

# MODELOS DE CALIDAD DE AGUAS

Por Jorge Castillo G.

## 1.- Introducción

El comportamiento de los contaminantes en el agua es esencialmente dinámico. Los contaminantes están en permanente movimiento, ya sea por efecto del propio movimiento del agua, o por la movilidad natural de las moléculas y partículas coloidales, aún en aguas quietas. Los fenómenos de transporte de contaminantes han sido ampliamente estudiados y han dado origen a numerosas formulaciones matemáticas que describen su comportamiento. Estos modelos han mostrado ser de una gran utilidad en la planificación de recursos y en el adecuado manejo de la mayoría de los problemas de contaminación del agua.

A continuación se describe algunos conceptos generales de la modelación de agua y los modelos específicos más ampliamente utilizados.

## 2.- Concepto de Modelo

Para nuestros efectos entenderemos por modelo una representación simplificada de la realidad en la cual sólo se incluyen aquellos aspectos que tienen relevancia para el problema que queremos estudiar. Un ejemplo de modelo es el sistema de contabilidad de una empresa, sistema que permite conocer el resultado de la gestión en términos económicos, en el cual se consideran esencialmente los flujos de dinero, dejando fuera todo el resto de la información de la empresa.

Otros ejemplos de modelos son un chupete, las palabras, una maqueta, etc.

Los modelos pueden ser **físicos** si representan a escala la geometría y las propiedades de los materiales de un sistema, como son las maquetas y los modelos hidráulicos a escala. También pueden ser **analógicos**, si representan las propiedades de un sistema a través de fenómenos diferentes pero que tienen un comportamiento similar, tal como ocurre con los modelos que representan el escurrimiento del agua subterránea a través del escurrimiento de aceite entre dos vidrios paralelos o de la corriente eléctrica en una red de resistencias. También existen modelos **conceptuales**, en los cuales se identifican las características relevantes de un sistema, pero sin llegar a representarlas cuantitativamente, sólo con el fin de tener una mejor comprensión del sistema. Por último, están los modelos **matemáticos**, es decir, aquellos en que las relaciones principales entre los elementos relevantes de un sistema se reemplazan por relaciones matemáticas que las representan en forma aproximada.

En estricto rigor la simple aplicación de una fórmula matemática es un modelo matemático, pero el término se reserva usualmente para aplicaciones al análisis de sistemas complejos en que normalmente no es fácil estimar o prever el resultado de numerosas interacciones entre los diferentes componentes de un sistema.

Existe una tendencia a usar cada vez más y más modelos matemáticos, debido a la facilidad de uso de los computadores modernos y a las enormes ventajas comparativas

de este tipo de modelos en relación a los otros. Entre estas ventajas está la rapidez en la obtención de las respuestas, la simplicidad de la materialización en comparación con los modelos físicos y analógicos, la facilidad para cambiar las condiciones de modelación, etc.

En relación a los modelos de calidad de agua, hace un par de décadas se hicieron algunos intentos por representar el comportamiento de la calidad del agua en ríos mediante modelos físicos, los cuales fueron rápidamente desechados debido a la dificultad de cumplir simultáneamente con las condiciones de similitud espacial y temporal.

La primera aplicación de modelos matemáticos de calidad de aguas de que se tiene conocimiento es el conocido modelo desarrollado por Streeter y Phelps en 1925, para estudiar el balance de oxígeno en el río Ohio. Aunque dicho modelo sólo pretendía ser una aplicación particular de los conceptos cinéticos relativos a la oxidación de la materia orgánica desarrollados por el propio Phelps, en la actualidad se sigue aplicando, aunque con el agregado de conceptos complementarios que lo hacen más completo.

En la actualidad existen numerosos programas computacionales generalizados que permiten configurar modelos matemáticos de calidad de agua con relativa facilidad. Aunque en estricto rigor un modelo es la representación de un sistema real, es decir, un sistema caracterizado por las variables que definen la configuración espacial, el comportamiento hidráulico y la cinética de las reacciones entre los parámetros de calidad, a veces se acostumbra a designar con el nombre de modelo a los programas de computación generalizados.

