

**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**

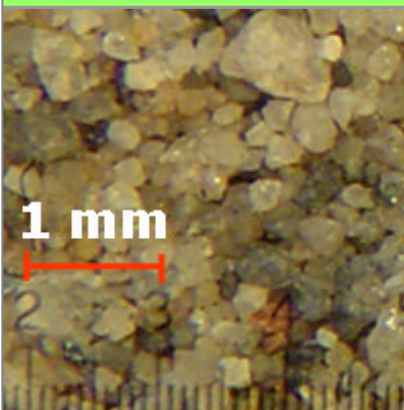
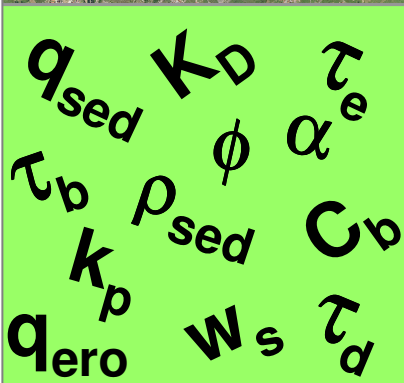
María Luisa Sámano Celorio

**DIRECTORES**

Andrés García Gómez

José Antonio Revilla Cortezón

Santander, 2011



### **3. RESOLUCIÓN NUMÉRICA Y VALIDACIÓN TEÓRICA DEL MODELO DESARROLLADO**

---

El modelo desarrollado se fundamenta en un modelo general de transporte que maneja datos batimétricos, así como datos de superficie libre y velocidad de las corrientes de marea y de viento. En su esquema general, gestiona, a su vez, información relativa a vertidos de sustancias prioritarias y peligrosas tomando en consideración el tiempo, caudal y concentración de vertido.

Partiendo de esta base, a continuación se describen las distintas etapas que dan lugar a su desarrollo haciendo especial hincapié en aquellas que se han introducido como parte de este trabajo de tesis para dar respuesta a algunas de las cuestiones que, de acuerdo con la literatura científica, a pesar de su relevancia e interés, han sido poco exploradas debido a la complejidad que implican.

Tal y como se ha comentado previamente, tales cuestiones actualmente encierran todavía un gran número de interrogantes en cuanto al modelado de contaminantes se refiere. Asimismo, se ha explicado ya la imposibilidad de abordarlas todas juntas mediante un único modelo universal. Por tal motivo, se ha optado por profundizar en el estudio de los sólidos en suspensión a fin de determinar con un mayor nivel de detalle el transporte y destino final de los contaminantes en el medio estuarino tomando en consideración la dependencia recíproca de ambos parámetros. Así pues, respondiendo a su esencia y finalidad, el modelo desarrollado se ha denominado: "SOLTOX".

Cabe mencionar que las aportaciones realizadas al código base, se han introducido, en su mayoría como subrutinas independientes, debido a que, tanto las modificaciones actuales como aquellas que podría llegar a experimentar en un futuro, se facilitan considerablemente mediante la adopción de esta estructura.

Por otro lado, en este capítulo se presenta la validación llevada a cabo para dicho modelo sobre escenarios teóricos. Para ello, se ha demostrado a través de la aplicación a casos con solución analítica, que tanto los procesos de transporte, como los de degradación de sustancias contaminantes, dentro de su dominio de aplicación, poseen un rango de precisión satisfactorio.

### 3.1. MODELOS HIDRODINÁMICOS

El **modelo hidrodinámico bidimensional H2D** (GIOC, 1990; García et al., 2010a), desarrollado por el Grupo de Ingeniería Oceanográfica y Costas de la Universidad de Cantabria, permite determinar las velocidades generadas por la acción de la marea astronómica.

Este modelo se deriva de las ecuaciones de Navier-Stokes que gobiernan el movimiento de un fluido y que, para el caso de fluido incompresible, son la ecuación de conservación de la cantidad de movimiento (3-1) y la ecuación de continuidad (3-2).

$$\rho \left[ \frac{D\vec{u}}{Dt} \right] = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \left[ \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \right] \quad (3-1)$$

donde:

$\rho$ : densidad del fluido

$\vec{u}$ : vector de velocidad (u, v, w)

$\nabla$ : gradiente

p: presión

g: aceleración de la gravedad

$\tau_{ij}$ : tensión tangencial en la dirección i sobre el plano j

D/Dt: derivada material

$\partial/\partial x$ : derivada parcial

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (3-2)$$

donde:

$\nabla$ : gradiente y  $\vec{u}$ : vector de velocidad (u, v, w).

La integración en vertical para ondas largas de las ecuaciones de cantidad de movimiento y continuidad conduce a las expresiones presentadas en la Tabla 3-1.

Ecuación	Expresión	Variables
Conservación de cantidad de movimiento integrada en vertical para ondas largas (Dirección x)	$\frac{\partial \bar{u}H}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}^2 H)}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{u}\bar{v}H)}{\partial y} - f\bar{v}H =$ $-gH \frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{gH^2}{2\rho_o} \cdot \frac{\partial \rho_o}{\partial x} + N_x \left[ \frac{\partial^2(\bar{u}H)}{\partial x^2} \right]$ $+ N_y \left[ \frac{\partial^2(\bar{u}H)}{\partial y^2} \right] + \frac{1}{\rho_o} [\tau_{xz}(\eta) - \tau_{xz}(-h)]$	$\bar{u}$ : velocidad promediada en vertical en la dirección x H: altura de agua (H = h + $\eta$ ) $\bar{v}$ : velocidad promediada en vertical en la dirección y f: parámetro de Coriolis $\Rightarrow f = 2 \Omega \text{ sen}\phi$ $\Omega$ : velocidad angular de la tierra ( $7.29 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ ) $\phi$ : latitud g = aceleración de la gravedad $\eta$ : elevación de la superficie libre sobre el nivel de referencia $\rho_o$ : densidad media $N_x$ : coeficiente horizontal de viscosidad de remolino $N_y$ : coeficiente horizontal de viscosidad de remolino $\tau_{xz}(\eta)$ : tensión tangencial en la superficie libre en la dirección x $\tau_{xz}(-h)$ : tensión tangencial en el fondo en la dirección x
Conservación de cantidad de movimiento integrada en vertical para ondas largas (Dirección y)	$\frac{\partial \bar{v}H}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}\bar{v}H)}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{v}^2 H)}{\partial y} + f\bar{u}H =$ $-gH \frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{gH^2}{2\rho_o} \cdot \frac{\partial \rho_o}{\partial y} + N_x \left[ \frac{\partial^2(\bar{v}H)}{\partial x^2} \right]$ $+ N_y \left[ \frac{\partial^2(\bar{v}H)}{\partial y^2} \right] + \frac{1}{\rho_o} [\tau_{yz}(\eta) - \tau_{yz}(-h)]$	$\bar{u}$ : velocidad promediada en vertical en la dirección x H: altura de agua (H = h + $\eta$ ) $\bar{v}$ : velocidad promediada en vertical en la dirección y f: parámetro de Coriolis $\Rightarrow f = 2 \Omega \text{ sen}\phi$ $\Omega$ : velocidad angular de la tierra ( $7.29 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ ) $\phi$ : latitud g = aceleración de la gravedad $\eta$ : elevación de la superficie libre sobre el nivel de referencia $\rho_o$ : densidad media $N_x$ : coeficiente horizontal de viscosidad de remolino $N_y$ : coeficiente horizontal de viscosidad de remolino $\tau_{yz}(\eta)$ : tensión tangencial en la superficie libre en la dirección y $\tau_{yz}(-h)$ : tensión tangencial en el fondo en la dirección y
Ecuación de continuidad integrada en vertical para ondas largas	$\frac{\partial \bar{u}H}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}H}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial t} = 0$	$\bar{u}$ : velocidad promediada en vertical en la dirección x $\bar{v}$ : velocidad promediada en vertical en la dirección y H: altura de agua (H = h + $\eta$ )
Ecuación de conservación promediada en vertical	$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} =$ $\frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial x} \left( HD_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{1}{H} \frac{\partial}{\partial y} \left( HD_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + P$	$\bar{c}$ : valor promediado de la temperatura o de la salinidad H: altura de agua (H = h + $\eta$ ) $D_x, D_y$ : coeficientes de dispersión horizontal P = fuentes o sumideros
Ecuación de estado	$\rho = \rho(T, S)$	Fórmula estándar de la UNESCO

**Tabla 3-1. Sistema de ecuaciones que componen el modelo H2D.**

Para resolver el sistema de ecuaciones descrito se emplea un método implícito de dirección alternada usado por Leendertse (1970). El método emplea un esquema centrado con dos niveles de tiempo, resultando tener una aproximación de segundo orden en espacio y tiempo.

Finalmente, a medida que se resuelve cada paso de tiempo durante la ejecución del modelo H2D, se van obteniendo los valores de la velocidad ( $u$ ,  $v$ ) y de la superficie libre en cada uno de los puntos de la malla. Seguido por el cálculo de la densidad, al resolver de forma explícita las ecuaciones de transporte de  $T$  y  $S$ . El resultado final consiste en el campo de velocidades, niveles y densidades para cada punto a lo largo del tiempo.

El modelo H2D ha sido calibrado y validado en numerosas aplicaciones proporcionando resultados satisfactorios sin incidir en la complejidad de un modelo tridimensional. De hecho, se ha observado que en su forma bidimensional se ajusta bastante bien a la solución analítica, siempre que la condición inicial y las condiciones de contorno estén bien establecidas (Castanedo, 2000).

Como ejemplos de su uso en estudios relacionados con aguas estuarinas cabe destacar (GESHA 1998; 1999; 1999a; 1999b; 2000; IH Cantabria, 2008; 2010a; 2010b):

- Los estudios del dimensionamiento medioambiental del saneamiento de la Bahía de Santander.
- El desarrollo de diversos aspectos técnicos relacionados con la construcción del emisario submarino del saneamiento integral de la Bahía de Santander.
- El análisis de la influencia de los vertidos de saneamiento de Santander en la calidad de las aguas litorales.
- El estudio de caracterización y valoración ambiental de las actuaciones previstas para la ampliación del Puerto de Santander en la Dársena Sur de Raos.
- La aplicación piloto de la ROM 5.1 "Calidad del agua litoral en áreas portuarias" a los Puertos de Tarragona, Huelva y Gijón.
- La aplicación de la ROM 5.1 "Calidad de las aguas litorales en áreas portuarias" al puerto de Santander.
- La revisión y ampliación de la metodología para los estudios de saneamiento litoral en el Mar Cantábrico y aplicación a las zonas de la Ría de Urdaibai (Vizcaya), las Marismas de Santoña (Cantabria) y el Sistema Fluvial Saja - Besaya (Cantabria).
- El estudio del impacto de tratamiento de aguas de Busturia Norte y Sukarrieta en la Ría o Estuario de Urdaibai.

Por su parte, aunque para los casos de estudio seleccionados se ha considerado como despreciable el efecto del viento debido a que en ambas

zonas los mayores agentes dispersivos se corresponden con las corrientes de marea (llenado y vaciado) y los caudales fluviales, a continuación se presenta la descripción de un modelo capaz de simular dicho efecto y que resulta compatible tanto con el modelo hidrodinámico H2D como con el modelo de transporte desarrollado en esta tesis.

De este modo, si el caso de interés requiriera considerar el efecto del viento para evaluar la evolución de una sustancia contaminante, el **modelo hidrodinámico cuasi-tridimensional H2DZ** (Álvarez, 1996), desarrollado por la Universidad de Cantabria, permitiría determinar las velocidades generadas por la acción de dicho agente dispersivo.

Las velocidades generadas por efecto del viento puede considerarse que constituyen un movimiento de trayectoria plana, cuyo campo de velocidad inducido debe ser variable en profundidad. Sólo en el caso de muy pequeñas profundidades 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.

Considerando las siguientes hipótesis, válidas, en general, para situaciones de flujo originadas por viento constante y permanente:

- Campo de velocidades estacionario
- Gradientes horizontales de las componentes de la velocidad despreciables
- Componente vertical de la velocidad despreciable
- Distribución hidrostática de presiones

las ecuaciones que describen estos fenómenos pueden expresarse con arreglo a las ecuaciones presentadas en la Tabla 3-2.

