutrientes, se adsorben preferentemente en el sedimento cohesivo, el cual, les sirve como medio de transporte. Los contaminantes presentes en el agua pueden adsorberse en la superficie de los sedimentos o permanecer disueltos en la columna de agua. Asimismo, éstos pueden desorberse o liberarse de los sedimentos para volver a la fase disuelta. La liberación de nutrientes desde la capa de sedimento del fondo ocurre como resultado de la existencia de un gradiente de concentración de nutrientes entre la masa de agua situada por encima del sedimento y el agua intersticial de éste.
Sedimentación	La sedimentación ocurre cuando la tensión del fondo es menor que la tensión crítica, lo cual ocurre cuando la velocidad cae por debajo del valor crítico de sedimentación. Este fenómeno está controlado por la tensión del lecho, los procesos turbulentos presentes en las cercanías del lecho, la velocidad de sedimentación, el tipo de sedimento, la profundidad del flujo y la concentración y constitución iónica del fluido en suspensión.
Consolidación	La consolidación es otro importante fenómeno en el transporte del sedimento cohesivo. Usualmente, se consideran dos tipos de consolidación: primaria y secundaria. La primera es causada por el propio peso del sedimento así como por la sedimentación de materiales adicionales. La segunda, es causada por la deformación plástica del lecho bajo una sobrecarga constante.
Resuspensión y Erosión	Cuando la velocidad de fricción supera el valor crítico de erosión, se produce la resuspensión del sedimento. Dentro de los parámetros físicos que afectan la erosión se encuentran el contenido y tipo de arcilla, el contenido de agua, la temperatura, la densidad del lecho y la presión del poro. Por su parte, dentro de los factores electroquímicos que afectan este proceso se encuentran la influencia de la composición química y del pH del fluido que erosiona, puesto que, ejercen cierta influencia en la valencia de las partículas arcillosas, lo cual, a su vez, juega un papel crítico en términos de los enlaces intraparticulares. Finalmente, el proceso de erosión puede verse afectado también por factores biológicos. Los organismos que habitan en los sedimentos pueden incrementar o disminuir la estabilidad del lecho, provocando que la erosión disminuya o aumente, respectivamente. Asimismo el crecimiento y asentamiento de organismos en el lecho provoca cierta turbación en el mismo.

Tabla 2-4. Procesos que experimentan los sedimentos cohesivos en el medio marino.

Sedimento no cohesivo

De acuerdo con Huang et al. (2006) aquellos sedimentos cuyo tamaño de partícula es mayor a 60 μm se consideran no cohesivos. No obstante, en una clasificación más generalizada se consideran como materiales no cohesivos, aquellas partículas de diámetro superior a 63 micras (Vidal et al., 2005). Este tipo de partículas puede definirse en función de su densidad, diámetro y forma, lo que a su vez, aunque con cierto grado de incertidumbre, permite definir la velocidad de sedimentación de las mismas así como los procesos de erosión y transporte que experimentan.

Usualmente, los procesos hidrodinámicos son responsables del comportamiento de los sedimentos no cohesivos (grava, arena, algunos tipos de limo, etc.) en el agua. Generalmente, se encuentran en mar abierto, en entradas de marea y en los tramos más altos de los canales fluviales donde las velocidades de flujo son elevadas, debido a que a mayor velocidad se ve incrementada la tensión del lecho.

Al igual que los sedimentos cohesivos, los sedimentos no cohesivos experimentan también los procesos de sedimentación, consolidación y erosión/resuspensión (Tabla 2-4). No obstante, a diferencia de los anteriores, su mayor fuerza estabilizadora es el propio peso de la partícula, por tal motivo, una partícula no cohesiva sedimenta casi tan pronto como cuando la tensión es demasiado pequeña como para erosionar el lecho. Esto se ve reflejado en el hecho de que para los sedimentos no cohesivos, la tensión crítica de sedimentación es ligeramente menor que la tensión crítica de erosión.

Modelo utilizado para el estudio de los sólidos en suspensión

De acuerdo con las conclusiones obtenidas de la revisión bibliográfica efectuada, se advirtió la oportunidad de complementar los modelos hidrodinámicos que actualmente utiliza el Instituto de Hidráulica Ambiental de la Universidad de Cantabria a través del desarrollo de un módulo capaz de considerar a los sólidos en suspensión como un elemento fundamental del transporte y evolución de sustancias contaminantes y no como una sustancia conservativa, que es como tradicionalmente, en la mayoría de los modelos de transporte, ha sido manejado dicho parámetro.

Si bien es cierto que esta simplificación puede justificarse dada la complejidad que encierra el modelar todos los procesos que pueden estar asociados a los sólidos en suspensión, cabe reconocer que una simulación más ajustada de éstos permitiría una mejora sustancial en el modelado. Si se opta por esta última alternativa, ha de tenerse en cuenta la aparición de un nuevo nivel de complejidad, no sólo asociado a los procesos que

experimentan los sólidos en suspensión, sino a las propias características del lecho puesto que cada tipo de lecho es distinto.

Así pues, resulta evidente la imposibilidad de aplicar un modelo universal válido para cualquier tipo de lecho y, por tanto, resulta necesario llevar a cabo un proceso de calibración. Dado el amplio espectro de valores reportados para la tensión de sedimentación y, en ausencia de datos específicos para la zona, este parámetro se trata, generalmente, como un parámetro de calibración. Del mismo modo, a pesar de que las formulaciones recopiladas para la determinación de los parámetros de erosión no dejan de ser relaciones empíricas, resultan necesarias puesto que la mayoría de los estudios relacionados con la erosión son llevados a cabo en laboratorio donde no es posible reproducir ni el espectro turbulento, ni la distribución del tamaño de partícula, ni la composición del sedimento en las aguas naturales. Por tal motivo, si se busca incrementar la precisión del modelo, la tensión de erosión se convierte en otro parámetro a calibrar.

Por otro lado, debe considerarse también que a pesar de que la floculación interviene en forma significativa en los procesos de sedimentación de las partículas cohesivas, tampoco existe un modelo universal para su determinación. Algunos incorporan mayor cantidad de procesos físicos que otros, no obstante, esto no significa que sean más apropiados, por tal motivo, es recomendable utilizar el modelo de floculación más simple, a menos que se disponga de información suficiente sobre las velocidades de sedimentación correspondientes (Ji, 2008).

El modelado de sólidos en suspensión puede llevarse a cabo en una, dos o tres dimensiones mediante la resolución de las ecuaciones generales de transporte descritas a continuación:

1. **Ecuación unidimensional** de transporte de sólidos en suspensión (Ecuación 2-9) (Shahkolahi, et al., 2006):

$$\frac{\partial A\phi}{\partial t} + \frac{\partial Q\phi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(AD_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = -A \cdot K \cdot \phi + S_i \quad (2-9)$$

donde:

ϕ : concentración de sólidos en suspensión (kg/m^3); A: área de sección transversal (m^2); Q: caudal (m^3/s); D_x : coeficiente de dispersión (m^2/s); K: coeficiente lineal de desaparición ($1/\text{s}$) y; S_i : fuentes y sumideros de sólidos en suspensión (kg/ms).

2. **Ecuación bidimensional** de transporte de sólidos en suspensión (Ecuación 2-10) (Lumborg y Pejrup, 2005):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{1}{H} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left(HD_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{1}{H} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left(HD_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = \sum_{i=1}^n \frac{S_i}{H} \quad (2-10)$$

donde:

ϕ : concentración de sólidos en suspensión (kg/m^3); u , v : componentes de velocidad en las direcciones x e y , respectivamente (m/s); H : profundidad de la columna de agua (m); D_x , D_y : coeficientes de dispersión en las direcciones x e y , respectivamente (m^2/s) y; S_i : fuentes y sumideros de sólidos en suspensión ($\text{kg/m}^2\text{s}$).

De forma complementaria a la ecuación de transporte, los procesos de intercambio de masa del sedimento en suspensión entre la columna de agua y el lecho quedan definidos a través de la Ecuación 2-11 (Chen et al., 1996).

$$\frac{dV_w \phi}{dt} = A \cdot (V_r C_b - w_s \phi) = A \cdot (q_{ero} - q_{sed}) \quad (2-11)$$

donde:

V_w : volumen de agua (m^3); ϕ : concentración del sedimento en suspensión en la columna de agua (mg/l); A : área (m^2); V_r : velocidad de resuspensión o erosión (m/s); C_b : concentración de sedimento cercana al fondo (mg/l); w_s : velocidad de sedimentación (m/s); q_{ero} : tasa de erosión (resuspensión) ($\text{kg/m}^2\text{s}$) y; q_{sed} : tasa de sedimentación ($\text{kg/m}^2\text{s}$).

Por su parte, la variación del espesor de la capa activa del lecho queda descrita mediante la Ecuación 2-12 (Chen et al., 1996).

$$\frac{dH_{ca}}{dt} = - \frac{(dV_w \phi / dt)}{A \cdot C_b} \quad (2-12)$$

donde:

H_{ca} : profundidad de la capa activa del sedimento (m); V_w : volumen de agua (m^3); ϕ : concentración del sedimento en suspensión en la columna de agua (mg/l); A : área (m^2) y; C_b : concentración de sedimento cercana al fondo (mg/l).

3. Ecuación tridimensional de transporte de sólidos en suspensión (Ecuación 2-13) (Wu y Falconer, 2000):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u\phi) + \frac{\partial}{\partial y}(v\phi) + \frac{\partial}{\partial z}[(w-w_s)\phi] - \frac{\partial}{\partial x}\left(D_x \frac{\partial \phi}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(D_y \frac{\partial \phi}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(D_z \frac{\partial \phi}{\partial z}\right) = S_i \quad (2-13)$$

donde:

ϕ : concentración de sólidos en suspensión (kg/m^3); u, v, w : componentes de velocidad en las direcciones x, y, z , respectivamente (m/s); w_s : velocidad de sedimentación (m/s); D_x, D_y, D_z : coeficientes de dispersión en dirección x, y, z , respectivamente (m^2/s) y; S_i : fuentes y sumideros de sólidos en suspensión ($\text{kg/m}^3\text{s}$).

La solución de las ecuaciones anteriores depende del cálculo de varios parámetros tales como: coeficientes de difusión turbulenta; tensiones del lecho, de erosión y de sedimentación; velocidades de sedimentación y resuspensión; concentración de sólidos en los sedimentos; así como de tasas de erosión y sedimentación. Todos estos parámetros, a su vez, guardan cierta relación entre sí quedando definidos por las expresiones matemáticas recogidas en las Tablas que se presentan a lo largo de este apartado.

Tal y como se detalla en las Tablas 2-11 y 2-12, existen diversas formulaciones para el cálculo de la velocidad de sedimentación. Cabe destacar que algunas de ellas consideran el efecto de la floculación (efecto de suma importancia en la sedimentación del material cohesivo) proporcionando, por tanto, una mejor aproximación a la realidad física. No obstante, tal consideración, aún en su expresión matemática más sencilla, exige la calibración de dos coeficientes empíricos (k y m . Ver Tablas 2-12 y 2-14) propios de cada zona de estudio. Para ello, es preciso llevar a cabo ensayos de velocidad de sedimentación realizados a escala de laboratorio, los cuales, a su vez, requieren ser validados en función de la información de campo obtenida.

En todo caso, aún obviando el efecto de los procesos de floculación, varios de los parámetros involucrados en el modelo, así como la mayoría de los coeficientes requeridos, deberían ser sometidos también a un proceso de calibración. No obstante, en ausencia de datos experimentales suficientes, se cuenta con valores orientativos, fruto de otros estudios, que resultan válidos como punto de partida.

Con fines comparativos, en la Tabla 2-5 se muestran algunos valores de referencia para la concentración de sólidos en suspensión en la columna de agua de distintos medios acuáticos.

Parámetro	Símbolo	Valor	Referencia
Concentración sólidos en la columna de agua	φ	8 mg/l - Estuarios	Burton et al., 1995
		50 mg/l - Cerca de la desembocadura fluvial	De Smedt et al., 1998
		0.5 mg/l - Lago Huron / Superior	Chapra, 1997. (Tomado de: Di Toro et al., 1971, O'Connor, 1998, Lung, 1994 y Thomann y Mueller, 1987)
		8.0 mg/l - Bahía Saginaw	
		20.0 mg/l - Lago Erie Oeste	
		8 - 12 mg/l - Río Flint, Michigan	
		10-120 mg/l - Río Clinton, Michigan	
		10-60 mg/l - Río Hudson, Nueva York	
		5-30 mg/l - Estuario Potomac	
		10-50 mg/l - Estuario James, Virginia	
		50-175 - Delta Sacramento - San Joaquín, California	
		300 mg/l - Aguas brutas de drenaje	
		1-150 mg/l	Thomann et al., 1991
		10.23 mg/l - Bahía de Santander	CMA-Cantabria, 2006
13.78 mg/l - Suances			

Tabla 2-5. Concentración de sólidos en suspensión en distintos medios acuáticos.

Por su parte, en las Tablas siguientes se presentan las ecuaciones requeridas para el cálculo de los parámetros, así como para la evaluación de los procesos implicados en el estudio de la dinámica que existe entre los sedimentos y la columna de agua.

De este modo, en la Tabla 2-6 se presentan dos formulaciones distintas para el cálculo de los coeficientes de difusión turbulenta en ambas direcciones. Asimismo, la Tabla 2-7 recoge todas las constantes involucradas en dicho cálculo.

Ecuación	Expresión	Variables
Coeficiente de dispersión en dirección x (Wu et al., 2005)	$D_x = \frac{(k_{long}u^2 + k_{lat}v^2) \cdot H\sqrt{g}}{\sqrt{u^2 + v^2} \cdot C_z} + D_w$	D _x : coeficiente de dispersión en dirección x (m ² /s) k _{long} : constante de dispersión longitudinal k _{lat} : constante de difusión lateral u, v: velocidad (m/s) H: profundidad (m) g: gravedad (m/s ²) C _z : Coeficiente de fricción de Chezy D _w : coeficiente de dispersión inducido por viento (m ² /s)
Coeficiente de dispersión en dirección x (Cardini et al., 2004)	$D_x = k_{long} H \cdot \left(3.13 \frac{u \cdot n}{H^6} \right)$	D _x : coeficiente de dispersión en dirección x (m ² /s) k _{long} : constante de dispersión longitudinal = varía en función del cuerpo de agua para el que haya sido determinado H: profundidad (m) u: velocidad media de la corriente (m/s) n: coeficiente de rugosidad de Manning
Coeficiente de dispersión en dirección y (Wu et al., 2005)	$D_y = \frac{(k_{long}v^2 + k_{lat}u^2) \cdot H\sqrt{g}}{\sqrt{u^2 + v^2} \cdot C_z} + D_w$	D _y : coeficiente de dispersión en dirección y (m ² /s) k _{long} : constante de dispersión longitudinal k _{lat} : constante de difusión lateral u, v: velocidad (m/s) H: profundidad (m) g: gravedad (m/s ²) C _z : Coeficiente de fricción de Chezy D _w : coeficiente de dispersión inducido por viento (m ² /s)
Coeficiente de dispersión en dirección y (Cardini et al., 2004)	$D_y = k_{lat} H \cdot \left(3.13 \frac{u \cdot n}{H^6} \right)$	D _y : coeficiente de dispersión en dirección y (m ² /s) k _{long} : constante de dispersión longitudinal = varía en función del cuerpo de agua para el que haya sido determinado H: profundidad (m) u: velocidad media de la corriente (m/s) n: coeficiente de rugosidad de Manning

Tabla 2-6. Ecuaciones para el cálculo de los coeficientes de difusión turbulenta.

Parámetro	Símbolo	Valor	Referencia
Gravedad	g	9.81 m/s ²	-
Coefficiente de fricción de Chezy	C _z	30-60	GESHA, 1999b Sámano, 2007 Bárcena, 2009 IH Cantabria, 2010a
Constante de dispersión longitudinal	k _{long}	5.93	Wu et al., 2005
Constante de difusión lateral	k _{lat}	0.15	Wu et al., 2005
Coefficiente de dispersión inducido por viento	D _w	Despreciable si no se toma en consideración el efecto del viento	Yuan et al., 2007a
Coefficiente de rugosidad de Manning	n	0.02	Wu et al., 2005
		0.025 – 0.033 (lechos suaves)	Thomann y Mueller, 1987
		0.045 – 0.060 (lechos rugosos) 0.075 – 0.15 (corrientes con muchas algas)	
Coefficientes de dispersión	D _x , D _y	0.5 m ² /s (Ría de Suances)	Bárcena, 2009
		2 m ² /s (Ría de Suances)	GESHA 2007

Tabla 2-7. Constantes involucradas en el cálculo de los coeficientes de difusión turbulenta.

A efecto de llevar a cabo un apropiado análisis de la dinámica sedimentaria, resulta fundamental el adecuado establecimiento tanto de las fuentes (Tabla 2-9) como de los sumideros (Tabla 2-8) de sólidos en suspensión puesto que de ellos depende el balance global de este parámetro.

Cabe mencionar que, a su vez, la determinación de la tasa de erosión implica el reconocimiento de parámetros tales como: la erosionabilidad, la densidad del sedimento (tanto seco como húmedo) y algunos coeficientes empíricos, cuyos valores de referencia han sido recopilados en la Tabla 2-10.