Expresión		Variables
Ecuación de cantidad de movimiento	$g \frac{\partial \eta}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$	g: gravedad η: nivel del agua ν: viscosidad de remolino u: velocidad promedio
Adoptando una distribución parabólica para la velocidad	$u(z) = \alpha z^2 + \beta z + \gamma$	u(z): velocidad en vertical α, β y γ: coeficientes que se determinan con las condiciones de contorno en la superficie y en el fondo z: altura

**Tabla 3-2. Ecuaciones implicadas en el modelo H2DZ.**

Las hipótesis anteriores hacen que el modelo se considere 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  $u$ ,  $v$  promediadas en vertical y la posterior obtención de la distribución de las componentes de velocidad puntual  $u$  y  $v$  en profundidad, mediante la aproximación parabólica mostrada en la Tabla 3-2.

Las diferentes constantes se calculan suponiendo las condiciones de no deslizamiento en el fondo ( $u, v = 0$ ) e igualando el valor de la tensión tangencial en superficie con la producida por el viento, que se supone proporcional al cuadrado de la velocidad. Las expresiones resultantes se recogen en la Tabla 3-3.

Expresión	Variables
Componente $u$ de velocidad en vertical $u(z) = \left[ \frac{3}{4}a - \frac{3}{2}u \right] \left[ \left( \frac{z}{h} \right)^2 - 1 \right] + \left( \frac{z}{h} + 1 \right)$	$u(z)$ : velocidad en vertical $a = \frac{\tau_{sx} H}{\rho \nu}$ $\tau_{sx}$ : componente x de la tensión tangencial debida al viento ( $\tau_s = cw^2$ ) $H$ : profundidad $\rho$ : densidad del agua $\nu$ : viscosidad del agua $u$ : velocidad promedio $z$ : altura $h$ : profundidad
Componente $v$ de velocidad en vertical $v(z) = \left[ \frac{3}{4}b - \frac{3}{2}v \right] \left[ \left( \frac{z}{h} \right)^2 - 1 \right] + \left( \frac{z}{h} + 1 \right)$	$v(z)$ : velocidad en vertical $b = \frac{\tau_{sy} H}{\rho \nu}$ $\tau_{sy}$ : componente y de la tensión tangencial debida al viento ( $\tau_s = cw^2$ ) $H$ : profundidad $\rho$ : densidad del agua $\nu$ : viscosidad del agua $v$ : velocidad promedio $z$ : altura $h$ : profundidad

Tabla 3-3. Ecuaciones que describen las componentes  $u$  y  $v$  promediadas en vertical.

## 3.2. MODELO DE TRANSPORTE

El modelo desarrollado se encuentra dividido en tres módulos principales que aunque comparten entre sí la mayoría de las subrutinas, permiten al usuario llevar a cabo el modelado independiente de la evolución de: i) sólidos en suspensión, ii) sustancias contaminantes (prioritarias y peligrosas) y iii) sustancias contaminantes (prioritarias y peligrosas) asociadas a los sólidos en suspensión.

Para ello, ha sido necesario asumir ciertas hipótesis generales tales como la no variación de la profundidad de la columna de agua a pesar de las variaciones que experimenta la capa activa del sedimento debido a los procesos de erosión y sedimentación. Asimismo, de acuerdo con Thomann y Mueller (1987) se ha considerado que la degradación debida a fotólisis, hidrólisis y biodegradación de la forma particulada es igual a cero. No obstante, para el tercer módulo ha sido preciso establecer algunas hipótesis específicas tal y como se comentará en el apartado 3.2.3.

La elección del módulo de cálculo dependerá de las condiciones particulares del estudio que quiera realizarse. A continuación se describe la composición y funcionamiento de cada uno de ellos.

### **3.2.1. Módulo de cálculo I: Sólidos en suspensión**

El módulo de sólidos en suspensión considera los principales factores implicados en la dinámica sedimentaria así como su interrelación con la columna de agua tomando en cuenta presiones externas tales como vertidos puntuales.

En principio, cabe diferenciar entre los sólidos en suspensión presentes a distintas profundidades de la columna de agua y aquellos que se encuentran mucho más cercanos al fondo, puesto que estos últimos, además de ostentar concentraciones más elevadas, experimentan más directamente los efectos de los procesos dirigidos desde el sedimento. Por otro lado, las características de los sólidos en suspensión (forma, diámetro y densidad, principalmente) así como las propiedades del medio (salinidad, temperatura, densidad y viscosidad) determinan la velocidad de sedimentación de partículas cohesivas y no cohesivas.

Para el desarrollo de este módulo se han planteado las ecuaciones generales de transporte en su forma bidimensional, debido a que si bien es cierto que un modelo tridimensional es capaz de generar resultados más precisos, también exige una mayor cantidad de datos, los cuales, con frecuencia, resultan muy escasos y suelen estar referidos a un entorno particular. Por tal motivo, requiere de la calibración de más parámetros que un modelo bidimensional.

Por otro lado, se ha considerado que el esfuerzo de cálculo que supondría la ejecución de un modelo tridimensional repercutiría en tiempos de cálculo mucho mayores y, puesto que el objetivo que se persigue consiste en la construcción de una herramienta que facilite al gestor la toma de decisiones, una mayor precisión resulta un elemento prescindible mientras



que el tiempo de cálculo puede ser decisivo en términos de la adopción de medidas de prevención y/o corrección de problemas de índole ambiental.

Cabe mencionar, asimismo, que la aplicación principal del modelo desarrollado se centra en aguas estuarinas, cuyos procesos, en términos generales, pueden ser descritos apropiadamente considerando únicamente dos dimensiones.

Por tal motivo, se ha programado una ecuación bidimensional de transporte de sólidos en suspensión (Ecuación 3-3) como ecuación principal de este módulo (Lumborg y Pejrup, 2005) tal y como se indica en la Figura 3-1.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \frac{1}{H} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left( HD_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{1}{H} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left( HD_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = \sum_{i=1}^n \frac{S_i}{H} \quad (3-3)$$

De este modo, es posible calcular la concentración de sólidos en suspensión ( $\phi$ ) tomando en consideración las componentes de velocidad ( $u$  y  $v$ ), la profundidad de la columna de agua ( $H$ ), los coeficientes de dispersión ( $D_x$ ,  $D_y$ ), así como las fuentes y sumideros de sólidos en suspensión ( $S_i$ ).

Las partículas sedimentadas, pasan entonces, a formar parte de la capa más superficial de sedimento denominada como "capa activa". Con base en las aproximaciones llevadas a cabo por Chen et al. (1996), en el modelo se ha establecido esta capa como una lámina de 5 cm que cubre todo el fondo de la zona de estudio. Dicha capa, de espesor variable, puede experimentar incrementos debidos a la sedimentación o decrementos como resultado de los procesos de erosión de acuerdo con la ecuación 3-4.

$$\frac{dH_{ca}}{dt} = - \frac{(dV_w \phi / dt)}{A \cdot C_b} \quad (3-4)$$

donde los procesos de intercambio de masa del sedimento en suspensión entre la columna de agua y el lecho pueden ser determinados de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\frac{dV_w \phi}{dt} = A \cdot (v_r C_b - w_s \phi) = A \cdot (q_{ero} - q_{sed}) \quad (3-5)$$

Así pues, las variaciones de espesor de la capa activa de sedimento ( $H_{ca}$ ) son el reflejo de la interacción de variables tales como: las concentraciones de sólidos en suspensión en la columna de agua ( $\phi$ ) y cercana al lecho ( $C_b$ ), el volumen de la columna de agua ( $V_w$ ), el área de intercambio entre el agua y el sedimento ( $A$ ), las velocidades y tasas de resuspensión ( $v_r$ ,  $q_{ero}$ ) y sedimentación ( $w_s$ ,  $q_{sed}$ ) (Figura 3-2).



La variedad de formulaciones matemáticas recopiladas para llevar a cabo el cálculo de las variables previamente mencionadas puede ser consultada en el apartado 2.5.1. Tal y como puede observarse en las tablas contenidas en dicho apartado, muchas de las variables involucradas en la resolución de las ecuaciones previamente presentadas, pueden ser calculadas a través de distintas formulaciones o, incluso, admitir un valor especificado por el usuario. Todas estas opciones han sido introducidas al código numérico, no obstante, la utilización de unas u otras depende de la decisión del usuario.

Así pues, en concreto, las Tablas 2-8 y 2-9 muestran, respectivamente, las diferentes formulaciones disponibles para el cálculo de los sumideros y fuentes de sólidos en suspensión. Por su parte, las Tablas 2-11 y 2-12 presentan, respectivamente, las formulaciones válidas para la evaluación de la velocidad de sedimentación de sedimento no cohesivo y de sedimento cohesivo, mientras que la Tabla 2-15 indica la formulación utilizada para realizar el cálculo de la concentración de sedimentos cercana al lecho. Finalmente, las ecuaciones que hacen posible la evaluación de las tensiones del lecho, de sedimentación y de erosión quedan recogidas en las Tablas 2-17, 2-19 y 2-21, respectivamente.

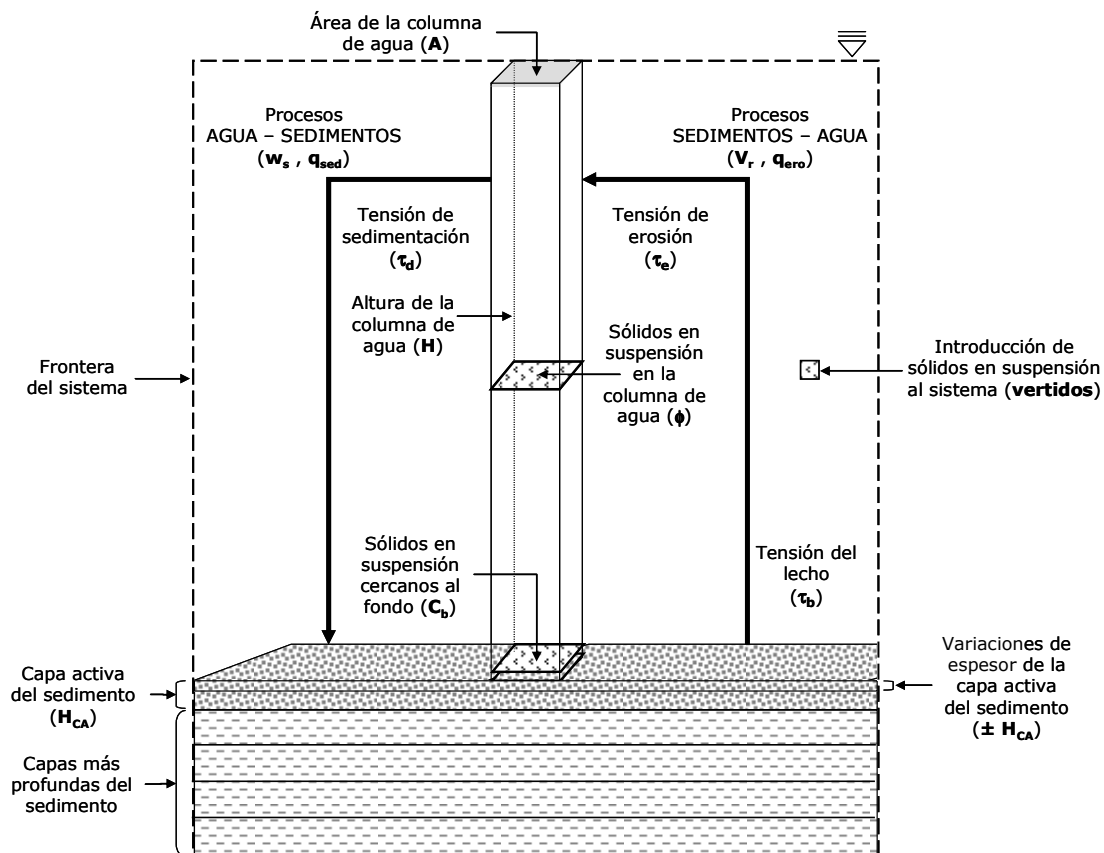


Figura 3-2. Funcionamiento del módulo de cálculo de la concentración de sólidos en suspensión.

### 3.2.2. Módulo de cálculo II: Sustancias contaminantes

Este módulo, fruto de la adaptación e implementación del trabajo de Gómez (2010) permite el análisis de sustancias consideradas como prioritarias o peligrosas independientemente de las características que presente la dinámica sedimentaria de la zona de estudio. Se ha considerado la utilidad de mantener la independencia de este módulo a fin de dotar con mayor versatilidad al modelo desarrollado; no obstante, a efectos de incrementar la precisión de los resultados obtenidos, sin duda, resulta mucho más apropiada la integración del cálculo de sólidos en suspensión y de las valoraciones realizadas con respecto a dichas sustancias contaminantes. Tal integración queda plasmada en el tercer y último módulo que se detallará en el siguiente apartado.

A continuación, se describe la información que se corresponde específicamente con el cálculo de la concentración de sustancias contaminantes.

Así pues, en este segundo módulo se reconoce, en primer lugar, una fracción disuelta ( $f_d$ ) y una fracción particulada ( $f_p$ ) del contaminante en la columna de agua. Dichas fracciones se calculan de acuerdo con las formulaciones recogidas en la Tabla 2-26. Para realizar este cálculo, el modelo asume que el proceso de adsorción es independiente de la concentración particulada y que ambas fracciones dependen del coeficiente de partición ( $K_D$ ) y de la concentración de sólidos en suspensión ( $\phi$ ). Cabe destacar que el coeficiente de partición de las sustancias orgánicas es proporcional a la concentración de carbono orgánico en los sólidos en suspensión. Por tal motivo, para su cálculo, se hace uso de la fracción de carbono orgánico ( $f_{OC}$ ) y del coeficiente de partición octanol-agua ( $K_{ow}$ ) de acuerdo con las formulaciones matemáticas presentadas en la Tabla 2-27.

Asimismo, este segundo módulo (Figura 3-3) engloba las ecuaciones generales que permiten modelar algunos de los procesos a los que se encuentran sometidas dichas sustancias tales como: sedimentación, volatilización, fotólisis, hidrólisis y biodegradación de acuerdo con las siguientes formulaciones:

$$\frac{dC_{T1}}{dt} = - \underbrace{\frac{k_l}{H} \cdot f_{d1} C_{T1}}_{\text{Volatilización}} - \underbrace{f_{d1} C_{T1} (k_p + k_H + k_{BT})}_{\text{Degradación}} - \underbrace{\frac{w_s}{H} \cdot f_{p1} C_{T1}}_{\text{Sedimentación}} \quad (3-6)$$

siendo:

$$k_l = \left[ \frac{1}{K_l} + \frac{1}{K_g \cdot He} \right]^{-1} \quad (3-7)$$

$$K_l = \left[ \left( D_{liqO_2} \cdot \frac{\sqrt{u^2 + v^2}}{H} \right)^{1/2} + \frac{1}{86400} (0.728 \cdot U_w^{1/2} - 0.317 \cdot U_w + 0.0372 \cdot U_w^2) \right] \cdot \left( \frac{M_{O_2}}{M_{TOX}} \right)^{1/4} \quad (3-8)$$

$$K_g = \frac{168}{86400} \cdot U_w \cdot \left( \frac{M_{H_2O}}{M_{TOX}} \right)^{1/4} \quad (3-9)$$

donde:

$C_{T1}$ : concentración total del tóxico en la columna de agua (mg/l);  
 $k_l$ : coeficiente conjunto del proceso de volatilización en ambas capas (m/s);  
 $H$ : profundidad (m);  $k_l/H$ : tasa de volatilización (1/s);  $f_{d1}$ : fracción disuelta del tóxico en el agua;  $k_p$ : tasa de degradación por fotólisis (1/s);  $k_H$ : tasa de degradación por hidrólisis (1/s);  $k_{BT}$ : tasa de biodegradación (1/s);  
 $w_s$ : velocidad de sedimentación (m/s);  $w_s/H$ : tasa de sedimentación (1/s);  
 $f_{p1}$ : fracción particulada del tóxico en el agua;  $K_l$ : coeficiente de intercambio de la capa líquida (m/s);  $K_g$ : coeficiente de intercambio de la capa gaseosa (m/s);  $He$ : constante adimensional de Henry ( $He'/RT$ );  
 $D_{liqO_2}$ : constante de difusión del oxígeno ( $2.095 \times 10^{-9} m^2/s$ );  
 $u, v$ : componentes de velocidad (m/s);  $U_w$ : velocidad del viento;  $M_{H_2O}$ : peso molecular del agua (18 g/mol);  $M_{TOX}$ : peso molecular del tóxico (g/mol);  
 $M_{O_2}$ : peso molecular del oxígeno disuelto (32 g/mol).

Por último, cabe mencionar que este módulo es capaz de modelar las 41 sustancias presentadas en la Tabla 3-4. A excepción del Cobre y el Zinc, que son consideradas como peligrosas (Ley 42/2007), las sustancias restantes están clasificadas como prioritarias (Directiva 2008/105/CE).

### 3. Resolución numérica y validación teórica del modelo desarrollado

No. CAS	Nombre	M (g/mol)	He (atm·m <sup>3</sup> /mol)	Gamma (l/kg)	K <sub>ow</sub> (l/kg)	k <sub>H</sub> (días <sup>-1</sup> )	k <sub>p</sub> (días <sup>-1</sup> )	k <sub>BT</sub> (días <sup>-1</sup> )
15972-60-8	Alacloro	269.77	1.99E-08	0.00E+00	2.27E+03	0.00E+00	2.90E-03	2.18E-03
120-12-7	Antraceno	178.23	5.20E-05	0.00E+00	3.08E+04	0.00E+00	5.65E-01	0.00E+00
1912-24-9	Atrazina	215.69	6.28E-06	0.00E+00	3.56E+02	2.53E-03	2.81E-03	9.36E-04
71-43-2	Benceno	78.11	5.22E-03	0.00E+00	1.33E+02	6.93E-07	9.52E-03	6.93E-02
32534-81-9	Pentabromodifenileter	564.70	2.20E-05	0.00E+00	4.42E+06	0.00E+00	5.50E-02	0.00E+00
32536-52-0	Octabromodifenileter	801.43	7.50E-08	0.00E+00	2.87E+07	0.00E+00	1.30E-02	0.00E+00
1163-19-5	Decabromodifenileter	959.19	2.83E-08	0.00E+00	1.86E+06	0.00E+00	1.47E-02	0.00E+00
7440-43-9	Cadmio	110.00	3.10E-02	5.01E+04	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
85535-84-8	C10-13-cloroalcanos	377.00	9.23E-05	0.00E+00	1.86E+06	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
470-90-6	Clorofeninfos	359.58	2.90E-08	0.00E+00	8.89E+03	3.83E-03	3.45E-02	0.00E+00
2921-88-2	Cloropirifos	350.74	5.54E-06	0.00E+00	6.74E+04	1.78E-02	9.26E-05	0.00E+00
107-06-2	1,2-Dicloroetano	98.96	1.15E-03	0.00E+00	3.05E+01	9.51E-08	0.00E+00	3.85E-03
75-09-2	Diclorometano	84.92	2.96E-03	0.00E+00	1.91E+01	7.96E-06	0.00E+00	0.00E+00
117-81-7	Di(2etilhexil)ftalato	390.58	2.70E-03	0.00E+00	4.07E+06	1.27E-06	3.47E-03	8.40E-03
330-54-1	Diuron	233.10	3.00E-10	0.00E+00	5.69E+02	0.00E+00	3.34E-02	0.00E+00
115-29-7	Alfa-endosulfan	406.93	2.65E-05	0.00E+00	6.19E+03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
206-44-0	Fluoranteno	202.26	1.24E-05	0.00E+00	1.01E+05	0.00E+00	1.76E-01	2.30E-03
118-74-1	Hexaclorobenceno	284.79	9.08E-04	0.00E+00	1.18E+05	0.00E+00	1.68E-03	2.69E-04
87-68-3	Hexaclorobutadieno	260.78	1.15E-02	0.00E+00	4.84E+04	0.00E+00	0.00E+00	5.30E-03
58-89-9	Lindano	290.83	4.78E-06	0.00E+00	5.32E+03	2.28E-03	0.00E+00	3.32E-03
34123-59-6	Isoproturon	206.28	1.44E-10	0.00E+00	4.11E+02	4.44E-04	8.32E-01	0.00E+00
7439-92-1	Plomo	210.00	2.50E-02	3.98E+05	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
7439-97-6	Mercurio	200.00	5.50E-03	2.00E+05	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
91-20-3	Naftaleno	128.17	4.60E-04	0.00E+00	2.46E+03	0.00E+00	1.16E-01	1.89E-02
7440-02-0	Niquel	59.00	2.50E-02	3.98E+04	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
84852-15-3	4-Nonilfenol	220.34	2.01E-02	0.00E+00	2.92E+04	4.62E-03	0.00E+00	0.00E+00
140-66-9	Para-ter-octilfenol	206.35	6.90E-06	0.00E+00	1.93E+05	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
608-93-5	Pentaclorobenceno	250.34	7.10E-04	0.00E+00	1.33E+05	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
87-86-5	Pentaclorofenol	266.34	1.43E-06	0.00E+00	1.09E+04	0.00E+00	2.13E-01	1.44E-02
50-32-8	Benzo(a)pireno	252.32	7.07E-07	0.00E+00	1.02E+06	0.00E+00	2.45E+00	1.31E-03
205-99-2	Benzo(b)fluoranteno	252.32	5.00E-07	0.00E+00	2.83E+06	0.00E+00	1.85E+00	0.00E+00
191-24-2	Benzo(g,h,i)perileno	276.34	2.03E-07	0.00E+00	4.42E+06	0.00E+00	8.89E-01	1.07E-03
207-08-9	Benzo(k)fluoroanteno	252.32	7.07E-07	0.00E+00	2.84E+06	0.00E+00	3.30E-02	3.30E-04
193-39-5	Indeno(1,2,3-cd)pireno	276.34	9.74E-07	0.00E+00	3.69E+06	0.00E+00	2.77E-03	9.49E-04
122-34-9	Simazina	201.66	6.82E-10	0.00E+00	1.84E+02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
36643-28-4	Tributiltin	291.09	1.50E+00	0.00E+00	5.47E+03	0.00E+00	0.00E+00	1.16E-02
120-82-1	1,2,4-Triclorobenceno	181.45	1.67E-03	0.00E+00	1.14E+04	7.59E-05	8.38E-06	5.15E-03
67-66-3	Triclorometano	119.44	3.49E-02	0.00E+00	9.50E+01	7.02E-07	1.47E-05	3.85E-03
1582-09-8	Trifuralina	335.28	8.26E-05	0.00E+00	2.15E+05	1.90E-03	4.54E+01	0.00E+00
7440-50-8	Cobre	63.55	2.50E-02	5.01E+04	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
7440-66-6	Zinc	65.36	2.50E-02	1.26E+05	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

**M:** peso molecular, **He:** constante de Henry, **Gamma:** coeficiente de partición de metales, **k<sub>ow</sub>:** coeficiente de reparto octanol-agua de las sustancias orgánicas, **k<sub>H</sub>:** constante de velocidad de la reacción de hidrólisis, **k<sub>p</sub>:** constante de velocidad de la reacción de fotólisis, **k<sub>BT</sub>:** constante de velocidad de la reacción de biodegradación.