Por otro lado, la tasa de sedimentación implica la relación que existe entre la tensión del lecho y la tensión de sedimentación cuyas formulaciones de cálculo y valores de referencia quedan recogidos en las Tablas 2-17 a 2-20. Asimismo, es preciso reconocer que dicho parámetro depende, en todo caso, de la concentración de sólidos en suspensión. No obstante, de forma orientativa, puede considerarse como referencia una tasa de sedimentación de entre 0.02 y 0.07 g/cm²año determinada por Periañez et al. (1996) para el Río Odiel. De acuerdo con estos autores, la tasa de sedimentación máxima (correspondiente con un punto de vertido) en esta zona, es de aproximadamente 0.3 g/cm²año.

Ecuación	Expresión	Variables
Tasa de sedimentación (Wu y Falconer, 2000; Lumborg y Pejrup, 2005)	$q_{sed} = w_s \cdot C_b \cdot \left(1 - \frac{\tau_b}{\tau_d}\right)$ <p>(para $\tau_b \leq \tau_d$)</p>	q _{sed} : incremento del volumen de la capa activa de sedimento por deposición (tasa de sedimentación) (kg/m ² s) w _s : velocidad de sedimentación (m/s) C _b : concentración de sedimento cercana al fondo (peso seco del sedimento en una mezcla de agua y sedimento / volumen de la mezcla) (kg/m ³) τ _b : tensión en el lecho (N/m ²) τ _d : tensión crítica de sedimentación (N/m ²)

Tabla 2-8. Ecuaciones para el cálculo de los sumideros de sólidos en suspensión.

Ecuación	Expresión	Variables
Tasa de erosión (Lumborg y Pejrup, 2005)	$q_{ero} = E \cdot e^{(\alpha_{ero} \sqrt{\tau_b - \tau_e})}$	q_{ero} : disminución del volumen de la capa activa de sedimento por erosión (tasa de erosión) (kg/m ² s) E: erosionabilidad (kg/m ² s) α_{ero} : coeficiente alfa de erosión (m/N ^{0.5}) τ_b : tensión en el lecho (N/m ²) τ_e : tensión crítica de erosión (N/m ²)
Tasa de erosión (Huang et al., 2006; Wu y Falconer, 2000)	$q_{ero} = q_f \cdot e^{\left(\gamma(\tau_b - \tau_e)^{\frac{1}{2}}\right)}$	q_{ero} : disminución del volumen de la capa activa de sedimento por erosión (tasa de erosión) (kg/m ² s) q_f : tasa de erosión del flóculo (kg/m ² s) γ : constante τ_b : tensión en el lecho (N/m ²) τ_e : tensión crítica de erosión (N/m ²)
Tasa de erosión (Alvera et al., 2003)	$q_{ero} = M_e \cdot \left(\frac{\tau_b}{\tau_e} - 1\right)$	q_{ero} : disminución del volumen de la capa activa de sedimento por erosión (tasa de erosión) (kg/m ² s) M_e : coeficiente de tasa de erosión (kg/m ² s) τ_b : tensión en el lecho (N/m ²) τ_e : tensión crítica de erosión (N/m ²)
Tasa de erosión (Cappucci et al., 2004)	$q_{ero} = M_e \cdot (\tau_b - \tau_e)$	q_{ero} : disminución del volumen de la capa activa de sedimento por erosión (tasa de erosión) (kg/m ² s) M_e : coeficiente de tasa de erosión τ_b : tensión en el lecho (N/m ²) τ_e : tensión crítica de erosión (N/m ²)
Coeficiente de tasa de erosión (Huang et al., 2006; Ji, 2008)	$\log_{10} M_e = 0.23 \exp\left(\frac{0.198}{\rho_{wb} - 1.0023}\right)$	M_e : coeficiente de tasa de erosión (mg/cm ² h) ρ_{wb} : densidad del lecho húmedo (g/cm ³)
Coeficiente de tasa de erosión (Huang et al., 2006)	$M_e = 0.55 \left(\frac{\rho_d}{1000}\right)^3$	M_e : coeficiente de tasa de erosión (kg/m ² s) ρ_d : densidad del lecho seco (g/l)

Tabla 2-9. Ecuaciones para el cálculo de las fuentes de sólidos en suspensión (para $\tau_b \geq \tau_e$).

Parámetro	Símbolo	Valor	Referencia
Erosionabilidad	E	5x10 ⁻⁵ kg/m ² s (zonas submareales)	Lumborg y Pejrup, 2005
		2x10 ⁻⁴ kg/m ² s (plataformas intermareales)	
		1.6x10 ⁻³ kg/m ² s	Periañez, 2009
Coeficiente alfa de erosión	α_{ero}	6.5 m/N ^{0.5}	Lumborg y Pejrup, 2005
Constante implicada en la tasa de erosión	γ	8.3 (m/N ^{1/2})	Wu y Falconer, 2000
Densidad del sedimento seco	ρ_d	1430 kg/m ³ (Arena uniforme - floja)	US ACE, 2002
		1750 kg/m ³ (Arena uniforme - compacta)	US ACE, 2002
		1590 kg/m ³ (Arena mixta - floja)	US ACE, 2002
		1860 kg/m ³ (Arena mixta - compacta)	US ACE, 2002
Densidad del sedimento húmedo	ρ_{wb}	1890 kg/m ³ (Arena uniforme - floja)	US ACE, 2002
		2090 kg/m ³ (Arena uniforme - compacta)	US ACE, 2002
		1990 kg/m ³ (Arena mixta - floja)	US ACE, 2002
		2160 kg/m ³ (Arena mixta - compacta)	US ACE, 2002
Tasa de erosión del flóculo	q_f	7x10 ⁻⁷ kg/m ² s (fango estuarino)	Huang et al., 2006
		4.2x10 ⁻⁶ kg/m ² s	Wu y Falconer, 2000
Coeficiente de tasa de erosión	M_e	12x10 ⁻⁵ kg/m ² s	Alvera et al., 2003
		4.12x10 ⁻⁴ (kg/N)/s	Cappucci et al., 2004
Tasa de erosión (valores de referencia)	q_{ero}	0.002 - 0.004 g/Ns	Burton et al., 1995
		0.006 g/m ² s (estuario)	De Smedt et al., 1998
		0.011 g/m ² s (zona más exterior)	De Smedt et al., 1998
Máxima tasa de erosión (valores de referencia)	$q_{ero-max}$	Del orden de 0.6 g/m ² s	Ji, 2008

Tabla 2-10. Constantes involucradas en el cálculo de la tasa de erosión.

Por su parte, la velocidad de sedimentación se constituye como otro parámetro primordial en la definición de los procesos que gobiernan la dinámica sedimentaria. Dicho parámetro se calcula, habitualmente, bajo las consideraciones de la Ley de Stokes y depende, principalmente, del diámetro de la partícula. No obstante, cabe mencionar también la existencia de otro tipo de formulaciones capaces de calcular la velocidad de sedimentación de acuerdo con la distribución granulométrica de los sedimentos o incluso considerando los efectos derivados de procesos de floculación. Sin embargo, estas últimas alternativas implican la introducción de parámetros específicos, propios de cada zona de estudio, de los que habitualmente no se dispone, lo cual, exige el establecimiento de un minucioso estudio experimental previo.

Las siguientes tablas muestran la totalidad de las formulaciones identificadas para el cálculo de la velocidad de sedimentación de sedimentos no cohesivos (Tabla 2-11) y cohesivos (Tabla 2-12). Por su parte, la Tabla 2-14 recoge valores de referencia tanto para la propia velocidad de sedimentación como para los parámetros implicados en su cálculo tales como: densidad y diámetro de partícula, viscosidad y densidad del agua, etc.

	Ecuación	Expresión	Variables
SEDIMENTO NO COHESIVO	Velocidad de sedimentación $100 < d < 1000 \mu\text{m}$ (Van Rijn, 1984; Brach-Papa et al., 2006)	$w_s = 10 \cdot \frac{v_w}{d} \cdot \left[\left(1 + \frac{0.01 \cdot (s-1) \cdot g \cdot d^3}{v_w^2} \right)^{0.5} - 1 \right]$	w_s : velocidad de sedimentación (m/s) g : gravedad (m^2/s) s : densidad específica de la partícula (adimensional) v_w : viscosidad cinemática del agua (m^2/s) d : diámetro de la partícula (m)
	Velocidad de sedimentación $d > 1000 \mu\text{m}$ (Van Rijn, 1984)	$w_s = 1.1 \cdot [(s-1) \cdot g \cdot d]^{0.5}$	w_s : velocidad de sedimentación (m/s) g : gravedad (m^2/s) s : densidad específica de la partícula (adimensional) d : diámetro de la partícula (m)
	Viscosidad cinemática del agua	$v_w = \frac{\mu_w}{\rho_w}$	v_w : viscosidad cinemática del agua (m^2/s) μ_w : viscosidad dinámica del agua (kg/ms) ρ_w : densidad del agua (kg/m^3)
	Densidad específica de la partícula	$s = \frac{\rho_p}{\rho_w}$	s : densidad específica de la partícula ρ_p : densidad de la partícula (kg/m^3) ρ_w : densidad del agua (kg/m^3)

Tabla 2-11. Ecuaciones para el cálculo de la velocidad de sedimentación (sedimento no cohesivo).

	Ecuaación	Expresión	Variables
SEDIMENTO COHESIVO	Velocidad de sedimentación: d < 100 μm (Alvera et al., 2003)	$w_s = \frac{2}{9} \cdot g \cdot \frac{(\rho_p - \rho_w)}{\mu_w} \cdot r^2$	w _s : velocidad de sedimentación (m/s) g: gravedad (m/s ²) ρ _p : densidad de la partícula (kg/m ³) ρ _w : densidad del agua (kg/m ³) μ _w : viscosidad dinámica del agua (kg/ms) r: radio de la partícula (m)
	Densidad del agua (UNESCO, tomada de Castanedo, 2000)	$\rho_w(T, S) = 999.842594 + 6.793952 \times 10^{-2} T - 9.09529 \times 10^{-3} T^2 + 1.001685 \times 10^{-4} T^3 - 1.120083 \times 10^{-6} T^4 + 6.536332 \times 10^{-9} T^5 + \left(0.824493 - 4.0899 \times 10^{-3} T + 7.6438 \times 10^{-5} T^2 - 8.2467 \times 10^{-7} T^3 + 5.3875 \times 10^{-9} T^4 \right) S + \left(-5.72466 \times 10^{-3} + 1.0227 \times 10^{-4} T \right) S^{1.5} - 1.6546 \times 10^{-6} T^2 + 4.8314 \times 10^{-4} S^2$	ρ _w : densidad del agua (kg/m ³) T: temperatura (°C) S: Salinidad (psu)
	Viscosidad del agua (El-Dessouky y Ettouny, 2002)	$\mu_w = \mu_1 \cdot \mu_2 \cdot 10^{-3}$ $\ln(\mu_1) = -3.79418 + \frac{604.129}{139.18 + T}$ $\mu_2 = 1 + A \cdot S + B \cdot S^2$ $A = 1.474 \times 10^{-3} + 1.5 \times 10^{-5} \cdot T - 3.927 \times 10^{-8} \cdot T^2$ $B = 1.0734 \times 10^{-5} - 8.5 \times 10^{-8} \cdot T + 2.23 \times 10^{-10} \cdot T^2$	μ _w : viscosidad del agua (kg/ms) T: temperatura (°C) S: Salinidad (psu)
	Viscosidad del agua (Khublaryan et al., 2008)	$\mu_w = \mu_o \left(1 + 2.8 \cdot \left(\frac{\rho_s - \rho_o}{\rho_o} \right) \cdot S \right)$	μ _w : viscosidad de la mezcla de agua dulce y salada (kg/ms) μ _o : viscosidad del agua dulce (kg/ms) ρ _s : densidad del agua de mar (kg/m ³) ρ _o : densidad del agua dulce (kg/m ³) S: Salinidad (ppm)
	Velocidad de sedimentación d < 100 μm (Chapra, 1997)	$w_s = \alpha \frac{g}{18} \left(\frac{\rho_p - \rho_w}{\mu_w} \right) \cdot d^2$	w _s : velocidad de sedimentación (m/s) α: factor de esfericidad (para una esfera = 1) g: gravedad (m/s ²) ρ _p : densidad de la partícula (kg/m ³) ρ _w : densidad del agua (kg/m ³) μ _w : viscosidad dinámica del agua (kg/ms) d: diámetro de la partícula (m)
	Velocidad de sedimentación (Shahkolahi et al., 2006)	$w_s = K \cdot (d^2 + \chi^2)$	w _s : velocidad de sedimentación (m/s) d: diámetro medio de las partículas (m) χ: varianza del diámetro de las partículas (m)
	(Liu et al., 2002)	$K = \frac{g}{18 \cdot \nu_w} \left(\frac{\rho_p - \rho_w}{\rho_w} \right)$	g: gravedad (m/s ²) ρ _p : densidad de la partícula (kg/m ³) ρ _w : densidad del agua (kg/m ³) ν _w : viscosidad cinemática del agua (m ² /s)
	Velocidad de sedimentación considerando floculación (Ji, 2008 tomado de Thorn and Parsons, 1980)	$w_s = k \cdot \phi^m \quad \text{para } \phi < 2g/l$	w _s : velocidad de sedimentación (mm/s) φ: concentración de sólidos en suspensión (g/l) k, m: coeficientes para el cálculo de la velocidad de sedimentación considerando floculación
	Velocidad de sedimentación considerando floculación (Lumborg y Pejrup, 2005)	$w_s = k \cdot \phi^m$	w _s : velocidad de sedimentación (m/s) φ: concentración de sólidos en suspensión (mg/l) k, m: coeficientes para el cálculo de la velocidad de sedimentación considerando floculación

Tabla 2-12. Ecuaciones para el cálculo de la velocidad de sedimentación (sedimento cohesivo).

De las formulaciones presentadas en la tabla anterior, cabe resaltar la importancia del factor de esfericidad (α) en la deposición de sedimentos cohesivos puesto que la forma y tamaño de la partícula influye significativamente en la velocidad de sedimentación. Por tal motivo, algunos autores se han interesado en el estudio experimental de este factor. Por ejemplo, Hazzab et al. (2008) han analizado la velocidad de sedimentación de partículas de distintas geometrías en líquidos de diferentes densidades a fin de establecer el factor de esfericidad considerando distintas relaciones entre la altura y el diámetro de la partícula tal y como se muestra en la Tabla 2-13.

Geometría	Factor de esfericidad (α)	Altura f(diámetro)
Esfera	1	h=1D
Cubo	0.806	h=1D
Cilindro	0.696	h=5D
Cilindro	0.778	h=3D
Cilindro	0.804	h=2/5D
Cilindro	0.825	h=D/2
Cilindro	0.859	h=3/2D
Disco	0.594	h=D/6

Tabla 2-13. Factor de esfericidad para partículas de distinta geometría.

De este modo, tal y como puede observarse en la Tabla 2-13, el factor de esfericidad (α) sufre un mayor decremento cuanto más plana es la partícula. No obstante, cabe reconocer que, de forma adicional, experimenta también una disminución cuanto mayor sea la desproporción entre el largo y el ancho de partícula.

Así pues, se han desarrollado distintos índices de forma (Ecuación 2-15) que permiten predecir la velocidad de sedimentación de partículas no esféricas (Ecuación 2-14) considerando la proporción que guardan entre sí los ejes que definen el largo, el ancho y el espesor (Ecuación 2-16) de la partícula (Le Roux, 1996):

$$W = W_s \frac{H_r - 0.5833}{0.4167} \quad (2-14)$$

$$H_r = - \frac{(p_l \cdot \ln(p_l)) + (p_a \cdot \ln(p_a)) + (p_e \cdot \ln(p_e))}{1.0986} \quad (2-15)$$

$$p_l = \frac{l}{l+a+e}; \quad p_a = \frac{a}{l+a+e}; \quad p_e = \frac{e}{l+a+e} \quad (2-16)$$

donde:

W: velocidad de sedimentación de la partícula; W_s : velocidad de sedimentación de la esfera equivalente; H_r : índice de forma;

ρ_l , ρ_a , ρ_e : proporciones de los ejes que determinan el largo (l), ancho (a) y espesor (e) de la partícula, respectivamente.

Considerando que $W_s = \alpha \frac{g}{18} \left(\frac{\rho_p - \rho_w}{\mu_w} \right) \cdot d^2$, puede equipararse el factor de esfericidad (α) con la relación $\frac{H_r - 0.5833}{0.4167}$ puesto que ésta introduce la corrección debida a la forma de la partícula. Dicha relación es válida para partículas elipsoidales de cualquier densidad.

En contrapartida, para partículas de mayor tamaño (sedimento no cohesivo), la forma no parece ser un factor decisivo en cuanto al cálculo de la velocidad de sedimentación se refiere, dicha variable depende, principalmente, de la densidad de la partícula (ver Tabla 2-11).

Por su parte, el valor de la concentración de los sedimentos cercana al lecho resulta determinante en la variación del espesor de la capa activa del sedimento así como en el intercambio de masa entre el agua y dicha capa. Asimismo, condiciona el establecimiento de la tasa de sedimentación. Esta variable, depende, entre otros, de factores tales como la probabilidad y velocidad de sedimentación o la profundidad (Tabla 2-15). Las constantes involucradas en su cálculo se recogen en la Tabla 2-16.

Parámetro	Símbolo	Valor	Referencia
Gravedad	g	9.81 m/s ²	-
Densidad de la partícula	ρ_p	1027 kg/m ³ (fitoplancton)	Chapra, 1997
		2650 kg/m ³ (limo)	Chapra, 1997 Alvera et al., 2003 Brach-Papa et al., 2006; Ji, 2008
		2600 kg/m ³	Periañez, 2009
Diámetro de la partícula	d	2000 - 20000 μ m (grava)	Ji, 2008
		60 - 2000 μ m (arena)	
		3.9 - 60 μ m (limo)	
		< 3.9 μ m (arcilla)	
		10 - 20 μ m (limo)	Chapra, 1997
		D ₃₅ , D ₅₀ o D ₆₅ del material del lecho	Van Rijn, 1984
Radio de la partícula	r	1x10 ⁻⁵ m	Alvera et al., 2003; Chapra, 1997
Viscosidad cinemática del agua de mar a 35 psu y 20°C	ν_s	1.05372 x 10 ⁻⁶ m ² /s	ITTC, 1999
Viscosidad dinámica del agua de mar a 34.84 psu y 20°C	μ_s	0.0010245 kg/ms	Khublaryan et al., 2008
Densidad del agua de mar a 34.84 psu y 20°C	ρ_s	1.070 kg/m ³	Khublaryan et al., 2008
Densidad del agua dulce a 0 psu y 20°C	ρ_o	1.002 kg/m ³	Khublaryan et al., 2008
Velocidad de sedimentación (valores de referencia)	w_s	0.000026 m/s (Sistema Estuarino del Río Danshui)	Shahkolahi et al., 2006
Coeficientes para el cálculo de la velocidad de sedimentación considerando floculación	k, m:	k: 0.513; m: 1.29 (Estuario Severn, UK)	Ji, 2008 tomado de Thorn and Parsons, 1980
		k: 3.96x10 ⁻⁶ ; m: 1.19 (Estuario Lister Dyb, Dinamarca)	Lumborg y Pejrup, 2005

Tabla 2-14. Constantes involucradas en el cálculo de la velocidad de sedimentación.

Ecuación	Expresión	Variables
Concentración de sedimento (Lumborg y Pejrup, 2005)	$C_b = \beta \cdot \phi$	C _b : concentración de sedimento cercana al lecho (peso seco del sedimento en una mezcla de agua y sedimento / volumen de la mezcla) (Kg/m ³) β: coeficiente β φ: concentración de sólidos en suspensión (kg/m ³)
Coeficiente β (Lumborg y Pejrup, 2005)	$\beta = 1 + \frac{Pe}{1.25 + 4.75 \cdot (p_d^{2.5})}$	β: coeficiente β Pe: Número de Pécelet p _d : probabilidad de sedimentación
Número de Pécelet (Lumborg y Pejrup, 2005)	$Pe = \frac{w_s \cdot H}{D_z} = \frac{6w_s}{\kappa \cdot u_*}$	Pe: Número de Pécelet w _s : velocidad de sedimentación (m/s) H: profundidad de la columna de agua (m) D _z : difusividad de remolino (m ² /s) κ: constante de Von Karman u _* : velocidad de fricción (m/s)
Velocidad de fricción (Jönsson et al., 2005)	$u_* = \sqrt{\frac{\tau_b}{\rho_w}}$	u _* : velocidad de fricción (m/s) τ _b : tensión en el lecho (N/m ²) ρ _w : densidad del agua (kg/m ³)
Probabilidad de sedimentación (Lumborg y Pejrup, 2005)	$p_d = 1 - \left(\frac{\tau_b}{\tau_d}\right)$ para $\tau_b \leq \tau_d$ $p_d = 0$ para $\tau_b > \tau_d$	p _d : probabilidad de sedimentación τ _b : tensión en el lecho (N/m ²) τ _d : tensión crítica de sedimentación (N/m ²)
Concentración de sedimento (Vuksanovic et al., 1996)	$\frac{\partial C_b}{\partial t} = q_{sed} \cdot \frac{A}{v} - q_{ero} \cdot \frac{A}{v}$	C _b : concentración de sedimento cercana al lecho (Kg/m ³) q _{sed} : incremento del volumen de la capa activa de sedimento por deposición (tasa de sedimentación) (kg/m ² s) A: área de intercambio entre agua y sedimento (m ²) v: volumen del segmento de sedimento (m ³) q _{ero} : disminución del volumen de la capa activa de sedimento por erosión (tasa de erosión) (kg/m ² s)

Tabla 2-15. Ecuaciones para el cálculo de la concentración de sedimentos cercana al lecho.

Parámetro	Símbolo	Valor	Referencia
Difusividad de remolino	D _z	0,01 m ² /s (estuario) 0.1 m ² /s (zonas más abiertas)	Hill et al., 2003
Constante de Von Karman	κ	0.4	Lumborg y Pejrup, 2005
Velocidad de fricción	u _*	0 - 3.5 cm/s	Jönsson et al., 2005
Concentración de sólidos cercana al fondo (valores de referencia)	C _b	500-700 g/l	Thomann et al., 1991

Tabla 2-16. Constantes involucradas en el cálculo de la concentración de sedimentos cercana al lecho.

Tal y como se puede observar en la Tabla 2-15, la probabilidad de sedimentación se establece mediante un valor que oscila entre cero y uno calculado a partir de la relación entre la tensión del lecho y una tensión crítica de sedimentación que limita los procesos de deposición de las partículas. Por tal motivo, es preciso llevar a cabo el cálculo de ambas tensiones utilizando las formulaciones provistas en la Tablas 2-17 y 2-19. Al igual que para los parámetros anteriormente descritos, se han recopilado las constantes involucradas en su cálculo así como los correspondientes valores de referencia (Tablas 2-18 y 2-20). Cabe comentar, asimismo, que en el capítulo 3 se presenta un procedimiento para el establecimiento del

parámetro sedimentario denominado como “ u^2_{*d} ” utilizando mediciones de velocidad de corriente y de sólidos en suspensión.

Ecuación	Expresión	Variables
Tensión en el lecho debida a corrientes de marea (Cappucci et al., 2004; Ji, 2008)	$\tau_b = \rho_w C_D u^2$	τ_b : tensión en el lecho (N/m ²) ρ_w : densidad del agua (kg/m ³) C_D : coeficiente de arrastre u : corriente equivalente a la altura de 100 cm (m/s)
Densidad del agua (UNESCO, tomada de Castanedo, 2000)	$\rho_w(T, S) = 999.842594 + 6.793952 \times 10^{-2} T - 9.09529 \times 10^{-3} T^2 + 1.001685 \times 10^{-4} T^3 - 1.120083 \times 10^{-6} T^4 + 6.536332 \times 10^{-9} T^5 + \left(\begin{array}{l} 0.824493 - 4.0899 \times 10^{-3} T \\ + 7.6438 \times 10^{-5} T^2 - 8.2467 \times 10^{-7} T^3 \\ + 5.3875 \times 10^{-9} T^4 \end{array} \right) S + \left(\begin{array}{l} -5.72466 \times 10^{-3} + 1.0227 \times 10^{-4} T \\ -1.6546 \times 10^{-6} T^2 \end{array} \right) S^{1.5} + 4.8314 \times 10^{-4} S^2$	ρ_w : densidad del agua (kg/m ³) T : temperatura (°C) S : Salinidad (ppm)
Tensión en el lecho debida a vientos en zonas someras (Cappucci et al., 2004)	$\tau_b = 0.0007203 \cdot U_w^2 + 0.099206 \cdot U_w - 0.11125$	τ_b : tensión en el lecho (N/m ²) U_w : velocidad del viento (m/s)
Tensión en el lecho (Alvera et al., 2003)	$\tau_b = \rho_p \cdot \left(\frac{gn^2}{H^3} \right) \cdot u^2$	τ_b : tensión en el lecho (N/m ²) ρ_p : densidad de la partícula (kg/m ³) g : gravedad (m/s ²) n : coeficiente de rugosidad de Manning H : profundidad (m) u : velocidad del agua (m/s)
Tensión en el lecho (Ecuación diseñada para ríos) (Ciffroy et al., 2000)	$\tau_b = \rho_w \cdot g \cdot R_h \frac{v^2}{K_s^2 \cdot R_h^{4/3}}$	τ_b : tensión del lecho (N/m ²) ρ_w : densidad del agua (kg/m ³) g : gravedad (m/s ²) R_h : radio hidráulico (aprox. profundidad) (m) v : velocidad de flujo longitudinal (m/s) K_s : coeficiente de fricción de Strickler
Tensión en el lecho (sedimento cohesivo) (Ji, 2008)	$\tau_b = a_{sc} \rho_{wb} + b_{sc}$	τ_b : tensión del lecho (N/m ²) ρ_{wb} : densidad del lecho húmedo (g/cm ³) a_{sc} y b_{sc} : coeficientes para el cálculo de la tensión del lecho para $\rho_{wb} > 1.065$ g/cm ³

Tabla 2-17. Ecuaciones para el cálculo de la tensión del lecho.

Por su parte, la tensión crítica de erosión, se corresponde con un parámetro sedimentario limitador de los procesos de erosión del lecho. Tal y como puede observarse, las formulaciones disponibles para su cálculo (Tabla 2-21) dependen de constantes específicas dependientes del tipo de sedimento en cada zona concreta de estudio, no obstante, permiten llevar a cabo una aproximación de este parámetro en ausencia de datos más precisos. Las constantes involucradas en el cálculo de la tensión de erosión así como los valores de referencia utilizados por varios autores se recogen en la Tabla 2-22. En cuanto al parámetro sedimentario denominado como “ u^2_{*e} ”, al igual que para el caso anterior, el procedimiento descrito en el capítulo 3 permite llevar a cabo su cuantificación experimental.

2. Estado del conocimiento

Parámetro	Símbolo	Valor	Referencia
Gravedad	g	9.81 m/s ²	-
Coeficiente de arrastre	C _D	0.003	Cappucci et al., 2004 Ou y Chen, 2006
		0.0026	GESHA, 1999b Sámano, 2007 Bárcena, 2009 IH Cantabria, 2010a
		0.001 - 0.0026	Tsanis y Hurdowar-Castro, 2005
Densidad de la partícula	ρ _p	1027 kg/m ³ (fitoplancton)	Chapra, 1997
		2650 kg/m ³ (limo)	Chapra, 1997 Alvera et al., 2003 Brach-Papa et al., 2006; Ji, 2008
Densidad del lecho húmedo	ρ _{wb}	1890 kg/m ³ (Arena uniforme - floja)	US ACE, 2002
		2090 kg/m ³ (Arena uniforme - compacta)	US ACE, 2002
		1990 kg/m ³ (Arena mixta - floja)	US ACE, 2002
		2160 kg/m ³ (Arena mixta - compacta)	US ACE, 2002
Coeficiente de rugosidad de Manning	n	0.02	Wu et al., 2005
		0.025 - 0.033 (lechos suaves)	Thomann y Mueller, 1987
		0.045 - 0.060 (lechos rugosos)	
0.075 - 0.15 (corrientes con muchas algas)			
Coeficiente de fricción de Strickler	K _s	20 m ^{1/3} /s (canal natural)	Muñoz et al., 2007
		60 m ^{1/3} /s (material duro, liso)	Mattos, R., 1999
		50 m ^{1/3} /s (material duro, fino)	
		40 a 45 m ^{1/3} /s (grava fina a mediana)	
		35 m ^{1/3} /s (grava gruesa)	
		30 m ^{1/3} /s (barro con torriones)	
		25 a 30 m ^{1/3} /s (con piedras gruesas)	
20 a 25 m ^{1/3} /s (canales de tierra, mucha vegetación)			
Constantes para la determinación de la tensión del lecho	a _{sc}	9.808 (para ρ _{wb} > 1.065 g/cm ³)	Ji, 2008 tomado de Huang et al., 1989
	b _{sc}	-9.934 (para ρ _{wb} > 1.065 g/cm ³)	

Tabla 2-18. Constantes involucradas en el cálculo de la tensión del lecho.

Ecuación	Expresión	Variables
Tensión crítica de sedimentación (Vidal et al., 2005)	$\tau_d = \rho_w u_{*d}^2$	τ _d : tensión crítica de sedimentación (N/m ²) ρ _w : densidad del agua (kg/m ³) u ² * _d : parámetro sedimentario de deposición (m ² /s ²)

Tabla 2-19. Ecuación para el cálculo de la tensión de sedimentación.

Parámetro	Símbolo	Valor	Referencia
Parámetro sedimentario de deposición	u ² * _d	2.7 cm ² /s ² (Canal de Sancti Petri)	Vidal et al., 2005
Tensión crítica de sedimentación (valores de referencia)	τ _d	0.04 - 0.15 N/m ² (cohesivo)	Wu y Falconer, 2000
		0.06 N/m ² (pleamar)	Burton et al., 1995
		0.09 N/m ² (bajamar)	Burton et al., 1995
		0.35 N/m ²	Alvera et al., 2003
		0.2 - 0.5 N/m ²	Cancino y Neves, 1999
		0.06 N/m ² (Si φ < 0.3g/l)	Huang et al., 2006
		0.078 N/m ² (Si 0.3 < φ < 10g/l)	Huang et al., 2006
		0.06 N/m ²	Periañez, 2009
		0.2768 kg/ms ²	Vidal et al., 2005
		0.25 N/m ²	Wu et al., 2005
		0.06 - 1.1 N/m ²	Ji, 2008

Tabla 2-20. Constantes involucradas en el cálculo de la tensión de sedimentación.

Ecuación	Expresión	Variables
Tensión crítica de erosión (Cancino y Neves, 1999; Shahkolahi et al., 2006)	$\tau_e = A_1 \rho_d^{E_1}$	τ_e : tensión crítica de erosión (N/m ²) A_1 y E_1 : coeficientes dependientes del tipo de sedimento ρ_d : densidad del sedimento seco (kg/m ³)
Tensión crítica de erosión (Huang et al., 2006; Ji, 2008)	$\tau_e = a \cdot (\rho_{wb} - \rho_1)^b + c$	τ_e : tensión crítica de erosión (N/m ²) ρ_{wb} : densidad del lecho húmedo (g/cm ³) ρ_1 : densidad de referencia (g/cm ³) a, b y c: coeficientes para el cálculo de la tensión de erosión
Tensión crítica de erosión (Vidal et al., 2005)	$\tau_e = \rho_w u_{*e}^2$	τ_e : tensión crítica de erosión (N/m ²) ρ_w : densidad del agua (kg/m ³) u_{*e}^2 : parámetro sedimentario de erosión (m ² /s ²)

Tabla 2-21. Ecuaciones para el cálculo de la tensión de erosión.

Parámetro	Símbolo	Valor	Referencia
Densidad del sedimento seco	ρ_d	1430 kg/m ³ (Arena uniforme - floja)	US ACE, 2002
		1750 kg/m ³ (Arena uniforme - compacta)	US ACE, 2002
		1590 kg/m ³ (Arena mixta - floja)	US ACE, 2002
		1860 kg/m ³ (Arena mixta - compacta)	US ACE, 2002
Densidad del lecho húmedo	ρ_{wb}	1890 kg/m ³ (Arena uniforme - floja)	US ACE, 2002
		2090 kg/m ³ (Arena uniforme - compacta)	US ACE, 2002
		1990 kg/m ³ (Arena mixta - floja)	US ACE, 2002
		2160 kg/m ³ (Arena mixta - compacta)	US ACE, 2002
Coeficientes dependientes del tipo de sedimento	A_1	0.0012 (Estuario Tamar)	Cancino y Neves, 1999
		0.83 (Sistema Estuarino del Río Danshui)	Shahkolahi et al., 2006
	E_1	1.2 (Estuario Tamar)	Cancino y Neves, 1999
Densidad de referencia	ρ_1	1.065 g/cm ³	Huang et al., 2006
Constantes para el cálculo de la tensión de erosión	a	0.883	Huang et al., 2006
	b	0.2	
	c	0.05	
Parámetro sedimentario de erosión	u_{*e}^2	6.5 cm ² /s ² (Canal de Sancti Petri)	Vidal et al., 2005
Tensión crítica de erosión (valores de referencia)	τ_e	0.07 - 0.17 N/m ² (cohesivo)	Wu y Falconer, 2000
		0.2 N/m ² (pleamar)	Burton et al., 1995
		0.3 N/m ² (bajamar)	Burton et al., 1995
		0.3 N/m ²	Alvera et al., 2003
		0.5 - 2.36 N/m ²	Cappucci et al., 2004
		0.6663 kg/m ² s	Vidal et al., 2005
		1 N/m ²	Wu et al., 2005 ; Periañez, 2009

Tabla 2-22. Constantes involucradas en el cálculo de la tensión de erosión.

Finalmente, el último de los procesos implicados en la dinámica sedimentaria se corresponde con la consolidación del lecho. De acuerdo con Ji (2008) los efectos de dicho proceso en la resuspensión de sedimento cohesivo suele darse, como mínimo, después de 7 días.

Mediante este proceso, el sedimento que alcanza una mayor profundidad deja de formar parte de la capa activa y se consolida actuando como un sumidero permanente tanto de las partículas sólidas que forman dicho

sedimento como de las sustancias contaminantes que pudieran estar adsorbidas en ellas. Conforme el tiempo transcurre, la consolidación es más estable y, en consecuencia, el coeficiente de consolidación es menor.