**Tabla 3-4. Coeficientes y constantes correspondientes a las sustancias que pueden ser analizadas (Bárcena, 2009; Gómez, 2010).**

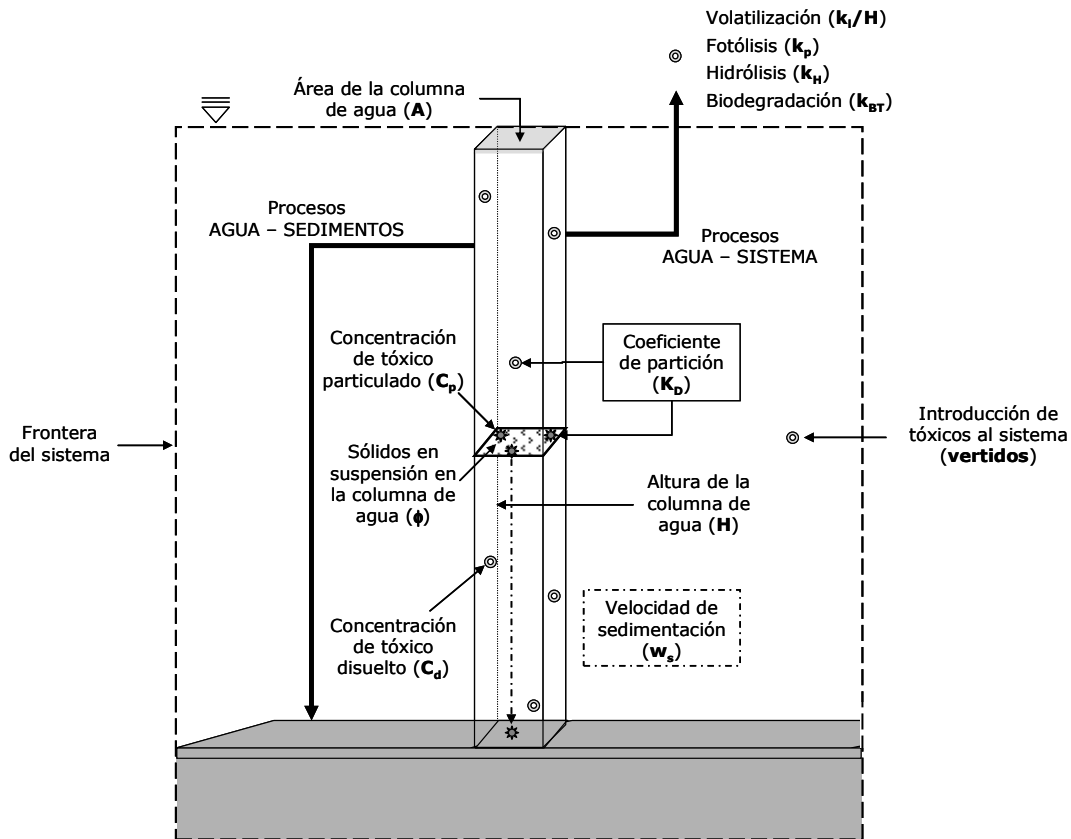


Figura 3-3. Funcionamiento del módulo de cálculo de la concentración de sustancias contaminantes.

### 3.2.3. Módulo de cálculo III: Sustancias contaminantes asociadas a los sólidos en suspensión

Finalmente, este tercer módulo se constituye como fruto del acoplamiento del módulo generado para el cálculo de sólidos en suspensión junto con la adaptación e implementación del módulo de sustancias contaminantes. De tal forma que considera las pérdidas de un compuesto tóxico asociadas a la dinámica sedimentaria en su conjunto, es decir, no se limita a calcular las pérdidas del compuesto tóxico en función de una tasa constante de sedimentación asociada a la velocidad de sedimentación de las partículas presentes en el medio. Además, dicha adaptación, considera dos factores fundamentales: por un lado, la velocidad de difusión de las sustancias contaminantes entre el lecho y la columna de agua y, por otro lado, su pérdida definitiva cuando dichas sustancias se depositan en capas más profundas del sedimento. De este modo, el sedimento no actúa únicamente como un sumidero de las sustancias contaminantes provenientes de la columna de agua (tal y como ocurre en el módulo anterior), sino que se logra el establecimiento de la interacción entre ambos medios con respecto

al transporte y destino de las sustancias contaminantes tanto en la fase disuelta como en la particulada (Figura 3-4).

Cabe mencionar que, al igual que en el caso del primer módulo, la selección de un modelo bidimensional resulta suficientemente apropiada para los casos de estudio seleccionados. La construcción de este módulo ha exigido la asunción adicional de ciertas hipótesis específicas tales como:

- Considerar como única fuente externa de contaminantes a los vertidos puntuales, despreciando los aportes de contaminantes provenientes de la atmósfera.
- Considerar la degradación por fotólisis en el lecho como nula.
- Considerar que las tasas de degradación por hidrólisis son aproximadamente iguales en el lecho y en la columna de agua.
- Considerar que las tasas de biodegradación son aproximadamente iguales en el lecho y en la columna de agua.
- Considerar una concentración uniforme del tóxico en el fondo para todo el dominio de cálculo.

En la columna de agua:

$$\frac{dC_{T1}}{dt} = \frac{\overbrace{(f_{d2}C_{T2} - f_{d1}C_{T1} \cdot \delta) \cdot 69.35 \cdot M^{\frac{2}{3}}}}{\text{Difusión}}}{H \cdot 31536000} - \overbrace{f_{d1}C_{T1}(k_P + k_H + k_{BT})}}{\text{Degradación}} - \underbrace{\frac{k_l}{H} \cdot f_{d1}C_{T1}}_{\text{Volatilización}} - \underbrace{\frac{(q_{sed}/\phi)f_{p1}C_{T1}}{H}}_{\text{Sedimentación}} + \underbrace{\frac{(q_{ero}/C_b)f_{p2}C_{T2}}{H}}_{\text{Erosión}} \quad (3-10)$$

En el lecho:

$$\frac{dC_{T2}}{dt} = \frac{\overbrace{(f_{d1}C_{T1} \cdot \delta - f_{d2}C_{T2}) \cdot 69.35 \cdot M^{\frac{2}{3}}}}{\text{Difusión}}}{H \cdot 31536000} - \overbrace{f_{d2}C_{T2}(k_H + k_{BT})}}{\text{Degradación}} + \underbrace{\frac{(q_{sed}/\phi)f_{p1}C_{T1}}{H}}_{\text{Sedimentación}} - \underbrace{\frac{(q_{ero}/C_b)f_{p2}C_{T2}}{H}}_{\text{Erosión}} - \underbrace{\frac{(q_{sed} - q_{ero})f_{p2}C_{T2}}{\rho_{global}(1-\delta)H}}_{\text{Pérdida Definitiva}} \quad (3-11)$$

donde:

$C_{T1}$ : concentración total del tóxico en la columna de agua (mg/l);  
 $f_{d1}$ : fracción disuelta en el agua;  $C_{T2}$ : concentración total del tóxico en el lecho (mg/l);  $f_{d2}$ : fracción disuelta en el lecho;  $\delta$ : porosidad (para las capas



superiores del sedimento: 0.7-0.8 (Thomman y Mueller, 1987) ó 0.75-0.95 (Chapra, 1997)); M: peso molecular; H: profundidad (m);  $k_p$ : tasa de degradación por fotólisis (1/s);  $k_H$ : tasa de degradación por hidrólisis (1/s);  $k_{BT}$ : tasa de biodegradación (1/s);  $k_i$ : coeficiente conjunto del proceso de volatilización en ambas capas (m/s); H: profundidad (m);  $k_i/H$ : tasa de volatilización (1/s);  $f_{p1}$ : fracción particulada en el agua;  $f_{p2}$ : fracción particulada en el lecho;  $q_{sed}$ : tasa de sedimentación ( $kg/m^2s$ );  $q_{ero}$ : tasa de erosión ( $kg/m^2s$ );  $\phi$ : concentración de sólidos en suspensión ( $kg/m^3$ );  $C_b$ : concentración de sólidos en suspensión cercana al fondo ( $kg/m^3$ );  $\rho_{global}$ : densidad global expresada como masa de sedimento seco/volumen de sedimento húmedo ( $kg/m^3$ ).

Tal y como puede observarse en las ecuaciones 3-10 y 3-11, a diferencia del módulo anterior, en este último, el proceso de sedimentación que experimenta la fracción particulada no se considera como función de una constante de sedimentación sino que se evalúa en función de una tasa de sedimentación que depende, además de la propia velocidad de sedimentación, de la concentración de sólidos en suspensión, así como de las tensiones del lecho y de sedimentación. Asimismo y, a diferencia del módulo anterior, considera como fuentes de contaminantes, además de aquellos contenidos en fuentes externas al sistema (vertidos), los contaminantes que ingresan en la columna de agua debido a procesos difusivos desde el lecho y los provenientes de los sedimentos que se resuspenden debido a procesos de erosión. En contrapartida, considera también los efectos de los procesos difusivos que pudieran ocurrir desde la columna de agua hacia el sedimento. Finalmente, valora las capas más profundas del sedimento como un sumidero de contaminantes en el que se llevan a cabo procesos de pérdida definitiva por enterramiento o sufren los procesos de degradación propios del medio bentónico.

Las ecuaciones que expresan matemáticamente las tasas de sedimentación y erosión pueden ser consultadas en las Tablas 2-8 y 2-9. Por su parte, las Tablas 2-17, 2-19 y 2-21, recogen, respectivamente, distintas formulaciones para la evaluación de las tensiones del lecho, de sedimentación y de erosión. Finalmente, las ecuaciones que permiten llevar a cabo el cálculo de la concentración de sólidos cercana al lecho se presentan en la Tabla 2-15. Por último, comentar que aunque el modelo desarrollado ha obviado el proceso de consolidación debido a la carencia de los datos específicos que requiere la formulación matemática que representa este proceso, dicha formulación puede ser consultada en la Tabla 2-23.

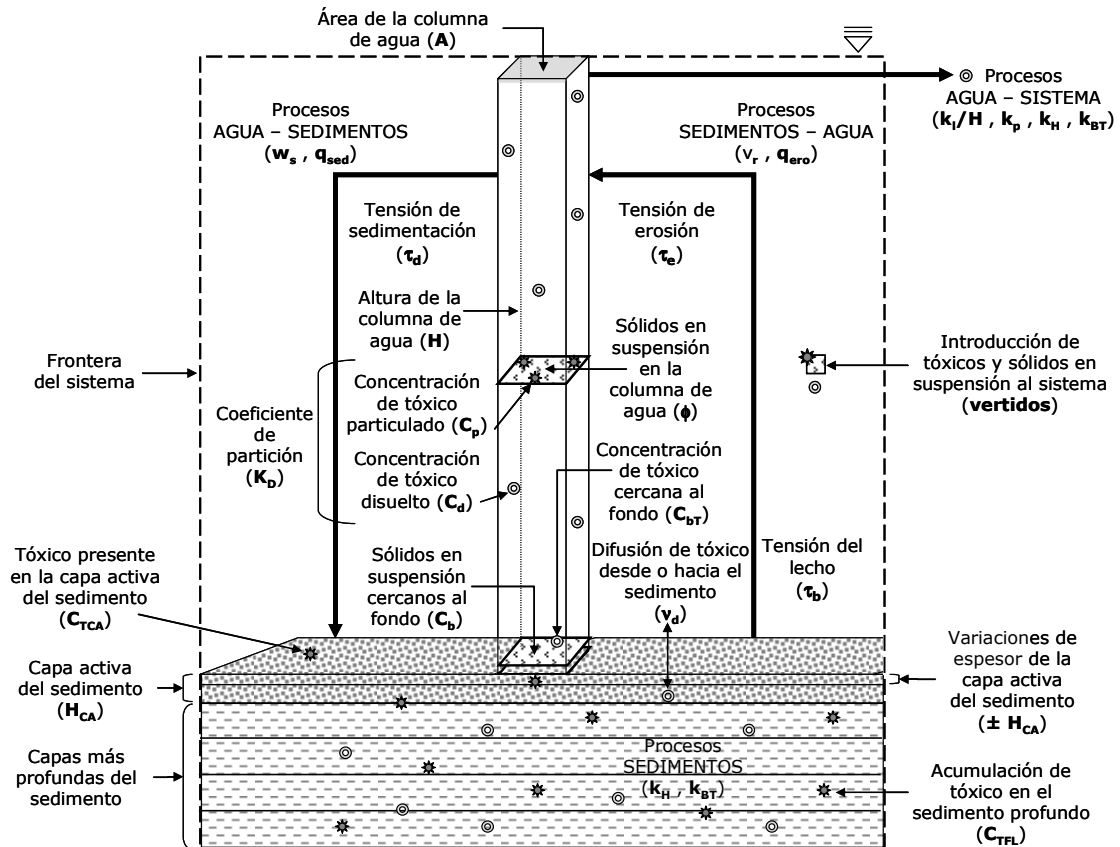


Figura 3-4. Funcionamiento del módulo de cálculo de la concentración de sustancias contaminantes asociadas a los sólidos en suspensión.

### 3.3. RESOLUCIÓN NUMÉRICA

La integración numérica de la ecuación de advección-difusión se realiza utilizando la técnica de "splitting", que permite contabilizar los diferentes procesos de transporte (advección, difusión, reacción) por separado. El principio básico de este método consiste en dividir la ecuación de advección-difusión en varias subecuaciones más pequeñas y sencillas. De este modo, es posible seleccionar el esquema numérico más apropiado para la resolución de cada una de ellas. Por su parte, cabe mencionar que la discretización numérica de las ecuaciones se lleva a cabo empleando la técnica de las diferencias finitas.

Así pues, para la resolución del término advectivo se emplea el **esquema upwind** que es el método más sencillo de diferencias finitas que, siendo estable, está libre de oscilación numérica. No obstante, cabe considerar también que su principal desventaja radica en la importante difusión numérica derivada de los errores de truncamiento. Esta difusión numérica depende, principalmente, del número de Courant y, es por ello, que la

estabilidad del esquema queda basada en dicho número (Gross et al., 1999a).

Por otro lado, la resolución del proceso de difusión se aborda mediante la utilización de un **esquema explícito centrado**. Cabe comentar que el empleo del esquema numérico upwind para el cálculo del transporte advectivo conlleva realmente la resolución de una ecuación de advección-difusión en la que el valor del coeficiente de difusión depende de las características de la simulación y de la velocidad de la corriente. Ello implica que en la resolución de la ecuación de advección-difusión empleando el método numérico previamente mencionado, el valor del coeficiente de difusión que se está resolviendo realmente queda establecido por la suma aritmética del valor introducido para el modelado y de la difusión numérica asociada a dicho esquema.

Considerando que se pretende lograr la resolución numérica de la Ecuación (3-12), la aplicación de las técnicas de split direccional (García, 2004) conduce a la obtención de las 5 subecuaciones que se presentan a continuación:

$$\frac{\partial HC}{\partial t} + \frac{\partial uHC}{\partial x} + \frac{\partial vHC}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( HD_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( HD_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + F \quad (3-12)$$

$$\frac{\partial HC}{\partial t} = - \frac{\partial uHC}{\partial x} \quad (3-13)$$

$$\frac{\partial HC}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( HD_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (3-14)$$

$$\frac{\partial HC}{\partial t} = - \frac{\partial vHC}{\partial y} \quad (3-15)$$

$$\frac{\partial HC}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial y} \left( HD_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \quad (3-16)$$

$$\frac{\partial HC}{\partial t} = F \quad (3-17)$$

Así pues, es posible determinar los valores de concentración en las caras de celda interpolando los valores de concentración definidos en el centro de las celdas contiguas a las caras de flujo (Figura 3-5).

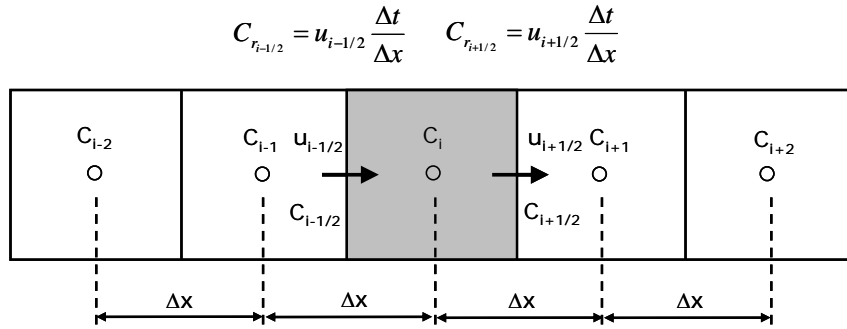


Figura 3-5. Esquema de celdas empleado para la discretización espacial.

En el esquema upwind, el valor de la concentración en el nodo situado hacia aguas arriba prevalece para la aproximación del valor en la cara de celda. Así, para el caso de velocidad positiva en la dirección  $x$ , la expresión de la concentración en la cara de celda viene dada por:

$$C_{i+1/2}^n = C_i^n \quad (3-18)$$

De este modo, las ecuaciones que representan el fenómeno advectivo en las direcciones  $x$  e  $y$  adquieren la siguiente forma:

$$\frac{1}{5} \frac{H_{i,j}^{n+1/5} C_{i,j}^{n+1/5} - H_{i,j}^n C_{i,j}^n}{\Delta t/5} = - \frac{u_{i+1/2,j}^n H_{i+1/2,j}^n C_{i+1/2,j}^n - u_{i-1/2,j}^n H_{i-1/2,j}^n C_{i-1/2,j}^n}{\Delta x} \quad (3-19)$$

$$\frac{1}{5} \frac{H_{i,j}^{n+3/5} C_{i,j}^{n+3/5} - H_{i,j}^{n+2/5} C_{i,j}^{n+2/5}}{\Delta t/5} = - \frac{v_{i,j+1/2}^{n+2/5} H_{i,j+1/2}^{n+2/5} C_{i,j+1/2}^{n+2/5} - v_{i,j-1/2}^{n+2/5} H_{i,j-1/2}^{n+2/5} C_{i,j-1/2}^{n+2/5}}{\Delta y} \quad (3-20)$$

mientras que las ecuaciones de difusión para los ejes  $x$  e  $y$  se expresan como:

$$\frac{1}{5} \frac{H_{i,j}^{n+2/5} C_{i,j}^{n+2/5} - H_{i,j}^{n+1/5} C_{i,j}^{n+1/5}}{\Delta t/5} = \frac{(HD_x)_{i+1/2,j}^{n+1/5} (C_{i+1,j}^{n+1/5} - C_{i,j}^{n+1/5}) - (HD_x)_{i-1/2,j}^{n+1/5} (C_{i,j}^{n+1/5} - C_{i-1,j}^{n+1/5})}{\Delta x^2} \quad (3-21)$$

$$\frac{1}{5} \frac{H_{i,j}^{n+4/5} C_{i,j}^{n+4/5} - H_{i,j}^{n+3/5} C_{i,j}^{n+3/5}}{\Delta t/5} = \frac{(HD_y)_{i,j+1/2}^{n+3/5} (C_{i,j+1}^{n+3/5} - C_{i,j}^{n+3/5}) - (HD_y)_{i,j-1/2}^{n+3/5} (C_{i,j}^{n+3/5} - C_{i,j-1}^{n+3/5})}{\Delta y^2} \quad (3-22)$$

Finalmente, para resolver la parte correspondiente a las variaciones de concentración de la sustancia objeto de estudio (ecuación 3-17) es posible utilizar los métodos numéricos de Euler o de Runge-Kutta de cuarto orden.

El **método de Runge-Kutta de orden 4º** permite obtener el valor de la concentración en cada instante de tiempo a partir de la evaluación de la ecuación diferencial de reacción en cuatro puntos (Figura 3-6). No obstante, la ganancia en la precisión conlleva un incremento del tiempo de cálculo.

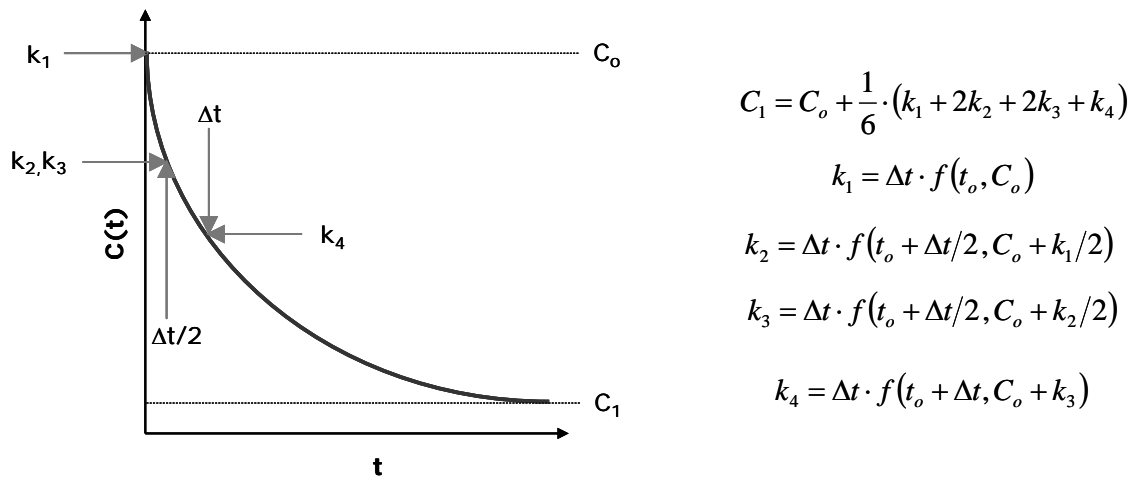


Figura 3-6. Esquema de resolución del método numérico de Runge-Kutta de cuarto orden.

Puede considerarse como una mejora al método de Euler al dividir el paso de tiempo ( $\Delta t$ ) en varios intervalos de igual longitud. Por tal motivo, con el objetivo de garantizar una mayor precisión de los resultados, aún a pesar de que el método de Euler es más rápido, se ha seleccionado el método de Runge-Kutta para su implementación dentro del modelo desarrollado puesto que el primero resulta, a la vez, menos preciso (Baldauf, 2008; García, 2004).

### 3.3.1. Condiciones de estabilidad del modelo

Tal y como se ha comentado, al truncar parte de la solución mediante la utilización de esquemas numéricos, aparecen ciertas inestabilidades numéricas asociadas al error que se comete. En este sentido, la condición de estabilidad que debe satisfacer el esquema upwind durante la resolución de la ecuación de advección viene dada por el **número de Courant**:

$$|C_r| \leq 1 \quad (3-23)$$

es decir, se debe garantizar que en un paso de tiempo de cálculo, la distancia recorrida por el frente de concentración no supere la dimensión de la discretización espacial adoptada para la representación del dominio de cálculo:

$$\Delta t \leq \frac{1}{\left( \frac{u_i}{\Delta x_i} \right)} \quad (3-24)$$

Por su parte, con respecto a la resolución de la ecuación de difusión, la estabilidad del método se relaciona con el **número de Peclet** ( $u \cdot \Delta x / D$ ), de acuerdo con la expresión:

$$\left( \frac{2D_{x_i}}{(\Delta x_i)^2} \right) \Delta t \leq 1 \quad (3-25)$$

### 3.3.2. Condiciones de contorno

La adecuada resolución de las ecuaciones que permiten evaluar el transporte de una determinada sustancia dentro del dominio de cálculo precisa de la especificación de las condiciones en las fronteras del mismo.

En el caso de la dimensión horizontal, es usual emplear en las fronteras abiertas del dominio, como condiciones para flujo másico entrante, los datos obtenidos con base en medidas de campo. Por su parte, para condiciones de flujo saliente, suele recurrirse a la utilización de una ecuación de conservación simplificada, en la que sólo se considera el efecto de la advección utilizando el esquema upwind (García, 2004). En este caso, el esquema de resolución coincidirá con el utilizado para la resolución del transporte en las celdas interiores del dominio.

Dicha condición de contorno se expresa, por ejemplo en la dirección  $x$ , para el flujo entrante ( $u < 0$ ) y para el flujo saliente ( $u > 0$ ) mediante las ecuaciones 3-26 y 3-27, respectivamente.

$$C = C_{cont} \quad (3-26)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = 0 \quad (3-27)$$

donde:

$C_{cont}$  representa la concentración de la sustancia  $C$  en el contorno.

Asimismo, de acuerdo con Koutitas (1988) las condiciones de contorno que completan al modelo pueden presentar la siguiente forma:

- En los contornos sólidos, el flujo normal debe ser nulo y se expresa como:  $\frac{\partial C}{\partial n} = 0$

- En los contornos de libre transmisión, tales como los contornos de mar abierto o cualquier reservorio que permita la entrada de masa sin que ésta pueda volver a salir, se aplica una condición simple de flujo uniforme:  $\frac{\partial}{\partial n} \left( D \frac{\partial C}{\partial n} \right) = 0$  o  $\frac{\partial^2 C}{\partial n^2} = 0$  para  $D \cong \text{constante}$ .
- Para las fuentes de contaminantes, puesto que la concentración es una variable conocida, ésta queda preestablecida.

## 3.4. ESQUEMA DE FUNCIONAMIENTO

---

### 3.4.1. Datos de alimentación (Inputs)

Previo al uso del modelo SOLTOX, resulta condición imprescindible la obtención de corrientes de marea (modelo H2D) y, si ha lugar, de viento (modelo H2DZ). Esto, a su vez, implica que se cuenta con la malla que recoge la información batimétrica y con los ficheros que permiten la ejecución de sendos modelos hidrodinámicos (\*.BND, \*.ENV, \*.OUT, \*.PHY y \*.RUN)

Por otro lado, si se considera que el efecto del viento puede ser significativo en la zona de estudio, debe contarse también con la información del régimen de viento medio anual. Además, es preciso construir los ficheros que contienen la información específica de cada caso de estudio y de cada vertido. Asimismo, debe incluirse el fichero "datos\_sustancias.PRN" que contiene la información de las 41 sustancias que pueden ser estudiadas mediante este modelo.