Ecuación	Expresión	Variables
Tasa de consolidación (Fachada-Fernandes, 2005)	$q_{cons} = M_{SED} \cdot K_{cons}$ para $\tau_b < \tau_d$	q_{cons} : tasa de consolidación (kg/m ² s) M_{SED} : masa de sedimento por unidad de área (kg/m ²) K_{cons} : coeficiente de consolidación (1/s)
Coeficiente de consolidación (Huang et al., 2006)	$K_{cons} = \frac{1}{t_e} \ln \left(\frac{\rho_f - \rho_i}{\rho_f - \rho_e} \right)$	K_{cons} : coeficiente de consolidación (1/s) ρ_f : densidad final (t=∞) ρ_i : densidad inicial (t=0) ρ_e : densidad en el tiempo t_e

Tabla 2-23. Ecuaciones para el cálculo de la consolidación del lecho.

Si bien la formulación matemática implicada en el cálculo de la tasa de consolidación es sumamente sencilla (Tabla 2-23), la obtención del perfil de densidades en función del tiempo resulta una tarea sumamente compleja ya que exige un análisis detallado y específico para cada zona de estudio. A modo de ejemplo, en la Tabla 2-24, se recogen los resultados obtenidos por Teisson y Latteux para el estuario de Loire (Huang et al., 2006).

Capa	Densidad (g/l)	Duración	K_{cons} (1/s)
1	100	2 horas	0.00
2	120	4 horas	7.72×10^{-6}
3	145	8 horas	9.39×10^{-6}
4	175	16 horas	8.72×10^{-6}
5	205	1 día y 8 horas	6.98×10^{-6}
6	230	2 días y 16 horas	5.00×10^{-6}
7	250	5 días y 8 horas	3.38×10^{-6}
8	270	10 días y 16 horas	2.44×10^{-6}
9	290	∞	-

Tabla 2-24. Perfil de densidades del estuario de Loire en función del tiempo.

Cabe mencionar que Fachada-Fernandes (2005) utiliza un coeficiente de consolidación de 2.86×10^{-6} 1/s para el estuario del Tajo.

2.5.1.1. Calibración de los parámetros sedimentarios

Las mediciones experimentales son imprescindibles para la calibración y verificación de los modelos. De este modo, los modelos hidrodinámicos pueden calibrarse directamente con base en las mediciones de velocidad realizadas, o bien, de forma indirecta a través de la medición de concentraciones de algún parámetro (trazadores, clorofila, material en suspensión, radionucléidos, etc.) (Rajar et al., 1997).

De acuerdo con Vidal et al. (2005), cuando las variaciones temporales de la concentración de sólidos en suspensión son mayores que los procesos advectivos, es posible llevar a cabo la determinación experimental de los

parámetros sedimentarios involucrados en los procesos de deposición y erosión mediante la medición simultánea de las velocidades de las corrientes y de las concentraciones de sólidos en suspensión en el agua de mar tal y como se explica a continuación. Cabe mencionar que este método es aplicable para materiales cohesivos y no cohesivos.

De este modo, si se representa el producto de la profundidad por la variación de la concentración de sólidos en suspensión con respecto al tiempo, frente al cuadrado de la velocidad de fricción, se obtiene que los datos experimentales pueden ajustarse a las tres líneas rectas mostradas en la Figura 2-2:

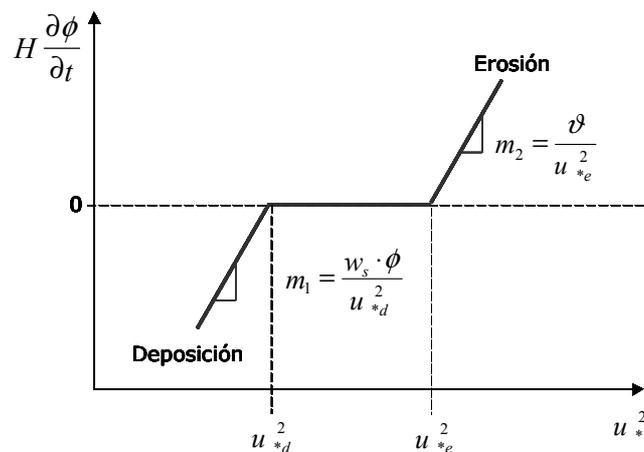


Figura 2-2. Líneas de ajuste para la calibración del parámetro de velocidad de sedimentación a partir de datos experimentales.

- Una primera recta, donde las variaciones de la concentración de sólidos en suspensión con respecto al tiempo son negativas hasta una cierta velocidad de fricción al cuadrado cuyo valor coincide con el cuadrado de la velocidad crítica de deposición. La pendiente de esta recta (Ecuación 2-17) proporciona una estima de:

$$m_1 = \frac{w_s \cdot \phi}{u_{*d}^2} \quad (2-17)$$

donde

w_s : velocidad de sedimentación, ϕ : concentración de sólidos en suspensión y u_{*d} : velocidad crítica de deposición.

- Una segunda recta de pendiente nula, donde las variaciones de la concentración en el tiempo son nulas también.

- Por último, una tercera recta a partir de una cierta velocidad de fricción al cuadrado, cuyo valor coincide con el cuadrado de la velocidad crítica de erosión, donde las variaciones de la concentración de sólidos en suspensión con respecto al tiempo son positivas. La pendiente de esta otra recta (Ecuación 2-18) proporciona una estima de:

$$m_2 = \frac{\vartheta}{u_{*e}^2} \quad (2-18)$$

donde

ϑ : constante empírica equivalente a la tasa de resuspensión y
 u_{*e} : velocidad crítica de erosión

Considerando que la ecuación general que describe a una línea recta viene dada por la expresión $y=mx+b$, puede asumirse que las líneas rectas que describen los fenómenos de deposición (Ecuación 2-19) y erosión (Ecuación 2-20) quedan definidas mediante las siguientes expresiones matemáticas:

$$H \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left(\frac{w_s \cdot \phi}{u_{*d}^2} \right) \cdot (u_*^2) + b_1 \quad (2-19)$$

$$H \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left(\frac{\vartheta}{u_{*e}^2} \right) \cdot (u_*^2) + b_2 \quad (2-20)$$

Asimismo, considerando que la velocidad de fricción (u_*) se corresponde con el producto de la velocidad del fluido (u) por el coeficiente de arrastre (C_D) y que del ajuste de los datos experimentales se conocerán las pendientes y constantes b_1 y b_2 de ambas rectas, así como los valores de u_{*d}^2 y u_{*e}^2 , es posible determinar la velocidad de sedimentación (w_s) y la constante empírica ϑ .

De este modo, de acuerdo con las Ecuaciones 2-21 y 2-22 es posible estimar, respectivamente, la velocidad de deposición y la tasa de erosión propias de la zona de estudio.

$$D = \begin{cases} \frac{w_s \phi}{u_{*d}^2} \cdot (u_{*d}^2 - u_*^2) & \text{para } u_{*d}^2 > u_*^2 \\ 0 & \text{para } u_{*d}^2 \leq u_*^2 \end{cases} \quad (2-21)$$

$$E = \begin{cases} \frac{\vartheta}{u_{*e}^2} \cdot (u_*^2 - u_{*e}^2) & \text{para } u_*^2 > u_{*e}^2 \\ 0 & \text{para } u_*^2 \leq u_{*e}^2 \end{cases} \quad (2-22)$$

Finalmente, considerando que las tensiones de deposición y erosión pueden ser estimadas, respectivamente, a través de las Ecuaciones 2-23 y 2-24, es posible llevar a cabo la determinación de ambos parámetros para la zona de estudio.

$$\tau_d = \rho_w \cdot u_{*d}^2 \quad (2-23)$$

$$\tau_e = \rho_w \cdot u_{*e}^2 \quad (2-24)$$

donde ρ_w : densidad del agua.

La obtención de estos parámetros resulta de gran utilidad para realizar simulaciones numéricas ya que constituyen los valores de partida necesarios para llevarlas a cabo. Estos valores pueden ser ajustados con posterioridad durante los procesos de validación.

2.5.2. Modelado de contaminantes de naturaleza química

En los últimos años, se ha realizado un esfuerzo importante en el desarrollo de esquemas y modelos predictivos para evaluar el efecto de los productos químicos vertidos en el medio acuático. Este tipo de contaminantes tiene la peculiaridad de poder ser potencialmente transferidos al ser humano, ya sea a través de la ingestión directa del compuesto químico presente en el agua de abastecimiento, o bien, a través de su ingestión a partir de alimentos acuáticos contaminados tales como peces o moluscos.

Estas sustancias generan un problema de calidad del agua cuando su vertido al medio provoca concentraciones, en el propio agua, o en la cadena alimentaria, que puedan resultar tóxicas al ser humano o al ecosistema. Una sustancia química se convierte en tóxica cuando a un determinado nivel de concentración, tiene un cierto impacto dañino, es decir, la mera presencia de un compuesto químico no necesariamente implica la presencia de una sustancia tóxica. De este modo, las principales características que distinguen a las sustancias tóxicas de los contaminantes convencionales son: la tendencia de ciertos químicos a adherirse a otras partículas presentes en la masa de agua, la tendencia de ciertos químicos a ser concentrados por los organismos acuáticos y a ser transferidos por la

cadena trófica, y, por último, la tendencia de ciertos químicos de resultar tóxicos en concentraciones en el agua relativamente bajas (del orden de $\mu\text{g/l}$ o ng/l) (Thomann y Mueller, 1987).

La mayoría de los contaminantes no se comportan de forma conservativa, por el contrario, tienden a reaccionar con los elementos del medio o a transformarse debido a las condiciones de éste. Por tal motivo, para modelarlos, es necesario añadir algunos términos más allá de la advección y difusión que describan dichos procesos de transformación o reacción. Aunado a esto, cabe mencionar que los numerosos contaminantes químicos liberados en el ámbito estuarino permanecen en una constante migración entre la columna de agua y los sedimentos en función de su propia naturaleza y de las características del medio. Además, en las masas de agua, dichos contaminantes pueden existir en dos fases: particulada (es decir, adsorbidos a los sedimentos finos como limos y arcillas, tanto en suspensión como sedimentados) y disuelta (es decir, disueltos en el cuerpo de agua o en el agua de los poros del lecho).

Por tal motivo, para la predicción de la concentración de contaminantes, desde una perspectiva fisicoquímica, han de considerarse procesos tales como (Kim et al., 2004; Thomann y Mueller, 1987):

- Oxidación y reducción.
- Efectos de la luz solar.
- Adsorción – desorción entre la forma disuelta y particulada, tanto en la columna de agua, como en los sedimentos.
- Sedimentación y resuspensión de las partículas.
- Intercambio difusivo entre el sedimento y la columna de agua.
- Pérdidas debidas a biodegradación, volatilización, fotólisis o cualquier otro tipo de reacción química o bioquímica que se vea favorecida por las condiciones del medio.
- Ganancia como productos de las reacciones previamente mencionadas.
- Transporte por advección y dispersión.
- Deposición neta y pérdida permanente en la capa profunda del sedimento.

Por su parte, desde un punto de vista biológico, es necesario considerar, a su vez, procesos tales como (James, 2002):

- Los mecanismos de selección que llevan a cabo los organismos acuáticos.
- Las respuestas tóxicas resultantes.
- Los efectos de la bioturbación sobre las tasas de degradación de los compuestos orgánicos
- Los efectos de bioacumulación en la cadena trófica.

Por tal motivo, no resulta sorprendente que la predicción de la concentración de contaminantes posea una incertidumbre inherente, no obstante, es posible reducir, en cierta medida, dicha incertidumbre a través de la profundización del entendimiento y del conocimiento de cada uno de estos factores. En este sentido, en esta tesis se ha optado por ahondar en el conocimiento de los mecanismos que rigen el comportamiento de los contaminantes asociados con la concentración de sólidos en suspensión presentes en el medio estuarino.

Para ello, habrá de tomarse en cuenta que para evaluar los efectos de una sustancia tóxica, deben ser determinados tanto el destino como transporte de dicha sustancia en el medio ambiente. Esto implica llevar a cabo un análisis que incluya el estudio de: i) los procesos hidrodinámicos relacionados con la advección y dispersión de los tóxicos en la columna de agua; ii) los procesos del sedimento relacionados con su transporte en la columna de agua, con la adsorción - desorción de los tóxicos y, con la sedimentación - resuspensión de los tóxicos adsorbidos; iii) fuentes externas como emisiones puntuales, escorrentías y aportes atmosféricos y; iv) procesos de transformación tales como fotólisis, hidrólisis y biodegradación, entre otros (Ji, 2008).

Interacción sólidos en suspensión - transporte de contaminantes

Las partículas suspendidas son fundamentales en el control de la reactividad, transporte e impacto biológico de las sustancias en el medio ambiente y, proveen un enlace crucial para los constituyentes químicos entre la columna de agua, el sedimento y la cadena trófica. En los estuarios, el papel que desempeñan estas partículas es especialmente significativo debido a las variaciones de concentración y características que experimentan tanto de forma regular (mareas), como esporádica (efectos del viento y/o caudales fluviales). Asimismo, dichas partículas experimentan la modificación de su reactividad química debido a cambios de salinidad, pH, condiciones rédox y concentración de materia orgánica disuelta (Turner y Millward, 2002).

Como ya se ha mencionado, los contaminantes presentan cierta tendencia a adsorberse sobre partículas finas y a seguir rutas determinadas tanto por las características, como por los procesos de transporte de los sedimentos. En este sentido, cabe mencionar que debido a las fuerzas electroquímicas y a la gran superficie relativa de las partículas de sedimento fino, existe una relación directa entre éste y los contaminantes que pueden adsorberse o desorberse del lecho bentónico (Cuello et al., 2006). Así pues, los sedimentos finos, limos y arcillas, tanto de fondo, como suspendidos, tienen una primordial importancia en los procesos de transporte de contaminantes.

De hecho, la contaminación de sedimentos es considerada por varios organismos ambientales internacionales como el mayor riesgo en los ambientes acuáticos, en virtud de que estos elementos persisten en el medio como microcontaminantes de elevada toxicidad (Trento y Álvarez, 2006). De este modo, los sedimentos, además de transportar sustancias contaminantes, las acumulan en el medio acuático permitiendo su liberación posterior hacia la columna de agua a través de procesos tales como: bioturbación, resuspensión, pesca o dragados (James, 2002). Así pues, los contaminantes abandonan el sistema cuando se consolidan en capas profundas del sedimento, son absorbidos por ciertos organismos tales como algunos moluscos o plantas acuáticas o, cuando debido a las transformaciones químicas que experimentan, dejan de ser sustancias tóxicas (Ji, 2008).

Tal y como se ha mencionado, los contaminantes se encuentran inmersos en una dinámica que implica tanto un continuo cambio de fase, entre la fase disuelta y la particulada; como un constante cambio de medio, entre el sedimento y la columna de agua. Cabe mencionar que, en términos generales, la forma disuelta de los contaminantes suele ser más tóxica y más reactiva química y biológicamente. Por su parte, 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 (Turner y Millward, 2002).

Entre los mecanismos que regulan las interacciones de las fases disuelta y particulada de dichos contaminantes se encuentran: las condiciones hidrodinámicas, que influyen en la deposición o resuspensión de las partículas, las propiedades fisicoquímicas de la masa de agua, los cambios en la concentración y las características propias del lecho. Asimismo, las interacciones de los contaminantes entre las partículas suspendidas y la columna de agua generan una variedad de procesos físicos, químicos y biológicos tales como: adsorción-desorción, absorción, degradación de la materia orgánica particulada, volatilización, fotólisis e hidrólisis, entre otros (Tabla 2-25).

Para describir tales procesos, aunque las cinéticas de reacción en los sistemas acuáticos pueden ser expresadas en numerosas formas, generalmente se adopta la formulación correspondiente a la ecuación 2-25:

$$\frac{dC}{dt} = R = -kC^m \quad (2-25)$$

donde m se corresponde con el orden de la reacción y k con la constante de reacción. Normalmente, para dichos sistemas, el orden de reacción varía entre 0 y 2 tal y como se muestra a continuación.

Una *reacción de orden cero* ($m=0$) (Ecuación 2-26) representa una degradación irreversible de un reactante independientemente de su concentración:

$$C = C_0 - kt \quad (2-26)$$

donde C_0 es la concentración inicial en $t=0$.

Por su parte, una *reacción de primer orden* ($m=1$), presenta tasas de reacción proporcionales a la concentración del reactante (Ecuación 2-27) y son las que más comúnmente se utilizan para describir las reacciones químicas y biológicas. En este tipo de reacciones, la concentración del reactante disminuye exponencialmente con el tiempo:

$$C = C_0 \cdot e^{-kt} \quad (2-27)$$

La mayoría de las reacciones que se llevan a cabo en el medio ambiente pueden ser convenientemente expresadas de este modo sin cometer mucho error, no obstante, la derivación de la constante de reacción k puede requerir de una cantidad significativa de información.

Finalmente, al igual que en el caso anterior, la concentración de una *reacción de segundo orden* ($m=2$) (Ecuación 2-28) decrece conforme transcurre el tiempo.

$$C = \frac{C_0}{1 + kC_0t} \quad (2-28)$$

De entre todos los procesos experimentados por las sustancias contaminantes en el medio marino, tal parece que la adsorción – desorción es el proceso predominante que regula la distribución de éstos entre el agua y el sedimento, así como la distribución de concentraciones en el estuario (De Smedt et al., 1998). Los parámetros más relevantes de dichos procesos son los coeficientes de partición, es decir, la razón de la concentración del contaminante en fase particulada con respecto a la concentración disuelta. Cabe mencionar que numerosos autores (Chapra, 1997; Cardini et al., 2004; Cuello et al., 2006; De Smedt et al., 1998; Huang et al., 2006; James, 2002; Thomann y Mueller, 1987; Turner y Millward, 2002; Wu et al., 2005) han investigado sobre las relaciones que podrían entablarse entorno al coeficiente de partición con respecto a: la solubilidad de productos químicos orgánicos, las variaciones granulométricas, las concentraciones de los sedimentos en suspensión y de fondo, la salinidad y pH natural de las aguas, la adsorción de sustancias químicas a los sólidos del sedimento, la reversibilidad de los procesos sufridos por las sustancias químicas en el medio y la capacidad de asimilación por los organismos acuáticos.