Finalmente, de forma opcional, pueden introducirse las condiciones inicial y de contorno a partir de una malla de concentraciones de sólidos en suspensión. En dicho caso, sería necesario, también, el fichero "solidos.txt".

En concreto, la ejecución del modelo SOLTOX requiere de los siguientes ficheros:

- Información batimétrica (\*.AGD)
- Corrientes de marea (\*SUP.\*\*\* y \*VEL.\*\*\*)
- Si ha lugar, régimen de viento medio anual (Cas8760.WND) y corrientes de viento (\*VEL.001)
- Caracterización de cada vertido (\*.TXT)
- Mapa de distribución de concentraciones de sólidos en suspensión (solidos.TXT) si es que no se introduce dicha variable por contorno

- Información relativa a las sustancias contaminantes: peso molecular, constante de Henry, coeficientes de partición y constantes de degradación (datos\_sustancias.PRN)
- Definición del caso de estudio (\*.INP)
- Rutas de configuración del ejecutable (Config.CFG y Rundata.FIL)
- Ejecutable (SOLTOX.EXE)

Especial mención requiere el fichero que recoge la información específica del caso que se va a modelar (\*.INP) puesto que es aquí donde el usuario encuentra la oportunidad de asignar la totalidad de las decisiones que habrá de tomar el modelo durante su ejecución a fin de obtener los resultados deseados. Cabe destacar, por ejemplo, la asignación de: tiempo total de simulación, paso de tiempo, datos de contorno (tanto para los sólidos en suspensión como para la sustancia tóxica que vaya a modelarse), número y caracterización de vertidos (haciendo una llamada a los ficheros \*.TXT de vertido correspondientes), temperatura, salinidad, propiedades de los sólidos en suspensión (diámetro, densidad, etc.), propiedades del lecho (densidades, coeficientes de fricción, etc.), fecha y hora de simulación así como condiciones de grabación de resultados, entre otros.

No obstante, la aportación más significativa realizada al código numérico se corresponde con la introducción de una gran variedad de formulaciones matemáticas que permiten llevar a cabo los cálculos relativos al transporte y evolución tanto de sustancias contaminantes como de la materia en suspensión considerando las interacciones entre ambas variables tanto en agua como en sedimentos. De cara al usuario, todo ello queda reflejado en el apartado que dentro del fichero \*.INP se denomina como "decisiones de usuario" y que permite la elección de:

- El **tipo de emisión** que se desea modelar. Es decir, el transporte de los sólidos en suspensión únicamente, el transporte de una sustancia tóxica considerando los procesos de degradación que sufre y, el transporte de una sustancia tóxica considerando, además de los procesos de degradación que sufre, los procesos que experimenta como resultado de su interacción con los sólidos en suspensión presentes en el medio.
- La formulación que se desea utilizar para llevar a cabo el cálculo de la **velocidad de sedimentación** ya sea en función del diámetro de la partícula, de la distribución granulométrica o considerando los procesos de floculación que pudieran presentarse. Cabe aclarar que esta última opción exige el conocimiento de constantes específicas de la zona de estudio.
- El **tipo de sustancia contaminante** que quiere analizar. Tal y como se ha comentado, SOLTOX.EXE cuenta con una base de datos que permite el modelado de 41 sustancias de forma no simultánea.



- La formulación utilizada para realizar los cálculos de las **tensiones de lecho, de erosión y sedimentación** así como de las **tasas de erosión y sedimentación** de acuerdo con las propuestas realizadas por diversos autores. Por su parte, atendiendo a la situación de que existan valores calibrados específicamente para la zona de estudio, este modelo admite, asimismo, la introducción directa de dichos valores de acuerdo con las decisiones del usuario.
- La forma de introducción de la variable de **sólidos en suspensión**, es decir, cargando la información a través de una malla de distribución de concentraciones o como condición de contorno.

Todas estas alternativas, si bien representan elementos clave en cuanto a flexibilidad y versatilidad del modelo se refiere, en algunos casos, pueden llegar a plantear ciertas dudas en el usuario, por tal motivo, a continuación se recoge, de forma sintética, una serie de consideraciones y recomendaciones que facilitan la labor de éste en la toma de decisiones.

#### **3.4.1.1. Velocidad de sedimentación**

El cálculo de esta variable a partir del diámetro de la partícula es la formulación más simple de las tres posibilidades que ofrece el modelo. Resulta apropiada cuando no se cuenta con mucha información, ya que, requiere únicamente de la introducción de dos parámetros: el diámetro medio y la densidad de la partícula. En general, para limos se considera una densidad de partícula de  $2650 \text{ kg/m}^3$  y un diámetro entre 10 y  $20 \mu\text{m}$ .

Asimismo, puede ser calculada a partir de la distribución granulométrica de los sedimentos. No obstante, esta formulación requiere, además de los parámetros previamente descritos, el conocimiento de la varianza que presenta el diámetro de las partículas. Resulta recomendable su uso si se dispone de la distribución granulométrica de los sedimentos puesto que aporta una mayor precisión al cálculo.

Finalmente, es posible considerar la influencia de los procesos de floculación en la velocidad de sedimentación, sin embargo, esta formulación, a pesar de representar una diferencia significativa en las predicciones de dispersión de un contaminante, resulta mucho más compleja que las dos anteriores y únicamente resulta recomendable su utilización cuando se conocen las constantes específicas ( $k$  y  $m$ ) correspondientes a la zona de estudio y cumple con las restricciones establecidas en cuanto a la concentración de sólidos en suspensión presentes en el medio se refiere (ver Tablas 2-12 y 2-14).

### **3.4.1.2. Tensiones del lecho, de erosión y de sedimentación**

Las dos formulaciones introducidas en el modelo desarrollado para llevar a cabo el cálculo de la tensión del lecho presentan el mismo nivel de complejidad y precisión. La diferencia fundamental estriba en la información de la que disponga el usuario. De este modo, la formulación de Cappucci et al. (2004) resulta apropiada si se cuenta con un coeficiente de arrastre debidamente calibrado para la zona de estudio, mientras que la formulación de Alvera et al. (2003) requiere de un valor adecuado para el coeficiente de fricción de Manning (generalmente, se utiliza un valor de 0.025 para lechos suaves).

Por su parte, en cuanto al cálculo de la tensión de erosión, las tres alternativas que ofrece el modelo presentan el inconveniente de ser formulaciones empíricas que dependen de constantes específicas en función del tipo de sedimento propio de cada zona de estudio. Durante la programación del código numérico, se han introducido los valores genéricos presentados en la Tabla 2-22 para dichas constantes. Cabe mencionar, que la utilización de la formulación de Huang et al. (2006) implica el conocimiento del valor de densidad del lecho húmedo, que una vez más, depende del tipo de sedimento de la zona de estudio, pero que en términos generales puede ser evaluado en torno a los  $1.89 \text{ g/cm}^3$  para un tipo de arena uniforme floja. Para otro tipo de sedimentos ver Tabla 2-22.

Finalmente, con respecto al cálculo de la tensión de sedimentación, a pesar de la profunda revisión bibliográfica llevada a cabo, únicamente ha sido posible localizar una única formulación para su cálculo que, al igual que en el caso anterior, depende de las características propias de los sedimentos de la zona de estudio. Ésta se ha introducido al código numérico como una formulación genérica que utiliza, por defecto, los valores registrados por Vidal et al (2005). No obstante, se han obtenido diversos valores de referencia utilizados por distintos autores (ver Tabla 2-20) que pueden ser utilizados directamente como una opción de evaluación de la tensión de sedimentación o, al menos, servir como referencia para que el usuario plantee su propuesta propia para la valoración de esta variable. Al respecto, cabe mencionar que, de acuerdo con Ji (2008), para el sedimento cohesivo la tensión de erosión suele ser significativamente mayor que la tensión de sedimentación. Mientras que para los sedimentos no cohesivos, la tensión crítica de sedimentación es ligeramente menor que la tensión crítica de erosión.

### 3.4.1.3. Tasas de erosión y sedimentación

Con respecto al cálculo de la tasa de erosión, las formulaciones de Alvera et al. (2003) y de Cappucci et al. (2004) son las más sencillas y, también, las más ampliamente difundidas en la literatura científica. Ambas quedan expresadas en función de las tensiones de erosión y del lecho, así como del coeficiente de tasa de erosión. No obstante, existen otras formulaciones (Lumborg y Pejrup, 2005; Huang et al., 2006) que si bien presentan un mayor nivel de complejidad no requieren del conocimiento de parámetros adicionales puesto que los coeficientes y constantes que implican son descritos explícitamente por estos autores (ver Tablas 2-9 y 2-10). En todo caso, dichas constantes se encuentran cargadas implícitamente en las formulaciones que utiliza el modelo.

Por su parte, con respecto a la tasa de sedimentación, las formulaciones disponibles en la literatura científica no presentan diferencias.

### 3.4.2. Subrutinas y cálculos

Para poder llevar a cabo los cálculos relacionados con la concentración de sólidos en suspensión o de sustancias contaminantes en el medio o ambos, el modelo desarrollado procesa secuencialmente varias subrutinas. Muchas de ellas están dedicadas a la lectura de la información, mientras que algunas otras, se corresponden con subrutinas de cálculo que resuelven y actualizan distintas variables. Asimismo, cuenta con ciertas subrutinas destinadas a la escritura de los resultados obtenidos.

A continuación se describe brevemente cada una de estas subrutinas. Cabe mencionar que muchas de ellas se corresponden con la formulación matemática propia del modelo general de transporte. Por tal motivo, su descripción será sumamente somera a diferencia de aquéllas desarrolladas de acuerdo con los objetivos específicos de esta tesis, para las cuales, se ahondará en la descripción tanto de su estructura como de su funcionamiento.

En primer lugar, el modelo procesa varias **subrutinas de lectura** de ciertos ficheros obteniendo así datos tales como: el régimen medio anual y las corrientes de viento (Cas8760.WND y \*VEL.001) así como información batimétrica (\*.AGD) e hidrodinámica (\*SUP.### y \*VEL.###). A partir de esta última calcula los niveles ( $H_t$ ) y las velocidades en x e y ( $U_t$  y  $V_t$ ). Asimismo, dentro de esta primera etapa, la lectura del fichero \*.INP permite llevar a cabo el cálculo de algunas propiedades del agua tales como la

densidad y la viscosidad en función de la salinidad y la temperatura determinadas por el usuario. Este último fichero provee al modelo con la información necesaria para que, posteriormente, sea capaz de calcular la constante de Henry (si ha lugar) y la velocidad de sedimentación. Finalmente, es a través de la lectura de este fichero \*.INP que el modelo reconoce las decisiones tomadas por el usuario en cuanto al tipo de emisión y de sustancia que desea modelar, así como a las formulaciones o parámetros que quiere emplear para llevar a cabo los cálculos correspondientes. En el caso de que la decisión del usuario implique la modelización de una sustancia tóxica, el modelo cuenta con una subrutina específica que carga las propiedades de la sustancia seleccionada.

Posteriormente, a partir de la información recopilada da inicio a una primera serie de **subrutinas de cálculo** que permiten llevar a cabo:

- El cálculo de los coeficientes de dispersión (mediante formulaciones que guardan proporcionalidad con el flujo o como un valor constante).
- La alimentación de la condición inicial ya sea a través del propio fichero \*.INP o de una malla de distribución de concentraciones de sólidos en suspensión (fichero solidos.TXT) preparada para tales efectos.
- La gestión de la información de vertidos reconociendo, además de la información asociada a éstos, la duración de los mismos.
- La valoración de la condición de Péclet a fin de comprobar la estabilidad del modelo.

A continuación, una **nueva etapa de lectura** de los ficheros de superficie libre y de velocidad procedentes del modelo hidrodinámico H2D (\*SUP.### y \*VEL.###) permite realizar, respectivamente, el cálculo actualizado de los niveles  $H_{t+1}$  y las velocidades  $U_{t+1}$  y  $V_{t+1}$ . Cabe comentar que dicha actualización se lleva a cabo en cada paso de tiempo. Asimismo, a partir de la lectura de los ficheros \*.INP y \*.TXT de caracterización de vertidos, se carga la condición de contorno y se procesa la información relativa a la duración, caudal y concentración de la sustancia contaminante que ingresa al sistema.