Proceso	Definición
Adsorción Desorción	La sorción es la transferencia de una sustancia de la fase acuosa a la sólida. Puede dividirse en adsorción (a nivel superficial) y absorción (de mayor penetración). Por el contrario, la desorción es el proceso mediante el cual las sustancias son liberadas desde las partículas hacia el agua. Estos procesos son la mayor vía de transporte de contaminantes en el medio acuático. Debido a las interacciones con la materia particulada, el comportamiento de los contaminantes se ve afectado por el transporte, deposición y resuspensión de los sedimentos.
Hidrólisis	La hidrólisis es la reacción de un químico con agua. Mediante esta reacción, los enlaces moleculares se rompen con la consecuente formación de nuevos enlaces con los iones hidrógeno (H^+) o hidroxilo (OH^-). Este proceso implica la ionización del agua y la ruptura del compuesto hidrolizado. Este proceso es la mayor vía de degradación de muchos tóxicos orgánicos, no obstante, los productos que genera suelen ser de toxicidad similar a la de los compuestos originales. En los modelos de calidad, se utiliza la hidrólisis para representar el proceso mediante el cual las sustancias orgánicas particuladas se convierten a su forma orgánica disuelta.
Fotólisis	La fotólisis o fotodegradación es la transformación irreversible de un compuesto como resultado de la absorción directa de la energía de la luz. Este proceso no necesariamente elimina la toxicidad del sistema puesto que los productos generados por las reacciones de fotólisis pueden seguir siendo tóxicos. Los coeficientes de fotólisis son usualmente función de la cantidad y longitud de onda de la luz incidente, de las características de absorción de la luz de cada compuesto y de la eficiencia a la cual la luz absorbida provoca una reacción química.
Biodegradación	La biodegradación o biólisis es la ruptura de un compuesto mediante una transformación enzimática, debida, principalmente, a la acción de las bacterias y en segundo lugar a la acción de algunos hongos. A pesar de que estas transformaciones microbiológicas pueden inactivar y mineralizar las sustancias tóxicas, pueden también activar otros tóxicos potenciales
Volatilización	Mediante la volatilización una sustancia química que se evapora del agua entra en la atmósfera. Matemáticamente este proceso se trata como si fuese irreversible debido a las similitudes matemáticas que guarda con tales procesos de degradación, no obstante, en realidad es un proceso reversible a través del cual, el sistema atmósfera agua trata de equilibrar la concentración de un compuesto en ambos medios.

Tabla 2-25. Procesos que experimentan las sustancias contaminantes en el medio marino.

Sin embargo, cabe mencionar que a pesar de que el concepto de coeficiente de partición ha sido ampliamente utilizado en el modelado, no deja de ser, esencialmente, una simplificación de un proceso subyacente mucho más complejo. Por tal motivo, el modelado mantiene ciertas incertidumbres en torno al coeficiente de partición adoptado (James, 2002). En este contexto, cabe reconocer que a pesar de que la mayoría de las veces se utiliza la forma más simplificada de este parámetro considerándolo como el cociente entre la concentración en su forma particulada y la concentración disuelta de un contaminante, existen otras formulaciones que permiten determinar dicho parámetro en función de la salinidad o de la concentración de sólidos en suspensión. Sin embargo, estas últimas formulaciones implican el uso de constantes específicas o del uso de determinaciones explícitas.

En la literatura científica se encuentran algunos ejemplos de casos de estudio aplicados a determinados estuarios para los cuales, tras realizar los ensayos pertinentes, se han obtenido las constantes necesarias para poder utilizar una formulación más precisa del coeficiente de partición. Tales son los casos, por ejemplo, del estudio llevado a cabo por Betty et al. (1996) con respecto a la geoquímica de sustancias contaminantes presentes en el Estuario Humber; el desarrollo del estudio del transporte y destino de metales en las aguas del estuario Mersey conducido por Wu et al. (2005) o; el estudio realizado por Mwanuzi y De Smedt (1997) para el análisis del transporte de metales pesados en el estuario de Scheldt.

Modelo utilizado para el estudio de las sustancias contaminantes

Tal y como se ha comentado, en un estuario, las sustancias contaminantes pueden existir tanto en fase disuelta como particulada. La distribución entre estas dos fases se describe a través del coeficiente de partición que determina la proporción entre las fracciones disuelta y particulada dependiendo de las características físico-químicas del material en suspensión así como de las condiciones del medio (salinidad, pH, etc.). Por tal motivo, debe resolverse la ecuación de transporte para las concentraciones disuelta y particulada en forma independiente. No obstante, el arreglo algebraico de dichas ecuaciones de transporte permite obtener una única ecuación capaz de resolver la concentración total.

A continuación se recoge la versión bidimensional de las ecuaciones de transporte para las concentraciones disuelta (Ecuación 2-29) y particulada (Ecuación 2-30) de forma independiente así como dos versiones de la forma integrada (Ecuaciones 2-31 y 2-32), a través de las cuales, es posible obtener la concentración total. Asimismo, se presenta la forma que adopta en su versión tridimensional (Ecuación 2-35).

1. Ecuaciones bidimensionales para el modelado de la evolución de la concentración disuelta, particulada y total de una sustancia contaminante (Wu et al., 2005):

$$\begin{aligned} \frac{\partial(HC_d)}{\partial t} + \frac{\partial(q_x C_d)}{\partial x} + \frac{\partial(q_y C_d)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(HD_x \frac{\partial C_d}{\partial x} \right) \\ - \frac{\partial}{\partial y} \left(HD_y \frac{\partial C_d}{\partial y} \right) = H(S_o^d + S_t^d) \end{aligned} \quad (2-29)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(HP \cdot SPM)}{\partial t} + \frac{\partial(q_x P \cdot SPM)}{\partial x} + \frac{\partial(q_y P \cdot SPM)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(HD_x P \frac{\partial SPM}{\partial x} \right) \\ & - \frac{\partial}{\partial y} \left(HD_y P \frac{\partial SPM}{\partial y} \right) = H(S_t^p + S_o^p + S_b^p) \end{aligned} \quad (2-30)$$

El manejo algebraico de las ecuaciones anteriores permite la obtención de una única ecuación de transporte para resolver la concentración total, tal y como se presenta a continuación:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(HC_T)}{\partial t} + \frac{\partial(q_x C_T)}{\partial x} + \frac{\partial(q_y C_T)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(HD_x \frac{\partial C_T}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(HD_y \frac{\partial C_T}{\partial y} \right) + \\ & \frac{\partial}{\partial x} \left(HD_x SPM \frac{\partial P}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(HD_y SPM \frac{\partial P}{\partial y} \right) = H(S_o^d + S_o^p + S_b^p) \end{aligned} \quad (2-31)$$

donde:

H: profundidad (m); C_T : concentración total de la sustancia contaminante (SC) ($\text{Kg}_{SC}/\text{m}^3$); C_d : concentración de contaminantes disueltos en el agua ($\text{Kg}_{SC}/\text{m}^3$); P: concentración de contaminantes adsorbidos en los sedimentos en suspensión ($\text{Kg}_{SC}/\text{Kg}_{SPM}$); q_x , q_y : velocidades integradas en profundidad ($q_x=uH$, $q_y=vH$) (m^2/s); D_x , D_y : coeficientes de dispersión (m^2/s); SPM: materia particulada en suspensión ($\text{Kg}_{SPM}/\text{m}^3$); S_o^d : fuentes o sumideros del contaminante en fase disuelta ($\text{Kg}_{SC}/\text{m}^3\text{s}$); S_o^p : fuentes o sumideros del contaminante adsorbido en la fracción particulada ($\text{Kg}_{SC}/\text{m}^3\text{s}$); S_b^p : fuentes o sumideros del contaminante desde o hacia el lecho (erosión o deposición) ($\text{Kg}_{SC}/\text{m}^3\text{s}$); S_t^p : término de transformación que define el flux de contaminante desde o hacia la fase disuelta en la columna de agua ($\text{Kg}_{SC}/\text{m}^3\text{s}$); S_t^d : término de transformación que define el flux de contaminante desorbido o adsorbido desde o hacia los sedimentos ($\text{Kg}_{SC}/\text{m}^3\text{s}$).

2. Ecuación bidimensional para el modelado de la evolución de la concentración total de una sustancia contaminante (Huang et al., 2006):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(HC_T)}{\partial t} + \frac{\partial(Hu C_T)}{\partial x} + \frac{\partial(Hv C_T)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(HD_x \frac{\partial C_T}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(HD_y \frac{\partial C_T}{\partial y} \right) = \\ & \frac{C_p \cdot C_{tb} \cdot \rho_p}{C_{sb} \cdot \rho_c \cdot C_t} \cdot Q_{ero} - \frac{C_p \cdot \rho_p}{C_s \cdot \rho_c} \cdot Q_{dep} - \lambda H c_v \end{aligned} \quad (2-32)$$

$$q_{ero} = Q_{ero} \cdot \rho_p \quad (2-33)$$

$$q_{dep} = Q_{dep} \cdot \rho_p \quad (2-34)$$

donde:

C_T : concentración volumétrica de la sustancia contaminante promediada en profundidad (m^3/m^3); H : profundidad (m); u , v : componentes de velocidad promediadas en profundidad (m/s); D_x , D_y : coeficientes de dispersión (m^2/s); C_t : concentración total en peso de la sustancia contaminante (Kg/m^3); C_p : concentración en peso de la sustancia contaminante adsorbida (Kg/m^3); C_{tb} : concentración en peso de la sustancia contaminante en el lecho (Kg/m^3); C_{sb} : concentración en peso del sedimento en el lecho (Kg/m^3); C_s : concentración total en peso del sedimento (Kg/m^3); ρ_p : densidad del sedimento (Kg/m^3); ρ_c : densidad de la sustancia contaminante (Kg/m^3); Q_{ero} : tasa de erosión del sedimento (m/s); q_{ero} : tasa de erosión (kg/m^2s); Q_{dep} : tasa de deposición del sedimento (m/s); q_{dep} : tasa de sedimentación (kg/m^2s); λ : degradación química (s^{-1}) y; c_v : concentración volumétrica total de la sustancia contaminante (m^3/m^3).

3. Ecuación tridimensional para el modelado de la evolución de la concentración total de una sustancia contaminante (Ji, 2008):

$$\begin{aligned} \partial_t(\Delta H C_T) + \partial_x(\Delta H u C_T) + \partial_y(\Delta H v C_T) + \partial_z(w C_T) - \partial_z(w_s f_p C_T) = \\ \partial_x(\Delta H K_H \partial_x C_T) + \partial_y(\Delta H K_H \partial_y C_T) + \partial_z\left(\frac{K_v}{\Delta H} \partial_z C_T\right) + R + Q_c \end{aligned} \quad (2-35)$$

donde:

ΔH : espesor de capa; C_T : concentración total del tóxico (disuelto y particulado); u , v , w : componentes de velocidad; w_s : velocidad de sedimentación; f_p : fracción particulada; K_H , K_v : condiciones de contorno horizontal y vertical; R : reactividad del proceso químico o biológico; Q_c : fuentes o sumideros externos de tóxicos, x e y : coordenadas cartesianas en las direcciones horizontales; z : coordenada sigma en la dirección vertical.

$$-\frac{K_v}{H} \partial_z C - w_s f_p C = F_o \quad \text{en la interfase agua - sedimento (} z \approx 0 \text{)} \quad (2-36)$$

$$F_o = \max(J_o, 0) \left(\frac{f_p^b}{S^b} + \varepsilon_r \frac{\rho_w}{\rho_s} f_d^b \right) C^b + \min(J_o, 0) \left(\frac{f_p^w}{S^w} + \varepsilon_d \frac{\rho_w}{\rho_s} f_d^w \right) C^w \quad (2-37)$$

$$-\frac{K_v}{H} \partial_z C - w_s f_p C = 0 \quad \text{en la superficie del agua (} z = 1 \text{)} \quad (2-38)$$

donde:

F_o : flujo neto de tóxicos desde el sedimento hacia la columna de agua; superíndices w y b : condiciones en la columna de agua y en el sedimento en la interfase agua – sedimento, respectivamente; J_o : flujo neto de sedimento del lecho hacia la columna de agua; S : concentración de sedimento; ρ_w : densidad del agua; ρ_s : densidad del sedimento; ε_r y ε_d : tasa de espacios vacíos en el lecho en condiciones de resuspensión y deposición, respectivamente; f_d : fracción disuelta.

Cabe mencionar que las ecuaciones 2-31 y 2-32 se corresponden con la misma formulación expresada en dos formas distintas de acuerdo con el manejo algebraico que han aplicado estos autores. La segunda expresión describe de forma más explícita la interacción con el sedimento, no obstante, cualquiera de ellas pone de manifiesto la relevancia que entraña la fase (disuelta o particulada) en la cual se encuentra presente la sustancia contaminante.

Tal y como se ha mencionado, estas formas de concentración (Tabla 2-26) guardan una relación con los sólidos en suspensión de acuerdo con el denominado coeficiente de partición. De este modo, si se pretende analizar las componentes de la concentración total de la sustancia contaminante como las concentraciones disuelta y particulada, es preciso calcular dicho coeficiente. Para ello existen diversas formulaciones (Tabla 2-27) en función de distintos parámetros tales como: las tasas de adsorción y desorción, la fracción de carbono orgánico total y el coeficiente de partición octanol – agua, entre otros.

Forma	Expresión	Variables
Concentración total (forma disuelta y particulada) (Wu et al., 2005)	$C_T = C_d + \phi \cdot P$	C_T : concentración total del compuesto tóxico (kg_T/m^3) C_d : concentración del compuesto tóxico en forma disuelta (kg_T/m^3) ϕ : concentración de sólidos en suspensión (kg_S/m^3) P : concentración del compuesto tóxico adsorbido expresada en peso seco de sólidos (kg_T/kg_S)
Concentración disuelta (Chapra, 1997; Turner y Millward, 2002; Wu et al., 2005)	$C_d = C_T \cdot f_d = C_T \cdot \left(\frac{1}{1 + K_D \cdot \phi} \right)$	C_d : concentración del compuesto tóxico en forma disuelta (kg_T/m^3) C_T : concentración total del compuesto tóxico (kg_T/m^3) f_d : fracción disuelta K_D : coeficiente de partición (m^3/kg_S) ϕ : concentración de sólidos en suspensión (kg_S/m^3)
Concentración particulada (Chapra, 1997; Turner y Millward, 2002; Wu et al., 2005)	$C_p = \phi \cdot P = C_T \cdot f_p = C_T \cdot \left(\frac{K_D \cdot \phi}{1 + K_D \cdot \phi} \right)$	C_p : concentración del compuesto tóxico en forma particulada (kg_T/m^3) ϕ : concentración de sólidos en suspensión (kg_S/m^3) P : concentración del compuesto tóxico adsorbido expresada en peso seco de sólidos (kg_T/kg_S) C_T : concentración total del compuesto tóxico (kg_T/m^3) f_p : fracción particulada K_D : coeficiente de partición (m^3/kg_S)
Suma de fracciones	$f_d + f_p = 1$	f_d : fracción disuelta f_p : fracción particulada

Nota: los subíndices S, T utilizados en las unidades de las variables contenidas en esta tabla denotan, respectivamente: sólidos y tóxico.

Tabla 2-26. Formas en las que pueden presentarse los contaminantes.

Forma	Expresión	Variables
Coefficiente de partición (Turner y Millward, 2002; Wu et al., 2005)	$K_D = \frac{P}{C_d}$	K_D : coeficiente de partición de contaminantes orgánicos (m^3/g_s) P: concentración del compuesto tóxico adsorbido expresada en peso seco de sólidos (g_T/g_s) C_d : concentración del compuesto tóxico en forma disuelta (g_T/m^3)
Coefficiente de partición (Chapra, 1997)	$K_D = 6.17 \times 10^{-7} \cdot f_{OC} \cdot K_{OW}$	K_D : coeficiente de partición de contaminantes orgánicos (m^3/g_s) f_{OC} : fracción masa de carbono orgánico total (g_c/g_s) K_{OW} : coeficiente de partición octanol - agua (m^3_w/m^3_o)
Coefficiente de partición de carbono orgánico (Chapra, 1997)	$K_{OC} = 6.17 \times 10^{-7} \cdot K_{OW}$	K_{OC} : coeficiente de partición de carbono orgánico (m^3/g_c) K_{OW} : coeficiente de partición octanol - agua (m^3_w/m^3_o)
Coefficiente de partición de carbono orgánico (Chapra, 1997; Turner y Millward, 2002)	$K_{oc} = \frac{K_D}{f_{oc}}$	K_{OC} : coeficiente de partición de carbono orgánico (m^3/g_c) K_D : coeficiente de partición (m^3/g_s) f_{oc} : fracción masa de carbono orgánico total (g_c/g_s). Fluctúa entre 0.001 y 0.1 (Thomann y Mueller, 1987)
Coefficiente de partición octanol - agua (Chapra, 1997)	$\log(K_{OW}) = 5.00 - 0.67 \cdot \log\left(\frac{S_w}{M} \times 10^3\right)$	K_{OW} : coeficiente de partición octanol - agua (m^3_w/m^3_o) S_w : solubilidad química en agua (mg/l) M: peso molecular (g/mol)
Coefficiente de partición f(salinidad) (Turner y Millward, 2002; Wu et al., 2005)	$K_D = K_D^o (S + 1)^{-b}$	K_D : coeficiente de partición en agua salina (m^3/g_s) K_D^o : coeficiente de partición en agua dulce (m^3/g_s) S: salinidad (escala práctica de salinidad) b: constante
Coefficiente de partición en función de propiedades físicas de la sustancia (Thomann y Mueller, 1987)	$\log(K_{OW}) = 6.50 - 0.89 \cdot \log(S_w) - 0.015(mp)$ $\log(K_{OC}) = -0.83 \cdot \log(S_{Mw}) - 0.01(mp - 25) - 0.93$	K_{OW} : coeficiente de partición octanol - agua (m^3_w/m^3_o) S_w : solubilidad química en agua ($\mu\text{mol/l}$) mp: punto de fusión del compuesto tóxico ($^{\circ}\text{C}$) K_{OC} : coeficiente de partición de carbono orgánico (m^3/g_c) S_{Mw} : solubilidad en agua fracción mol ($\text{mol}_T/(\text{mol}_T + \text{mol}_w)$)
Coefficiente de partición (reversibilidad del proceso ocurrido) (Thomann y Mueller, 1987)	$K_D = \frac{2 \cdot f_{OC} \cdot K_{OW}}{1 + \frac{\phi \cdot f_{OC} \cdot K_{OW}}{1.4}}$	K_D : coeficiente de partición (l/kg_T) f_{oc} : fracción masa de carbono orgánico total (g_c/g_s). Fluctúa entre 0.001 y 0.1. K_{OW} : coeficiente de partición octanol - agua (m^3_w/m^3_o) ϕ : concentración de sólidos en suspensión (kg_s/l)
Nota: los subíndices S, T, C, W y O utilizados en las unidades de las variables contenidas en esta tabla denotan, respectivamente: sólidos, tóxico, carbono orgánico, agua y octanol.		

Tabla 2-27. Formulaciones para el cálculo del coeficiente de partición.

Por su parte, en cuanto a los procesos de transformación que experimentan las sustancias contaminantes en el medio marino es preciso destacar procesos físicos y químicos tales como: la **adsorción - desorción** entre las formas disuelta y particulada tanto en la columna de agua como en los sedimentos; el **intercambio difusivo** entre el sedimento y la columna de agua; la pérdida que ocurre como consecuencia de los procesos de **volatilización** (excepto los metales pesados y radionucléidos de larga vida), **fotólisis**, **biodegradación** o cualquier otro tipo de **reacción química o bioquímica** favorecida por las condiciones del medio, así como su **pérdida definitiva** en capas más profundas del sedimento (Tabla 2-28).

Proceso	Expresión	Variables
Adsorción y Desorción (cinética de 1 ^{er} orden) (Thomann y Mueller, 1987)	$\frac{dC_p}{dt} = k_{ads} \cdot \phi \cdot C_d - k_{des} \cdot C_p$ $\delta \frac{dC'_d}{dt} = -k_{ads} \cdot \phi \cdot C_d + k_{des} \cdot C_p$	<p>C_p: concentración del compuesto tóxico en forma particulada (kg_T/m³_{A+S})</p> <p>k_{ads}: tasa de adsorción (m³_A/kg_S*s)</p> <p>φ: concentración de sólidos en suspensión (kg_S/ m³_{A+S})</p> <p>C_d: concentración del compuesto tóxico en forma disuelta (kg_T/m³_A)</p> <p>k_{des}: tasa de desorción (1/s)</p> <p>δ: porosidad (m³_A/m³_{A+S})</p> <p>Subíndices: T = Tóxico, A = Agua, S = Sólidos</p>
Intercambio difusivo (Carrer et al., 2005)	$v_d = 69.35 \cdot \delta \cdot M^{\frac{2}{3}} \cdot (C_{dint} - C_{wb})$	<p>v_d: tasa de difusión (mg/m²año)</p> <p>δ: porosidad (m³_A/m³_{A+S})</p> <p>M: peso molecular (g/gmol)</p> <p>C_{dint}: concentración disuelta intersticial (mg/m³)</p> <p>C_{wb}: concentración en agua cercana al fondo (mg/m³)</p>
Pérdida por hidrólisis (Thomann y Mueller, 1987)	$k_H = k_n + k_a [H^+] + k_b [OH^-]$	<p>k_H: tasa de hidrólisis (10⁻¹ - 10⁻⁷ día⁻¹)</p> <p>k_n: tasa neutral de hidrólisis (1/día)</p> <p>k_a: tasa de hidrólisis ácida catalizada (1/mol*día)</p> <p>H⁺: concentración molar de iones hidrógeno (mol*H⁺)</p> <p>k_b: tasa de hidrólisis básica catalizada (1/mol*día)</p> <p>OH⁻: concentración molar de iones hidroxilo (mol*OH⁻)</p>
Pérdida por fotólisis (Thomann y Mueller, 1987)	$k_p = k_{do} \left(\frac{I_o}{I'_o} \right) \cdot \left(\frac{D}{D_o} \right) \left\{ \frac{1 - e^{-k_e(\lambda_{max})H}}{k_e(\lambda_{max})H} \right\}$	<p>k_p: tasa de degradación por fotólisis (1/día)</p> <p>k_{do}: tasa de fotólisis en la superficie (1/día)</p> <p>I_o: intensidad de la luz (ly/día)</p> <p>I'_o: intensidad de la luz a la que se midió k_{do} (ly/día)</p> <p>D: función de distribución radiante (1.2 - 1.6)</p> <p>D_o: función de distribución radiante cerca de la superficie (1.2)</p> <p>k_e(λ_{max}): coeficiente de extinción de luz para la longitud de onda de mayor absorción luminosa (λ_{max})</p> <p>H: profundidad de agua (m)</p>
Pérdida por biodegradación (Thomann y Mueller, 1987)	$k_{BT} = k_{B20} \cdot \theta^{(T-20)}$	<p>k_{BT}: tasa de biodegradación corregida por la temperatura (1/día)</p> <p>k_{B20}: tasa de biodegradación a 20°C (1/día)</p> <p>θ: factor corrector de temperatura (1.04 - 1.095)</p> <p>T: temperatura (°C)</p>
Pérdida por volatilización (Thomann y Mueller, 1987)	$\frac{1}{k_l} = \frac{1}{K_l} + \frac{1}{K_g He}$ $K_l = \left(\frac{32}{M} \right)^{\frac{1}{4}} \cdot K_L$ $K_g = 168 \cdot \left(\frac{18}{M} \right)^{\frac{1}{4}} \cdot U_w$	<p>k_l: coeficiente conjunto del proceso de volatilización en ambas capas (m/día)</p> <p>K_l: coeficiente de intercambio de la capa líquida (m/día)</p> <p>K_g: coeficiente de intercambio en la capa gaseosa (m/día)</p> <p>He: cte de Henry en forma adimensional = He'/RT</p> <p>He': constante de Henry (atm*m³/mol)</p> <p>R: constante universal de los gases (8.206x10⁻⁵ atm*m³/K*mol)</p> <p>T: temperatura (K)</p> <p>M: peso molecular del compuesto tóxico (g/gmol)</p> <p>K_L: tasa de transferencia de oxígeno (m/día)</p> <p>U_w: velocidad del viento (m/s)</p>
Pérdida definitiva en capas más profundas del sedimento (Periañez, 2009)	$\lambda_{burial} = \frac{q_{sed}}{\rho_{global} \cdot L}$	<p>λ_{burial}: tasa de pérdida definitiva en capas más profundas del sedimento (1/s)</p> <p>q_{sed}: tasa de sedimentación (kg/m²s)</p> <p>ρ_{global}: cociente de la masa de sedimento seco entre el volumen de sedimento húmedo (kg/m³)</p> <p>L: distancia a la cual la fase disuelta penetra en el sedimento (0.1 m)</p>

Tabla 2-28. Formulación para el cálculo de los procesos de degradación que experimentan las sustancias contaminantes.

Además, es preciso considerar el almacenamiento o **acumulación de tóxicos** en capas más profundas del sedimento. De acuerdo con Mwanuzi y De Smedt (1997) la variación de la concentración del tóxico que se va almacenando en el lecho del sedimento depende, por un lado, de la tasa de sedimentación y de la concentración particulada y , por otro lado, de la tasa de erosión conjuntamente con la concentración de tóxico y de sólidos en suspensión en las cercanías del fondo (Ecuaciones 2-39 y 2-40).

$$H \frac{\partial C_{bT}}{\partial t} = C_p \cdot q_{sed} - \frac{C_{bT}}{C_b} \cdot q_{ero} \quad (2-39)$$

$$C_{bT} = C_{bp} \cdot C_b \quad (2-40)$$

donde:

C_{bT} : concentración del tóxico en el lecho (mg_{tox}/l), C_p : concentración particulada del tóxico en la columna de agua (mg_{tox}/mg_{SS}), q_{sed} : tasa de sedimentación (mg_{SS}/m^2s), C_b : concentración de sólidos en suspensión cercana al fondo (mg_{SS}/l), q_{ero} : tasa de erosión (mg_{SS}/m^2s), C_{bp} : concentración de tóxico adsorbida en los sólidos en suspensión cercanos al fondo (mg_{tox}/mg_{SS}).

A efectos de completar la formulación anterior, se ha introducido un pequeño ajuste (Ecuación 2-41) añadiendo el factor de tasa de difusión presentado previamente (Tabla 2-28). Cabe comentar, que de acuerdo con Carrer et al. (2005), se considera que el flujo de difusión es igual a cero cuando el gradiente entre la concentración intersticial y la concentración del tóxico en el agua cercana al fondo es negativo.

$$H \frac{\partial C_{bT}}{\partial t} = C_p \cdot q_{sed} - \frac{C_{bT}}{C_b} \cdot q_{ero} - v_d \quad (2-41)$$

donde:

v_d : tasa de difusión.

Tal y como puede observarse en la Tabla 2-28, además de la fuerza motriz que representa el gradiente de concentraciones para fomentar la difusión, esta variable es función del peso molecular y de la porosidad. A modo de guía, en la Tabla 2-29 se recogen algunos valores de porosidad de acuerdo con la concentración de sólidos por unidad de volumen del sedimento. No obstante, cabe comentar que de acuerdo con Thomman y Mueller (1987), en términos generales, la porosidad de las capas superiores del sedimento se encuentra entre 0.7 y 0.8. Por su parte, Chapra (1997) indica un intervalo de 0.75 a 0.95 para la valoración de dicho parámetro.

δ (cm ³ /cm ³)	Concentración sólidos / sedimento (g/cm ³)
0.9	0.26
0.8	0.52
0.7	0.78
0.6	1.04
0.5	1.30

Tabla 2-29. Valores de porosidad en función de la concentración de sólidos en el sedimento (Di Toro, 2001).

Por su parte, la pérdida global por volatilización, fotólisis, hidrólisis y biodegradación en la fase disuelta (v_{Td}) queda definida a través de las Ecuaciones 2-42 y 2-43 (Thomann y Mueller, 1987):

$$v_{Td} = (k_{deg}H + k_l) \cdot f_d \quad (2-42)$$

$$k_{deg} = k_p + k_H + k_{BT} \quad (2-43)$$

donde:

k_{deg} : tasa de pérdida por procesos distintos a la volatilización, H: profundidad de la columna de agua, k_l : coeficiente conjunto del proceso de volatilización en ambas capas, f_d : fracción disuelta, k_p : tasa de degradación por fotólisis, k_H : tasa de hidrólisis, k_{BT} : tasa de biodegradación corregida por la temperatura.

2.5.3. Influencia de las propiedades del medio

Tal y como se ha comentado, los contaminantes en el medio marino y estuarino se encuentran inmersos en una dinámica tanto de fases como de medios. Asimismo, ciertas propiedades del entorno en el cual se lleva a cabo tal dinámica resultan fundamentales para propiciar conductas específicas en los elementos del sistema o favorecer determinados procesos por encima de otros. Por tal motivo, a continuación se describen las propiedades del medio cuyo efecto ejerce una mayor influencia.

Salinidad

La salinidad del agua de mar se debe a un numeroso conjunto de sales inorgánicas que se encuentran disociadas en sus respectivos iones. Junto con la temperatura, son los dos factores principales en la determinación de

la distribución de las especies oceánicas y litorales. Asimismo, determinan la densidad del agua de mar, la cual, es uno de los factores que rige las corrientes.

En términos generales, el agua del mar contiene alrededor de 35 gramos de componentes disueltos por cada kg de agua, lo cual, queda representado por una salinidad de 35 ‰. La composición química de los componentes disueltos es constante, por tal motivo, las variaciones de salinidad son consecuencia, únicamente, de la evaporación, precipitación y mezcla. En las costas, la salinidad media puede verse alterada debido a las variaciones que pueden producirse en las pequeñas pozas que se forman en las costas intermareales rocosas al bajar la marea. En estas zonas, cuando hay reflujos de marea, al evaporarse el agua, se produce un incremento de salinidad, mientras que cuando llueve, la salinidad desciende.

Por su parte, la salinidad de los estuarios es variable, siendo igual a la del agua de mar en la parte que limita con el mar abierto o la costa, e igual a la del agua dulce, en la parte que limita con el río, pasando por niveles intermedios en la zona comprendida entre ambos extremos.

En los estuarios, las variaciones diarias de salinidad debidas a las mareas son importantes ya que originan dos tipos de gradientes uno en vertical y otro en horizontal. Dependiendo de la distribución de agua salada y dulce, y del grado de mezcla en vertical, los estuarios pueden clasificarse como (Hardisty, 2007):

- Estuarios con cuña salina: el agua dulce (menos densa que la salada) queda sobre la superficie del agua salada. Se presenta en zonas o en períodos de tiempo en los cuales el movimiento de marea es escaso.
- Estuarios parcialmente mezclados: se forman donde los ríos descargan en el mar en presencia de un rango mareal moderado. En este tipo de estuarios, existe mezcla del agua salada hacia el agua dulce y del agua dulce hacia el agua salada.
- Estuarios bien mezclados: el gradiente vertical no existe o es muy pequeño, sin embargo, persiste el gradiente en horizontal, ya que la fuerza de Coriolis provoca que, en el Hemisferio Norte, el agua marina fluya hacia adentro del estuario sobre la margen izquierda, mientras que el agua del río lo hace en la margen derecha (mirando hacia el mar desde la boca del río).

En un único estuario se pueden dar las tres situaciones según la zona del mismo (cola o bocana). Además el tipo de mezcla de agua puede alternar en función de las variaciones del caudal del río y de los ciclos mareales.

La influencia de esta propiedad se ve reflejada, principalmente, en modificaciones de densidad y reactividad química, en variaciones en el

coeficiente de partición γ , en el favorecimiento de los procesos de floculación (Ji, 2008).

Temperatura

Aunque la temperatura no se usa para evaluar directamente la calidad del agua, ejerce un efecto significativo en la mayoría de las reacciones químicas que ocurren en el medio acuático. Muchas de las reacciones que implican la disolución de sólidos, se ven aceleradas con el incremento de la temperatura. Por el contrario, la solubilidad de los gases en el agua disminuye a medida que la temperatura aumenta tal y como se observa en los valores de la constante de Henry, la cual, es inversamente proporcional a la capacidad de solubilización de los gases (Tabla 2-30).

T(°C)	H x 10 ⁻⁴ (atm/fracción mol)							
	Aire	CO ₂	CO	H ₂	H ₂ S	CH ₄	N ₂	O ₂
0	4.32	0.0728	3.52	5.79	0.0268	2.24	5.29	2.55
10	5.49	0.104	4.42	6.36	0.0367	2.97	6.68	3.27
20	6.64	0.142	5.36	6.83	0.0483	3.76	8.04	4.01
30	7.71	0.186	6.20	7.29	0.0609	4.49	9.24	4.75

Tabla 2-30. Constante de Henry para algunos gases ligeramente solubles en agua (Peavy et al., 1985).

Finalmente, cabe mencionar que la temperatura afecta también las propiedades físicas del agua. En la Tabla 2-31 se recogen los valores de algunas propiedades físicas del agua a diferentes temperaturas.

Temperatura	Peso específico	Densidad	Módulo de elasticidad ⁽¹⁾	Viscosidad dinámica	Viscosidad cinemática	Tensión superficial ⁽²⁾	Presión de vapor
T (°C)	γ (kN/m ³)	ρ (kg/m ³)	E/10 ⁶ (kN/m ²)	$\mu \times 10^3$ (Ns/m ²)	$\nu \times 10^6$ (m ² /s)	σ (N/m)	p_v (kN/m ²)
0	9.805	999.8	1.98	1.781	1.785	0.0765	0.61
5	9.807	1000.0	2.05	1.518	1.519	0.0749	0.87
10	9.804	999.7	2.10	1.307	1.306	0.0742	1.23
15	9.798	999.1	2.15	1.139	1.139	0.0735	1.70
20	9.789	998.2	2.17	1.002	1.003	0.0728	2.34
25	9.777	997.0	2.22	0.890	0.893	0.0720	3.17
30	9.764	995.7	2.25	0.798	0.800	0.0712	4.24

⁽¹⁾ A presión atmosférica

⁽²⁾ En contacto con aire

Tabla 2-31. Propiedades físicas del agua (Peavy et al., 1985).