A partir de este punto, el modelo toma rutas diferentes en función de las decisiones especificadas por el usuario. De este modo, si se ha optado por el **modelado de los sólidos en suspensión** únicamente, el modelo:

- Resuelve la ecuación de advección-difusión para calcular la concentración de sólidos en suspensión y actualiza dicho cálculo tras cada paso de tiempo.

- Integra los parámetros correspondientes a la materia en suspensión en relación con el sedimento (tensiones y tasas de erosión y sedimentación).
- Calcula la concentración de sólidos en suspensión cercana al sedimento para poder hacer una estimación de la variación del espesor de la capa activa del lecho en función de los aportes y pérdidas que experimenta.

Por su parte, si la decisión del usuario ha sido la de llevar a cabo el **modelado del transporte de una sustancia tóxica** considerando los procesos de degradación que sufre, para cada paso de tiempo, el modelo:

- Resuelve la ecuación de advección-difusión para calcular la concentración de la sustancia contaminante.
- Posteriormente, a través de otra subrutina, resuelve los procesos de reacción (degradación por fotólisis, hidrólisis, volatilización y biodegradación) a fin de actualizar el cálculo anterior.

Finalmente, si la elección del usuario ha sido el **modelado del transporte de una sustancia tóxica** considerando, además de los procesos de degradación que sufre, los procesos que experimenta como resultado de su **interacción con los sólidos en suspensión** presentes en el medio, entonces, el modelo fusiona las etapas previamente descritas de la siguiente manera:

- Resuelve la ecuación de advección-difusión para calcular la concentración de sólidos en suspensión.
- Integra los parámetros correspondientes a la materia en suspensión en relación con el sedimento (tensiones y tasas de erosión y sedimentación).
- Calcula la concentración de sólidos en suspensión cercana al sedimento para poder hacer una estimación de la variación del espesor de la capa activa del lecho en función de los aportes y pérdidas que sufre.
- Calcula las variaciones de concentración de la sustancia contaminante tanto en la columna de agua como en el sedimento considerando los procesos de erosión, sedimentación, difusión y la pérdida definitiva por enterramiento en capas profundas del sedimento.
- Resuelve la ecuación de advección-difusión para calcular la concentración de la sustancia contaminante.
- Posteriormente, a través de otra subrutina, resuelve los procesos de reacción a fin de actualizar el cálculo anterior.

### 3.4.3. Resultados generados (Outputs)

El modelo desarrollado genera dos tipos de resultados, por un lado, graba en cada punto de control establecido por el usuario, para cada paso de tiempo, los valores de las siguientes variables:

- Concentración de sólidos en suspensión (mg/l)
- Concentración del compuesto tóxico seleccionado, tanto en agua como en sedimento (mg/l)
- Tensiones del lecho, de erosión y de sedimentación (N/m<sup>2</sup>)
- Módulo de velocidad (m/s)
- Tasas de erosión y sedimentación (Kg/m<sup>2</sup>s)
- Concentración de sólidos en suspensión cercana al lecho (mg/l)
- Espesor de la capa activa del sedimento (mm)

Estos ficheros de configuración vectorial se denominan automáticamente por el modelo mediante cuatro caracteres declarados por el usuario como clave del caso seguidos de la terminación "\_pnt" y una extensión numérica consecutiva de acuerdo con el número de puntos de control establecidos. Por ejemplo, si el usuario declara como clave del caso SSTX y establece 3 puntos de control, los ficheros generados serán denominados como: SSTX\_pnt.001, SSTX\_pnt.002 y SSTX\_pnt.003. Asimismo, el contenido de estos ficheros se corresponderá con una primera columna que indica la variación del tiempo seguida de otras 11 columnas que muestran, para cada paso de tiempo, los valores que adquiere cada una de las variables previamente mencionadas (Figura 3-7).

tiempo (h)	SS (mg/l)	Tox1 (mg/l)	t_lch (N/m2)	t_ero (N/m2)	t_sed (N/m2)	V_mod (m/s)	q_ero (Kg/m2s)	q_sed (Kg/m2s)	Cb (mg/l)	Tox2 (mg/l)	Hca (mm)
.00	10.0393	.000000	.0623000	.0968000	.0635000	.1888	.00000000	.00000007	10.6029	.000000	.000
.17	10.0229	.000000	.0623000	.0968000	.0635000	.1894	.00000000	.00000007	10.5615	.000000	.000
.33	10.0079	.000000	.0623000	.0968000	.0635000	.1900	.00000000	.00000007	10.5219	.000000	.000
.50	9.9929	.000000	.0623000	.0968000	.0635000	.1906	.00000000	.00000007	10.4822	.000000	.000

**Figura 3-7. Formato de resultados para los puntos de control.**

Por otro lado, el modelo genera ficheros que presentan los resultados en un formato matricial que permite conocer el valor de cada una de las variables previamente mencionadas, para cada celda, en los instantes de tiempo establecidos por el usuario. De este modo, es posible obtener mapas de la distribución espacial de dichas variables. A modo de ejemplo, en la Figura 3-8 se presenta el formato de resultados en el que se muestra la distribución espacial de la concentración de sólidos en suspensión.

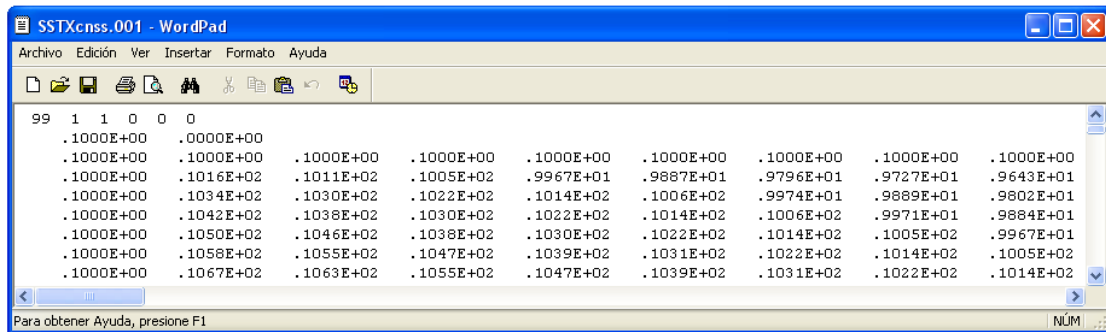
Al igual que en el caso anterior, la denominación de los ficheros se lleva a cabo de forma automática considerando los cuatro caracteres declarados por el usuario como clave de identificación del caso, seguidos de cuatro

caracteres adicionales alusivos a la variable grabada. La extensión de estos ficheros es una extensión numérica que se corresponde con el número de instantes de grabación establecidos por el usuario. De este modo, los caracteres que identifican a la variable grabada se corresponden con:

- “**cnss**” y “**cncb**” para las concentraciones de sólidos en suspensión en la columna de agua y en las cercanías del lecho (mg/l), respectivamente
- “**cntx**” y “**cbtx**” para las concentraciones del compuesto tóxico en la columna de agua (mg/l) y en los sedimentos (mg/l), respectivamente
- “**tlch**”, “**tero**”, “**tsed**” para las tensiones del lecho, de erosión y de sedimentación, respectivamente (N/m<sup>2</sup>)
- “**qero**” y “**qsed**” para las tasas de erosión y sedimentación, respectivamente (Kg/m<sup>2</sup>s)
- “**hlch**” para el espesor de la capa activa del sedimento (mm)

Así, por ejemplo, si el usuario declara como clave del caso SSTX y establece una única etapa de grabación de resultados, es decir para un solo instante de tiempo, los ficheros de resultados generados serán denominados como:

SSTXcnss.001 SSTXcncb.001  
 SSTXcntx.001 SSTXcbtx.001  
 SSTXtlch.001 SSTXhlch.001  
 SSTXtero.001 SSTXtsed.001  
 SSTXqero.001 SSTXqsed.001



**Figura 3-8. Formato de resultados para los mapas de distribución espacial.**

Cabe comentar que las subrutinas previamente descritas presentan una secuencia de resolución acorde con el esquema de funcionamiento del modelo desarrollado (Figura 3-9). Por otro lado, con respecto a los resultados generados, cabe mencionar que es posible su transferencia a un Sistema de Información Geográfica haciendo uso de los procedimientos metodológicos que se presentan en el Capítulo 4. Esto representa una ventaja sustancial en términos de la visualización y manejo de los mismos.

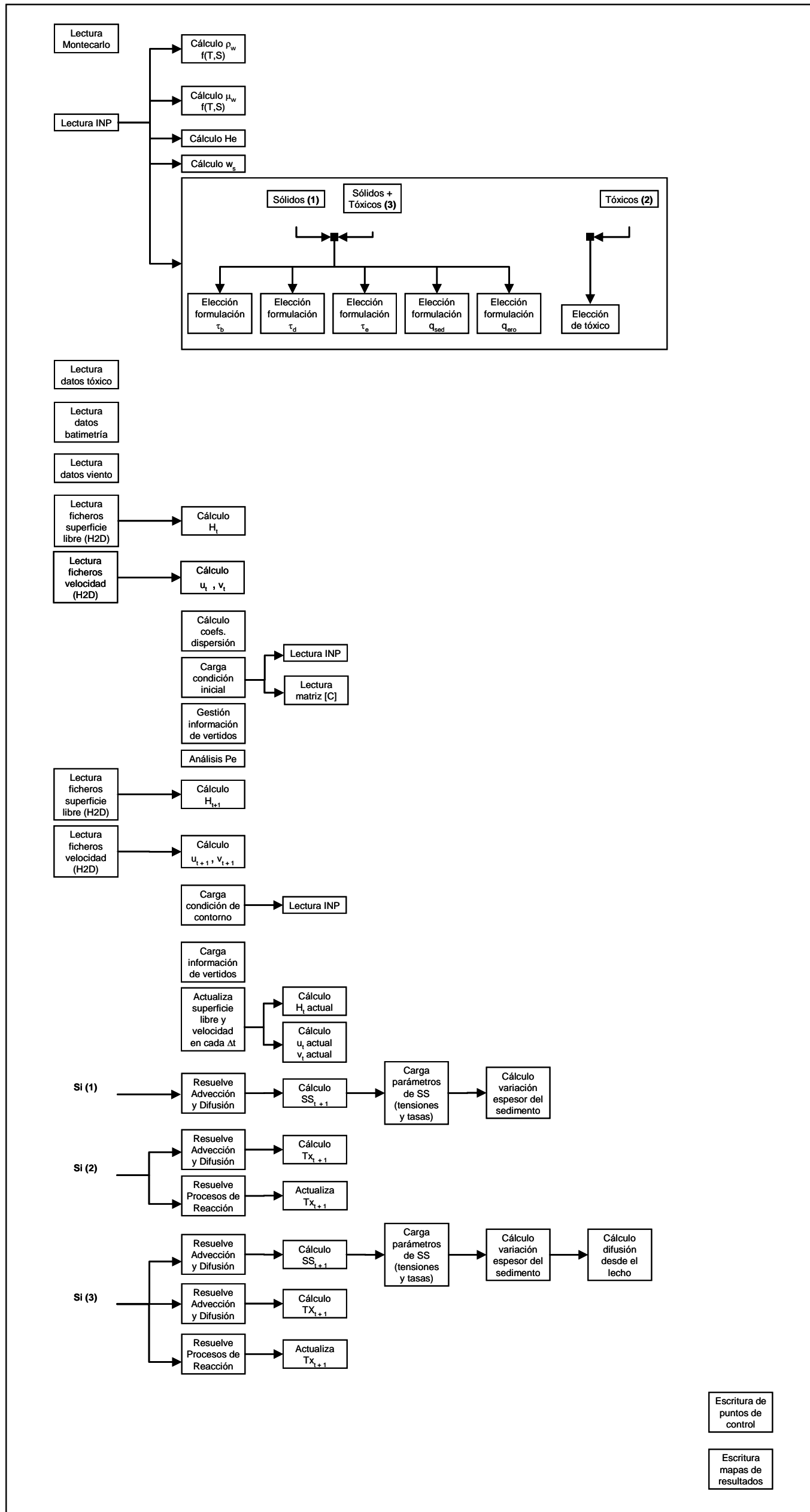


Figura 3-9. Esquema de funcionamiento del modelo desarrollado.