En los sistemas acuáticos naturales, la temperatura responde a muchos factores, algunos naturales y otros de origen antropogénico. Entre los primeros, el más significativo corresponde a las variaciones diarias y estacionales de la temperatura ambiente, cuyo efecto se va atenuando conforme aumenta la profundidad de la masa de agua. Además, existen diferencias entre la temperatura del agua marina y la del agua dulce. Las temperaturas bajas suelen coincidir con las salinidades más bajas, puesto que en invierno el caudal de agua dulce puede verse incrementado por la lluvia o por la rápida fusión de la nieve. Por el contrario, durante el verano, aparecen temperaturas más elevadas asociadas a salinidades elevadas también, ya que los períodos de sequía reducen los caudales de agua dulce al mismo tiempo que el sol calienta y evapora el agua. Entre los factores de origen antropogénico, cabe destacar las descargas de aguas de refrigeración.

Además de las propiedades físicas del medio acuático, la influencia de la temperatura resulta notoria en términos de la reactividad química y biológica (Peavy et al., 1985).

Potencial de Hidrógeno

La concentración de iones hidrógeno es un parámetro importante en términos de la calidad del agua. Éste se expresa usualmente como pH, es decir, como el logaritmo negativo de la concentración de iones hidrógeno. Para ello se utiliza una escala que oscila entre 0 y 14, siendo 7 un valor neutro. Cuanto más bajo es el valor del pH, se asume una mayor acidez en el sistema; en cambio, cuanto mayor sea el valor del pH, se asume una mayor basicidad.

Generalmente, las aguas naturales tienden a permanecer dentro de una estrecha banda de actividad de los iones hidrógeno debido a la presencia de *buffers* que amortiguan los cambios de pH. Típicamente, el rango apropiado para la subsistencia de la mayoría de la vida biológica se sitúa en un pH entre 6 y 9.

En muchos sistemas acuáticos gran parte de este amortiguamiento está relacionado con las especies inorgánicas de carbono: dióxido de carbono (CO_2), ion bicarbonato (HCO_3^-) e ión carbonato (CO_3^{2-}). De ese modo, cuando el dióxido de carbono es introducido en el sistema se combina con el agua para formar ácido carbónico (Ecuación 2-44) que posteriormente se disocia en su forma iónica (Ecuación 2-45) (Chapra, 1997).



Cabe resaltar que la tasa de la mayoría de las reacciones químicas puede verse alterada de forma significativa en función del pH. Asimismo, la solubilidad y biodisponibilidad de muchos compuestos químicos dependen de esta variable. Así, por ejemplo, los metales pesados se vuelven mucho más solubles en condiciones ácidas. De este modo, bajo tales condiciones se favorece su liberación desde el sedimento (Chapra, 1997).

Radiación solar

A medida que se incrementa la profundidad, la radiación luminosa proveniente de la atmósfera que penetra en la masa de agua experimenta un proceso de atenuación. Esto es debido principalmente a dos mecanismos de extinción basados en procesos de absorción y dispersión. Mediante la absorción, la energía de onda corta es transformada en energía de onda larga. Por su parte, la dispersión, se debe al efecto de la reflexión y difracción provocada por la presencia de partículas diversas.

El grado de penetración en el volumen de agua de la luz solar depende de varios factores, unos externos y otros propios de la masa de agua. Entre los primeros cabe destacar: la duración luminosa del día (variable a lo largo del día y el año), la elevación del sol, la nubosidad y la condición reflejante del agua. Entre los factores que dependen directamente de las características de la masa de agua se encuentran: la presencia de sólidos en suspensión no volátiles capaces de absorber y dispersar la luz, así como la presencia de detritos orgánicos, partículas y organismos vivos capaces de absorber la luz.

Por tal motivo, numerosos investigadores han utilizado una forma modificada de la ley de Beer-Lambert para describir la atenuación de la luz en la masa de agua tal y como expresa la ecuación 2-46.

$$I(z) = I_0 \exp(-K_e z) \quad (2-46)$$

donde

$I(z)$: radiación solar a una profundidad z

I_0 : radiación solar incidente en superficie

K_e : coeficiente de extinción de la luz en el cuerpo de agua (m^{-1})

z : profundidad (m)

En esta expresión, el coeficiente de extinción (K_e) mide la velocidad con la que se desarrolla la atenuación, considerando, por tanto, la importancia de los factores indicados anteriormente. El valor de este coeficiente puede determinarse mediante el ajuste matemático resultante del tratamiento de los datos procedentes de la realización de varias medidas de la intensidad luminosa disponible a diferentes profundidades. Otra forma de obtener

dicho coeficiente, consiste en correlacionar, a través de formulaciones empíricas (Ecuación 2-47), los valores generados por las mediciones de transparencia obtenidas utilizando el disco de Secchi.

$$K_e = \frac{C}{z_s} \quad (2-47)$$

donde

K_e : coeficiente de extinción de la luz en el cuerpo de agua (m^{-1})

C: constante entre 1.7 y 1.9 (Ji, 2008)

z_s : profundidad del disco de Secchi (m)

La importancia de la radiación solar radica, principalmente, en el efecto que causa sobre los procesos de fotólisis. No obstante, cabe considerar, asimismo, la influencia que ejerce en algunos procesos de biodegradación (Chapra, 1997; Thomann y Mueller, 1987).

2.6. CONCEPTOS RELATIVOS A LA VALIDACIÓN DE MODELOS NUMÉRICOS

Como es de suponerse, la demostración de la validez de un modelo numérico puede implicar un gran número de datos, pruebas y procedimientos, por tal motivo, a continuación se describen, brevemente, algunos de los conceptos relacionados con este proceso fundamental. No obstante, en el Capítulo 3 se aborda con mayor detalle la validación teórica realizada específicamente para el modelo desarrollado. Asimismo, en el Capítulo 5 se presenta la validación conceptual del modelo desarrollado aplicando un análisis de sensibilidad en la Ría de San Martín.

Así pues, además de la validación teórica, existen otros dos tipos de validación: la validación operacional que implica la comparación de datos simulados con datos reales y la validación conceptual que se refiere a la justificación de las teorías y suposiciones que encierra el modelo.

La **validación operacional** es un protocolo de prueba para demostrar que los resultados de un modelo alcanzan los estándares de desarrollo requeridos para lograr los objetivos de dicho modelo. Este proceso es una aproximación pragmática, puesto que se centra, principalmente, en que tan bien el modelo imita el sistema con independencia de los mecanismos bajo los cuales haya sido programado. Para la validación operacional, es necesaria una comparación de los datos simulados con datos obtenidos a

través de la observación y medición del sistema real. Para ello, habitualmente se han utilizado pruebas estadísticas de comparación.

Por su parte, la **validación conceptual** significa que las teorías y asunciones que subyacen bajo el modelo conceptual son correctas, o al menos, justificables y que, por tanto, la representación del sistema, la estructura lógica – matemática y las relaciones causales son razonables. En concreto, la validación conceptual debe proveer una explicación científica aceptable de las relaciones causa – efecto incluidas en el modelo.

Cabe mencionar que los datos reales no son infalibles para juzgar el desempeño de un modelo. Para poder utilizarlos, debe ser demostrada no sólo su validez, sino también su interpretación. Obviamente, en términos generales, no se puede esperar que un modelo numérico aporte mejores resultados que los datos disponibles, no obstante, en aquellas ocasiones en las que las limitaciones técnicas impiden un buen desarrollo de la medición y observación del sistema, los modelos numéricos aportan mejores representaciones de la realidad física.

Existen varios tipos de procedimientos de validación:

- Preguntar a gente cualificada si el comportamiento del modelo es razonable (*Juicio de experto*)
- Solicitar a un lector que identifique que tan próximos están los datos simulados y los reales en un gráfico (*Pruebas Turing*)
- Desplegar gráficos de series temporales y espaciales, así como otro tipo de representaciones visuales que permitan la comparación entre el sistema y el modelo (*Técnicas de visualización*)
- Comparar contra los datos generados por otros modelos (*Comparación con otros modelos*)
- Comparar el sistema y el modelo a través de la ocurrencia, frecuencia y magnitud de eventos simulados y reales. Es decir, llevar a cabo una validación más bien cualitativa en la que el modelo es probado por su habilidad para reproducir las relaciones propias dentro de las variables del modelo y de su comportamiento dinámico más que por la apropiada reproducción de valores cuantitativos (*Validez de evento*)
- Dividir los datos históricos disponibles en dos partes: una dedicada a la construcción del modelo y otra reservada para su validación (*Validación histórica*)
- Determinar si el comportamiento del modelo es correcto y si aporta suficiente precisión a través del uso de trazadores (*Trazadores*)
- Estimar con mayor precisión los parámetros que causan cambios significativos en el comportamiento del modelo (*Análisis de sensibilidad*)

En el caso de que ninguno de los procedimientos anteriores permita llevar a cabo una validación satisfactoria, existen algunas otras opciones tales como:

- Recalibrar el modelo para mejorar el ajuste con los datos reales cambiando los valores de los parámetros
- Modificar el modelo estructural y conceptualmente revisando las asunciones y modificando las representaciones lógicas o matemáticas de los procesos
- Restringir la aplicación del modelo a un dominio más pequeño

Finalmente, cabe mencionar, que en términos de validación, una convención apropiada debe incluir no sólo cuan cercanos se encuentran los datos simulados y los reales, sino también que tan a menudo lo hacen. Una propuesta inicial para hacer válido un modelo, consiste en que los resultados de las variables más importantes del modelo se encuentren dentro de un intervalo de confianza del 95% el 75% del tiempo (Rykiel, 1996).

2.7. SISTEMAS DE INFORMACIÓN GEOGRÁFICA

Los Sistemas de Información Geográfica (SIG) son sistemas especializados en el manejo y análisis de información que representan la realidad geográfica. Sus funciones básicas pueden resumirse en: entradas de información, manipulación, análisis y salidas de datos (Santiago, 2005). Estos sistemas están siendo ampliamente aplicados a la gestión de recursos costeros puesto que proveen al gestor con una herramienta, cada vez mas sofisticada, capaz de realizar, por ejemplo, análisis de sensibilidad, modelado de hábitats y control de la contaminación (Ricketts, 1992).

Dentro de un SIG, la introducción de los datos puede llevarse a cabo por digitalización directa, a través de coordenadas almacenadas en ficheros digitales, e incluso, por teledetección. En cuanto a la manipulación de los datos, es posible, por ejemplo, transformar matemáticamente coordenadas, así como reformatear, importar o exportar datos. No obstante, cabe destacar que la funcionalidad más importante de estos sistemas es el componente de análisis. Dicho componente cuenta con funciones tales como: selección geográfica y de rutas óptimas, análisis de proximidad y superposición cartográfica. Esta última, a su vez, encierra las capacidades más poderosas, y usualmente, combina las anteriores además de añadir algunas otras, como por ejemplo, reclasificación o funciones por celda. La salida de datos consiste en una representación gráfica y cartográfica.

El desarrollo de estas funciones básicas, así como el aprovechamiento de la versatilidad de formatos admitidos por los SIG, han convertido a estos últimos en entornos apropiados para la integración de otras herramientas tales como los modelos hidrodinámicos y de calidad de agua. Asimismo, cabe considerar que, de acuerdo con la creciente disponibilidad de información, estos entornos representan, a su vez, una posibilidad para la diseminación e interpretación de dicha información.

A continuación se describen, brevemente, las principales capacidades y potencialidades de los SIG que justifican su candidatura para constituirse como el entorno base integrador de otras herramientas de modelado ampliamente utilizadas en la actualidad.

2.7.1. Capacidades y potencialidades de los SIG

Los SIGs han sido ampliamente adoptados para su utilización en combinación con modelos predictivos que proveen funciones tales como: el almacenaje y cálculo de los parámetros requeridos, la manipulación de la información y el procesado de los datos de salida. Esta adopción obedece a las capacidades que ofrecen dichos Sistemas en cuanto a los tipos de codificación de información que son capaces de manejar, a las capacidades de discretización y localización espacial, así como a las capacidades de interpolación, manejo, integración, organización y análisis de datos provenientes de distintas fuentes y en diferentes formatos, todo ello bajo un entorno común. Finalmente, cabe mencionar su utilidad como aplicación de entrada y salida de datos, ya que, proporciona una interfaz gráfica de usuario intuitiva y de fácil acceso.

Dentro de un SIG, los datos geográficos pueden codificarse como vectores (representación geográfica a través de puntos, líneas o polígonos) o como rásters cuya unidad fundamental es la celda o píxel, con lo cual, es posible definir toda una capa de información. Además, estos Sistemas permiten manejar datos tanto discretos como continuos. En este sentido, cabe mencionar que en la actualidad, la mayoría de los modelos requiere como entrada una malla de datos que le provea con la distribución espacial de cada parámetro de entrada, es decir, de una capa de información que contenga los datos (batimetría, mediciones hidrodinámicas, etc.) de la zona de estudio. Por tal motivo, la generación de mallas numéricas se está convirtiendo en una herramienta común en la solución numérica de ecuaciones diferenciales en regiones de formas arbitrarias.

Para llevar a cabo dichas soluciones, se requiere de cierta discretización del campo en una colección de puntos o en celdas. Por tal motivo, los SIG

representan una interesante alternativa para el desarrollo de esta labor. De acuerdo con Li (2007), la discretización espacial provee la base para el cómputo numérico y para el manejo de la información espacial en diferentes fases del modelado. Por ello, el control de la discretización espacial, además de resultar esencial para un amplio rango de modelos ambientales, puede garantizar la fiabilidad de las simulaciones, mejorar la calidad de los resultados de los modelos y reducir las incertidumbres en la toma de decisiones subsecuentes.

De acuerdo con Naoum et al. (2005), los SIG presentan una gran flexibilidad con respecto a la generación de mallas de celdas de distintas dimensiones, a las técnicas de interpolación y a la extensión espacial. De hecho, los SIG proveen una mayor precisión espacial, puesto que todos los elementos incluidos en el proyecto están georreferenciados, con lo cual, se eliminan los problemas de solapamiento o desplazamiento. Adicionalmente, los SIG se consideran como herramientas eficientes para especificar la localización tanto de elementos lineales (tales como las líneas de costa) como para elementos que requieren declarar la interrupción de la continuidad de la superficie.

Cabe mencionar que dentro de este contexto, la palabra "proyecto" hace referencia a una colección de vistas, tablas, scripts, planos y cuadros que se pueden transferir siempre y cuando se mantenga la ruta de los temas desplegados en él. Estos proyectos admiten información proveniente de distintos formatos tales como: formatos vectoriales (ESRI, CAD, DXF, DWG o DGN), formatos de malla (grid o lattices) y formatos de imagen (TIFF, JPEG, MrSID, BMP, etc. con o sin georreferenciación), lo cual, admite una gran variedad de combinaciones que permiten aprovechar al máximo la información disponible. Asimismo, cabe mencionar, la capacidad de integrar datos geocodificados en tablas de distintos formatos (ASCII, DBASE, ACCESS).

Por otro lado, cabe resaltar la capacidad de los SIG para organizar y analizar datos provenientes de distintas fuentes dentro de una plataforma común, con lo cual, se hace posible la presentación y análisis de los datos de control y muestreo a la par que los resultados generados por los modelos numéricos, por ejemplo. Al respecto, cabe enfatizar la capacidad de un SIG para organizar la información en capas relacionadas geográficamente, lo cual, permite llevar a cabo ciertas relaciones y tendencias operacionales con mayor facilidad comparadas con aquellas realizadas a partir de información organizada en formato tabular (Martin et al., 2004). Adicionalmente, los SIG superan las capacidades de las bases de datos tradicionales debido a su habilidad de almacenar no sólo selecciones lógicas basadas en los atributos de la información, sino también, selecciones gráficas basadas en la localización espacial y en la proximidad.

Las capacidades de los SIG han sido empleadas también para proveer un soporte espacial a los sistemas de decisión a través de los despliegues de salida de datos, de la gestión de información espacial y de las funciones propias de esta interfaz. Con respecto a este último punto, cabe destacar que, a pesar de sus considerables capacidades computacionales, la mayoría de los modelos de calidad de agua presentan un punto débil en términos de la interfaz con el usuario, por tal motivo, resulta sumamente beneficiosa la utilización de un SIG como la aplicación de entrada y salida de datos. Para establecer una interfaz gráfica de usuario (GUI por sus siglas en inglés), es necesario construir "puentes" a través de algún lenguaje de programación que permita la creación de una interfaz gráfica (Visual Basic, por ejemplo) para poder proveer a un usuario poco experimentado con una guía cuando acceda a la aplicación.

2.7.2. Integración de nuevas funcionalidades de análisis

El rápido crecimiento de las posibilidades computacionales, así como el desarrollo de una interfaz amigable para el procesamiento de la información espacial y gráfica, podría proveer herramientas nuevas y mejoradas para soportar la gestión y planeación de las zonas estuarinas. En estas zonas, el uso de modelos matemáticos para la simulación de los patrones de flujo y de los procesos biogeoquímicos es un método poderoso capaz de fortalecer, de forma significativa, las herramientas de soporte de toma de decisiones utilizadas para la gestión de los recursos hídricos al complementarlos con los componentes de análisis, visualización y edición presentes en un SIG.

En este sentido, si se pretende desarrollar un módulo para SIG capaz de leer ficheros hidrodinámicos que contengan la batimetría del dominio, es necesario, como primer paso, proyectar adecuadamente las coordenadas. Terminada esta labor, es necesario convertir esta información a un formato que el SIG pueda leer (generación de rasters) para proceder, posteriormente, a la edición de la información a fin de corregir errores y borrar los elementos innecesarios. Finalmente, tras esta manipulación de la información, es posible obtener elementos de información que pueden ser transformados y utilizados dentro del entorno SIG. Por tal motivo, la tendencia en el software relacionado con estos entornos se ha decantado por el desarrollo de módulos especializados de aplicación específica. Esta tendencia, es el reflejo de la maduración de los SIG como una industria y de la creciente demanda de los usuarios de obtener soluciones a la medida.

La integración de modelos numéricos en un SIG puede presentar distintos niveles de acoplamiento:

- Mínima: en el cual la única interacción consiste en importar y exportar datos a fin de intercambiar formatos.
- Parcial: en el cual existe un alto grado de interoperabilidad y de posibilidades para compartir formatos de datos.
- Total: donde los modelos numéricos están incorporados a las funcionalidades del SIG o viceversa.

No obstante, tanto la relación entre los modelos numéricos y el SIG, como el papel que desempeña este último en el proceso de modelado, quedan determinados en función del tipo de integración que se lleve a cabo entre ambas herramientas. La elección está entre el desarrollo de las herramientas necesarias dentro del SIG o el desarrollo/ensamblaje de tales herramientas como elementos externos al SIG (Li et al., 2000).

2.7.3. Antecedentes de integración de modelos numéricos en entornos SIG

Dentro de esta línea de trabajo existen algunos antecedentes en diversas vías de aplicación. Al parecer, la más explorada, hasta el momento, ha sido la integración de modelos numéricos dentro del SIG para el seguimiento, gestión y control de vertidos de hidrocarburos. Probablemente, esto sea consecuencia de la enorme alarma social que puede llegar a suscitar este tipo de vertidos o a las repercusiones negativas que generan en los ámbitos socio-económico y ambiental.

Al respecto, Li et al., (2000) han encontrado que la calidad de la información espacial tiene un efecto significativo en el modelado de derrames de hidrocarburos en zonas costeras. Concluyen que el uso de un SIG satisface los requerimientos de integración, análisis y visualización de toda la información espacial, no obstante, reconocen, asimismo, la necesidad de acoplar paquetería estadística adicional.

Algunos otros casos de aplicación se refieren, a la creación de un "ambiente hidrodinámico" que cuenta, por un lado, con un componente capaz de simular la hidrodinámica y la calidad del agua, y por otro lado, con un componente para analizar, visualizar y editar los resultados (Pinho et al., 2004).

En este sentido, se ha llevado a cabo, por ejemplo, la implementación de un modelo 3D dentro de un entorno SIG para realizar un completo estudio de la Bahía Suda en Creta, Grecia (Naoum et al. 2005). Este modelo tridimensional (IDOR3D) desarrollado en la Universidad McMaster es un

modelo hidrodinámico y de transporte de contaminantes capaz de reproducir la circulación horizontal inducida por el viento.

Continuando con esta misma línea de investigación, Francos et al. (2001) integraron el modelo SWAT a un SIG. Este modelo, continuo en el tiempo, cuenta con distribución espacial e incluye procesos hidrológicos, químicos y de sedimentos. Este modelo permite definir como se mueve el agua dentro de la unidad espacial seleccionada, es decir, a nivel de subcuenca, embalse, pantano o río.

Otro ejemplo, muy interesante, es el sistema integrado para la gestión de la calidad del agua en cuencas costeras de Yuan et al. (2007). Este sistema incluye un modelo que liga las cargas de contaminantes a los usos terrestres y un modelo para simular el flujo superficial así como los procesos químicos y biológicos existentes. El primero de ellos toma como plataforma un SIG, en concreto, ArcGIS, y tiene dos componentes fundamentales: una base de datos (construida en un formato de geodatabase que contiene información social, económica, batimétrica e hidrológica) y un modelo base que incluye series de funciones de transferencia que ligan las cargas contaminantes con las fuentes industriales, domésticas y agropecuarias. Por su parte, el modelo de calidad de agua, es un modelo numérico que resuelve las ecuaciones de gobierno que representan los procesos físicos, químicos y biológicos del medio.

Asimismo, Martin et al., (2004) exponen la idea de un Sistema de Información de Gestión de Vertidos (SMIS por sus siglas en inglés) acoplando Sistemas de Información Geográfica con modelos de calidad de agua y de dispersión atmosférica para generar información dirigida a los gestores de emergencias provocadas por vertidos de materiales peligrosos. El uso de estos SMIS puede conducir a la mejora y fortalecimiento de la rápida detección de los sitios receptores y del destino de los contaminantes, mejorando el tiempo de respuesta, así como las estrategias de mitigación frente a una descarga contaminante. Además, esta herramienta de análisis puede asistir la implementación y preparación de medidas correctoras.

Finalmente, cabe mencionar los trabajos precedentes llevados a cabo con respecto al desarrollo de una primera aproximación de una nueva herramienta llamada AQUALAB 2.0 basada en ArcGIS 9 (ArcMap 9.2) y modelos numéricos de calidad de agua desarrollados en FORTRAN (García et. al, 2007). Esta herramienta se describirá con mayor detalle en el Capítulo 4.

Tal y como puede observarse, existen ciertos antecedentes dentro de esta línea de trabajo. Cada uno de los ejemplos citados ha sido desarrollado con una finalidad concreta, no obstante, todos ellos comparten dos condiciones en términos del uso que hacen de un SIG: i) lo utilizan como un entorno

integrador de modelos hidrodinámicos y de calidad y, ii) lo establecen como una interfaz accesible para el usuario tanto para la introducción de datos como para la gestión de los resultados generados.

2.8. ANÁLISIS DEL ESTADO DEL CONOCIMIENTO

La evidente extensión comercial, así como el interés académico en el modelado de calidad de agua en las zonas estuarinas son el reflejo de la creciente importancia de la legislación concerniente a la protección ambiental y la necesidad de una gestión apropiada.

No obstante, a la luz de la revisión bibliográfica llevada a cabo, resulta innegable el hecho de que no existe un modelo universal válido para cualquier caso de estudio. Asimismo, tampoco existe un modelo capaz de simular todos y cada uno de los parámetros involucrados en el análisis de un fenómeno en particular, no sólo por su cuantía, sino porque muchos de ellos, además, obedecen a una representación matemática muy compleja o exigen tal cantidad de información como datos de partida que frecuentemente se recurre al uso de simplificaciones. Por tal motivo, la selección del modelo más apropiado habrá de fundamentarse, precisamente, en las condiciones y características del caso de estudio. Asimismo, la elección del esquema numérico de resolución es un factor decisivo puesto que de ello depende, hasta cierto punto, la calidad de los resultados y el esfuerzo computacional requerido.

A fin de contar con dos casos de estudio de distintas características geográficas e hidrodinámicas frente a una misma problemática relacionada con el vertido de sustancias tóxicas en zonas estuarinas se han seleccionado la Ría de Suances y la Ría de Huelva como áreas de estudio. Estos estuarios pueden ser considerados como zonas someras, por tal motivo, es posible asumir que el movimiento vertical en la columna de agua resulta despreciable y, durante los períodos en los que no existe estratificación, puede justificarse el uso de un **modelo bidimensional** integrado en vertical.

Por otro lado, tomando en cuenta que las ecuaciones básicas que sustentan a los **modelos hidrodinámicos** pueden ser consideradas como universales y que los modelos **H2D** y **H2DZ** comparten con muchos de los modelos analizados las aproximaciones utilizadas, puede concluirse que éstos resultan igualmente válidos para llevar a cabo los cálculos hidrodinámicos. No obstante, éstos presentan la ventaja de haber sido probados, calibrados y validados en las zonas de interés en numerosos estudios previos (CHN,

1999; CHN y GESHA, 1999; GESHA 1999b; Gómez et al., 2007; Sámano, 2007; Bárcena, 2009; CMA-Cantabria, 2009; García et al., 2010a; Gómez, 2010; IH Cantabria 2010a) proporcionando resultados satisfactorios. Por tal motivo, los modelos H2D y H2DZ han sido seleccionados como el motor para generar la información hidrodinámica que alimentará al modelo de transporte desarrollado. La descripción detallada de dichos modelos se presenta en el Capítulo 3.

Por su parte, con respecto a la resolución de la ecuación de transporte, el análisis de las diferentes alternativas comúnmente utilizadas ha puesto de manifiesto que una gran mayoría de los casos presentados en la literatura científica son resueltos a través de **modelos eulerianos** debido a la sencillez de su cálculo y a que éstos demandan menores recursos computacionales (Betty et al., 1996; Burton et al., 1995; Cappucci et al., 2004; Carafa et al., 2006; Cuello et al., 2006; Frick et al., 2007; Huang et al., 2008; Kurup et al., 2000; Lumborg y Pejrup, 2005; Pina, 2001; Ribbe et al., 2008; Shen y Wang, 2007; Thouvenin et al., 2007; Tsanis y Hurdowar-Castro, 2005; Vanderborght et al., 2007; Vuksanovic et al., 1996; Xu et al., 2008). Por tal motivo, dadas las características y la aplicación que se busca para el modelo desarrollado, se ha considerado oportuno trabajar con un modelo de este tipo para el estudio de las zonas estuarinas como principales receptoras de vertidos.

Por su parte, con base en la información analizada, se ha advertido la conveniencia de trabajar con un **esquema upwind** debido a su sencillez y eficacia (Gross et al., 1999; García et al., 2008; García et al., 2010a). Cabe subrayar que la difusión numérica que puede presentar este tipo de esquema no representa una fuente de error significativa comparada con el conjunto de incertidumbres derivadas de las suposiciones que deben hacerse para poder ejecutar el modelo desarrollado. Tales suposiciones son el resultado de la escasa información existente en esta área del conocimiento puesto que, en gran medida, únicamente pueden ser resueltas mediante estudios profundos y específicos que resultan aplicables a zonas geográficas muy concretas. De este modo, si se carece de la información que requiere el modelo, la utilización de parámetros pertenecientes a otros casos de estudio puede facilitar la obtención de resultados aproximados, sin embargo, el error derivado de ello será mucho mayor que el generado por el esquema numérico.

Adicionalmente, resulta imprescindible mantener siempre presente que es probable que mediante el uso de los modelos matemáticos disponibles para abordar un caso de estudio, el análisis de ciertos parámetros permanezca limitado. En tal caso, habrá que desarrollar la formulación matemática correspondiente, como un módulo de un modelo concreto o como un modelo independiente, para lograr una adecuada representación del

fenómeno bajo estudio. Asimismo, habrá de tomarse en consideración la información disponible para alimentar tal modelo.

Si bien los módulos o modelos que vayan surgiendo como consecuencia de este proceso no suelen dar lugar a un modelo de carácter general, son altamente enriquecedores en términos de la calidad de los resultados obtenidos. De hecho, dicha calidad depende, por igual, tanto de la eficiencia de las técnicas y modelos numéricos empleados, como del conocimiento, y de las verdaderas capacidades y limitaciones de las formulaciones introducidas por los modeladores.

En este contexto, partiendo de la base de que en el caso que nos atañe la problemática de estudio se centra en el análisis de vertidos en zonas estuarinas, se ha observado que resulta fundamental el estudio detallado de la materia en suspensión, así como de la evolución de las sustancias contaminantes asociadas a ella a fin de aumentar la precisión y calidad de los datos generados por los modelos numéricos disponibles. No obstante, en términos generales, los modelos numéricos tienden a simplificar esta variable debido a la complejidad que implica el modelizar todos los procesos que pueden estar vinculados a ésta (adsorción – desorción, erosión, sedimentación, etc.). Cabe mencionar que dicha variable puede asociarse, a su vez, tanto a la conductividad, como a la turbidez, con lo cual, a través del desarrollo de un modelo numérico más detallado, sería posible llevar a cabo mejoras en el modelado de estas propiedades o en el sentido inverso, utilizar las mediciones de turbidez y conductividad (frecuentemente determinadas en aguas estuarinas) para la calibración y validación de modelos numéricos.

Por otro lado, se ha observado la necesidad de complementar la utilidad de los modelos numéricos con una interfaz amigable para su uso. Para ello, los Sistemas de Información Geográfica se constituyen como un entorno ideal ya que poseen extraordinarias capacidades de visualización. Además, aunque a través de su propia paquetería no es posible llevar a cabo un modelado numérico, dichos sistemas permiten el acoplamiento de modelos capaces de ello. De este modo, es posible integrar bajo un único entorno las capacidades y potencialidades de ambas herramientas con una mayor precisión espacial, constituyéndose así, por un lado, como una fuente de información que podría reducir los tiempos de reacción frente a un vertido contaminante y, por otro lado, como una herramienta que permitiría sentar las bases de una mejor y más eficiente planeación de las estrategias de gestión correspondientes.

2.9. OBJETIVOS ESPECÍFICOS DE LA TESIS

De acuerdo con la revisión efectuada sobre el actual estado del conocimiento en este campo, se ha advertido que, a fin de lograr la consecución de los objetivos generales planteados para esta tesis, resulta imprescindible abordar los siguientes objetivos específicos:

- Desarrollar un modelo de calidad de agua euleriano bidimensional para el análisis de sustancias prioritarias y peligrosas teniendo en cuenta las interacciones que éstas presentan con la materia en suspensión y con el lecho bentónico a fin de poder llevar a cabo el estudio de vertidos industriales al medio estuarino considerando:
 - Efecto de la salinidad y temperatura
 - Situaciones de inundación – secado
 - Corrientes de viento y marea
 - La variación de la concentración de sólidos en suspensión en la columna de agua con respecto al tiempo
 - La variación de la concentración de sólidos en el sedimento reconociendo, por tanto, procesos de erosión – sedimentación
 - Al menos, la totalidad de las sustancias valoradas como prioritarias por la DMA sin depender de la introducción de las cinéticas de cada una de ellas por parte del usuario
 - La variación de la concentración total de la sustancia analizada con respecto al tiempo, reconociendo conjuntamente las fracciones disuelta y particulada, tanto en agua como en sedimentos
 - Los procesos de difusión de contaminantes entre el sedimento y la columna de agua que ocurren con el paso del tiempo
 - La concentración de la sustancia analizada retenida de forma permanente en el sedimento
 - Las actuales exigencias de la DMA en términos del establecimiento de la calidad química de las masas de agua así como el cálculo de las zonas de mezcla
- Validar el modelo desarrollado en escenarios teóricos
- Diseñar campañas de campo específicas orientadas a la obtención de la información requerida por los procesos de calibración y validación del modelo desarrollado
- Calibrar los parámetros propios del modelo desarrollado tales como las tensiones de erosión y sedimentación, entre otros, mediante el análisis de datos de campo en combinación con un análisis de sensibilidad capaz de reflejar el efecto de las distintas variables involucradas en las formulaciones programadas en el código numérico.
- Validar el modelo desarrollado utilizando los parámetros previamente calibrados sobre otro período de estudio

- Ejecutar casos de estudio reales que impliquen el análisis de la evolución y transporte de sustancias contaminantes en el medio estuarino aplicando el modelo previamente calibrado y validado
- Desarrollar los procedimientos metodológicos necesarios para la integración, visualización y análisis de los resultados obtenidos del modelo numérico en un entorno SIG.

Tras la consecución de estos objetivos específicos, la herramienta resultante será capaz de evaluar, para las aguas estuarinas, los riesgos ambientales derivados de las descargas industriales a través de la combinación de las capacidades de los Sistemas de Información Geográfica con las funcionalidades de análisis provenientes de las tecnologías de modelos numéricos y bases de datos, 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.

2.10. CONSIDERACIONES FINALES

Cabe comentar que la consideración de algunos factores tales como: las variaciones de pH, el cálculo del coeficiente de partición en función de la salinidad, el establecimiento de algunas constantes específicas propias de cada zona de estudio (floculación, consolidación), la consideración de dragados y transporte de arena o la inclusión de formulaciones relacionadas con los procesos de mineralización y bioconcentración permitiría una mayor precisión de los resultados obtenidos.

No obstante, tal y como se ha comentado, no es posible incluir en un único modelo la totalidad de parámetros que pueden estar relacionados con el transporte y destino de las sustancias contaminantes en aguas estuarinas, no solo por la complejidad y esfuerzo de cálculo que ello supondría, sino también porque cuanto mayor es el nivel de complejidad de un modelo, se requiere una mayor cantidad de información que resulta cada vez más específica y más escasa. Asimismo, la operatividad del modelo empieza a decrecer puesto que los tiempos de cálculo son cada vez mayores y el usuario debe tener un conocimiento mucho más profundo del modelo.

Por tal motivo, teniendo en cuenta que el objetivo general de esta tesis consiste en obtener una herramienta de gestión de vertidos que aporte respuestas técnicas tomando en consideración las exigencias legislativas de la normativa vigente, se han obviado estas últimas consideraciones durante el desarrollo del modelo, no obstante, se plantean como futuras líneas de investigación para escenarios concretos de estudio, en cuyo caso, la

influencia de los factores previamente mencionados resulte altamente significativa.

Finalmente, se ha advertido la oportunidad futura de dirigir los esfuerzos del modelo numérico desarrollado hacia un modelado operacional, a fin de combinar modelos y observaciones de campo de manera óptima.