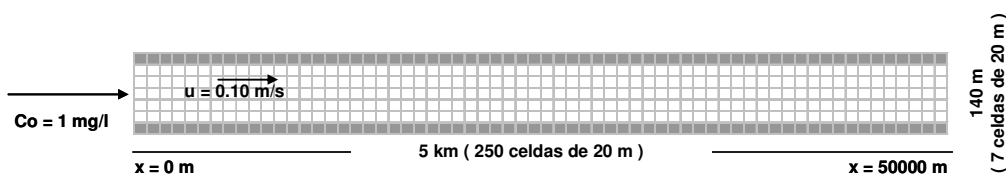


## 3.5. VALIDACIÓN TEÓRICA

### 3.5.1. Transporte de sólidos en suspensión

La mayoría de los casos teóricos que se plantean en la bibliografía consultada se refieren, principalmente, a casos tridimensionales enfocados al estudio de la salinidad. Únicamente fue posible localizar un caso teórico (Ji, 2008), también tridimensional, en el que se muestran los resultados obtenidos para velocidad, sólidos en suspensión y concentración de una sustancia contaminante. Por tal motivo, en ausencia de un caso teórico bidimensional adaptable a las características del estudio que quiere llevarse a cabo, se ha optado por una validación cualitativa que permita comprobar que tanto el transporte debido a los procesos de advección y difusión como los procesos de reacción se están llevando a cabo de forma apropiada en el modelo desarrollado.

Para ello, se ha hecho uso de una prueba con solución analítica conocida de un frente unidimensional de calado, concentración y velocidad constantes desde el contorno izquierdo de un canal (Figura 3-10). Dicho canal tiene 10 m de profundidad y unas dimensiones de 140 m de ancho por 5 km de longitud segmentado en celdas de 20 x 20 m. Se ha establecido una concentración de 1 mg/l y una velocidad de 0.10 m/s. El paso de tiempo se ha fijado en 20 s, de tal forma que el número de Courant ( $u \cdot \Delta t / \Delta x$ ) sea igual a 0.1. Finalmente, se han asignado tres valores distintos al coeficiente de dispersión: 4, 2 y 1 m<sup>2</sup>/s, a fin de que el número de Peclet ( $u \cdot \Delta x / D$ ) sea de 0.5, 1 y 2, respectivamente.



**Figura 3-10. Condiciones para el estudio teórico del transporte de un frente unidimensional de concentración constante.**

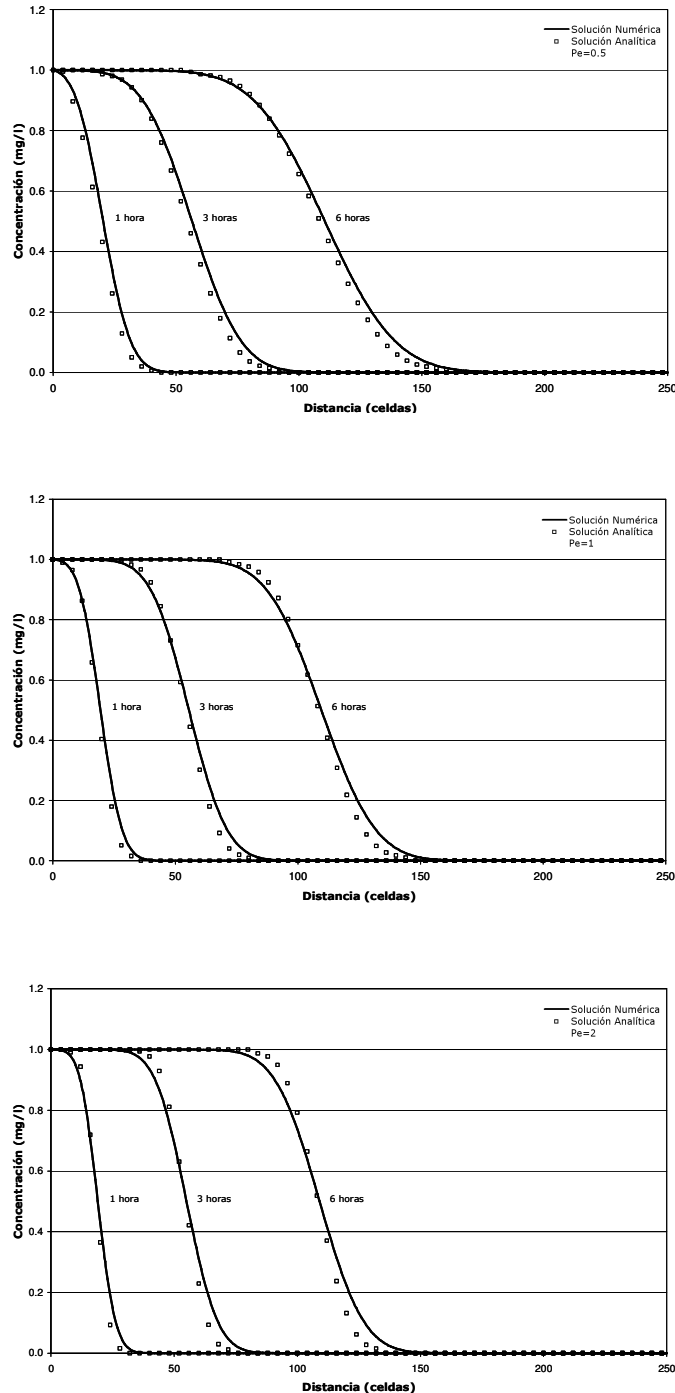
Para esta situación teórica, la solución analítica de la propagación del frente queda expresada como (García, 2004 tomada de Ogata y Banks, 1961):

$$C(x,t) = \frac{1}{2} C_0 \left[ \exp\left(\frac{ux}{D_x}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+ut}{2\sqrt{D_x t}}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{x-ut}{2\sqrt{D_x t}}\right) \right] \quad (3-28)$$

donde  $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$  (3-29)

$C_0$ : concentración del frente (mg/l);  $u$ : velocidad de la corriente (m/s);  $x$ : distancia (m);  $D_x$ : coeficiente de dispersión ( $m^2/s$ );  $erf(x)$ : función error y  $t$ : tiempo.

Así pues, en la Figura 3-11 se representa la comparación entre la solución analítica y los resultados numéricos obtenidos para los tres casos. Cabe mencionar que las soluciones numéricas han sido elaboradas bajo el supuesto de la inexistencia de los procesos de sedimentación ( $\alpha=0$ ).



**Figura 3-11. Advección-difusión de un frente unidimensional de concentración constante.**

Tal y como puede observarse en la figura anterior, la solución numérica reproduce de forma satisfactoria los resultados obtenidos mediante la solución analítica en los tres casos analizados. No obstante, cabe recordar que cuando el transporte por la corriente predomina sobre el proceso físico de difusión ( $Pe > 1$ ), la difusión numérica propia del esquema upwind resulta más pronunciada (García, 2004).

### 3.5.2. Desaparición de sustancias contaminantes

En condiciones estacionarias, la desaparición de una sustancia no conservativa ( $C$ ) se ajusta a una ecuación exponencial dependiente, además de una tasa constante de desaparición ( $K$ ), de la velocidad neta no mareal ( $u$ ), del coeficiente de dispersión longitudinal ( $D_L$ ) y de la distancia ( $x$ ) que guarda un punto determinado con respecto al contorno de mar abierto a través del cual se introduce una concentración inicial de dicha sustancia ( $C_o$ ). La Ecuación 3-30 expresa tal dependencia (Gin et al., 2001).

$$C = C_o \cdot \exp \left[ \left( \frac{u - \sqrt{u^2 + 4KD_L}}{2D_L} \right) x \right] \quad (3-30)$$

Tomando esto en consideración, se ha utilizado nuevamente una malla teórica de 5000 m en dirección  $x$  fraccionada en 250 celdas de 20 m de lado. En dirección  $y$ , cuenta con una longitud de 140 m distribuidos en 7 celdas de 20 m de lado. En ella se ha introducido una concentración inicial de 30 mg/l en el contorno de mar abierto tras fijar los valores de 0.10 m/s y 4 m<sup>2</sup>/s para definir las variables  $u$  y  $D_L$ , respectivamente (Figura 3-12). Por su parte, se ha fijado una tasa de desaparición igual a 1/día. Finalmente, con el objetivo de garantizar condiciones estables durante la ejecución del modelo, se ha fijado en 360 horas el tiempo de ejecución considerando un paso de tiempo de 20 segundos.

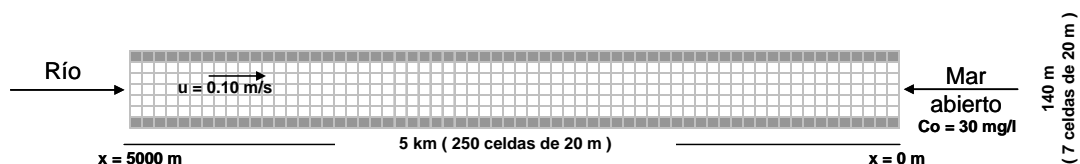
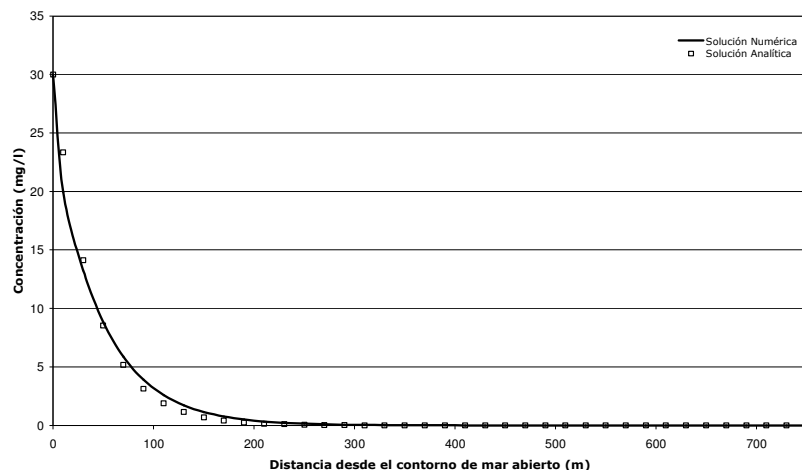


Figura 3-12. Condiciones para el estudio teórico de la desaparición de una sustancia contaminante.

Por su parte, para llevar a cabo la resolución numérica de este caso teórico se ha utilizado un esquema de tipo Runge Kutta de orden 4°. Tal y como

puede observarse en la Figura 3-13, ambas soluciones (analítica y numérica) presentan, en general, un buen ajuste. Por tal motivo, puede concluirse que los procesos de desaparición de las sustancias contaminantes están siendo reproducidos correctamente por el modelo desarrollado.



**Figura 3-13. Valores de concentración obtenidos a partir de la solución analítica y de la solución numérica utilizando un esquema de tipo Runge Kutta de orden 4<sup>o</sup>.**

## 3.6. CONCLUSIONES

En primer lugar, cabe comentar que, con base en el análisis del estado del conocimiento efectuado en el capítulo anterior, los modelos H2D y H2DZ se han seleccionado como generadores de la información hidrodinámica que requiere el modelo de transporte desarrollado.

Este último se corresponde con un modelo bidimensional constituido por tres módulos capaces de simular el transporte y destino de los sólidos en suspensión (Módulo I) y de sustancias contaminantes clasificadas como prioritarias y peligrosas (Módulo II) de forma independiente. El tercer y último módulo permite la integración de los dos anteriores simulando el comportamiento de dichas sustancias contaminantes considerando su interacción con la materia en suspensión.

Para ello, se ha aplicado la técnica de "splitting" a fin de poder resolver los términos advectivo, dispersivo y de reacción que componen la ecuación de transporte mediante un esquema upwind, un esquema explícito centrado y el método de Runge-Kutta de orden 4<sup>o</sup>, respectivamente.

Dicho planteamiento ha sido validado a través de su aplicación a un escenario teórico cuya solución analítica ha puesto de manifiesto que los esquemas seleccionados así como su integración dentro del modelo

desarrollado proporcionan resultados satisfactorios tanto para la parte correspondiente a los procesos de advección-dispersión como a los procesos de reacción.

Finalmente, con respecto a este último término, relativo a las variaciones de concentración que experimenta la sustancia objeto de estudio, el modelo desarrollado considera, además de las variaciones asociadas a los procesos de sedimentación y resuspensión, aquellas relacionadas con la difusión entre la columna de agua y el lecho bentónico, la degradación (hidrólisis, fotólisis y biodegradación), la volatilización y la pérdida definitiva en capas más profundas del sedimento.