### **3.- Utilidad de los Modelos de Calidad de Agua**

Los modelos matemáticos de calidad del agua tienen una gran cantidad de aplicaciones, siendo algunas de las más conocidas las que se indican a continuación.

#### **3.1.- Utilidad predictiva**

**Evaluación del impacto de las decisiones de manejo en la cuenca.** Cuando se debe seleccionar de entre varias alternativas de manejo de los recursos hídricos en una cuenca, es útil poder predecir el impacto que tendrán estas alternativas en la calidad del recurso, de manera de incorporar dicho efecto en la toma de decisiones. Para ello, los modelos matemáticos constituyen una importante herramienta, entregando información anticipada de los impactos en la calidad del agua de la construcción de embalses, traslado de recursos inter-cuenca, incremento de la tasa de reutilización del uso del agua, construcción de obras de tratamiento y conducción de efluentes, etc.

**Predicción de la evolución de la calidad del agua bajo diferentes escenarios de desarrollo y control.** A medida que se produce un incremento en los niveles de desarrollo y, por lo tanto, en el uso de los recursos hídricos y la descarga de efluentes contaminantes, se puede ir produciendo un deterioro gradual de la calidad de las aguas naturales. Este deterioro será consecuencia conjunta de las políticas de desarrollo y las metodologías de control de la calidad del recurso hídrico que se adopten y los modelos matemáticos pueden ayudar a predecir los efectos asociados a diferentes políticas.

### **3.2.- Utilidad como herramienta de planificación**

**Establecimiento de objetivos de calidad ambiental.** La primera tarea antes de definir una política de manejo de la calidad de los recursos hídricos en una cuenca o región, es el establecimiento de objetivos de calidad, es decir, las metas de calidad dentro de las cuales la sociedad aspira a mantener los recursos. El problema se produce porque el establecimiento de estas metas no es independiente de los esfuerzos, en términos de costos y mecanismos de control, asociados a ellas. Los modelos matemáticos de calidad del agua permiten evaluar el resultado de varias políticas de manejo y control y, de esta forma, permiten seleccionar aquella que resulta óptima, habida cuenta de los costos y beneficios asociados.

**Establecimiento de objetivos de calidad de emisiones para alcanzar objetivos de utilidad ambiental.** Una vez establecido objetivos para la calidad de las aguas naturales en una cuenca o región, se debe definir una política o norma de calidad de efluentes que garantice la obtención de los objetivos planteados, tomando en cuenta la existencia de procesos naturales de dilución y autopurificación. Los modelos matemáticos de calidad del agua son la única herramienta que permite relacionar *a priori* la calidad resultante en los cuerpos de agua receptores con la calidad de las emisiones

#### **Distribución de costos ambientales asociados al efecto de diferentes descargas.**

Cuando se produce un problema de calidad de aguas naturales como resultado del efecto combinado de varias descargas, los modelos matemáticos de calidad del agua permiten evaluar la importancia relativa de cada una de las descargas y, de esta forma, asignar responsabilidades o costos de control más justos que el simple prorrateo o la asignación discrecional.

**3.3.- Caracterización/conceptualización de problemas complejos.** Los modelos matemáticos de calidad del agua, una vez construidos, calibrados y validados, permiten una completa comprensión de los mecanismos que producen las variaciones espaciales y temporales de la calidad de las aguas naturales, seleccionar las variables relevantes y los procesos de mayor importancia en el sistema. Esta comprensión es una herramienta invaluable a la hora de tomar decisiones rápidas para manejar los recursos, por ejemplo ante situaciones de emergencia.

### **3.4.- Otros usos**

**Evaluación de riesgos.** Cuando existe la posibilidad de que se produzcan descargas accidentales, por ejemplo por la existencia de obras que pueden sufrir un eventual colapso, efluentes mal controlados, rutas de transporte sistemático de sustancias contaminantes o líneas de transporte de combustibles, los modelos matemáticos de calidad del agua permiten evaluar la probabilidad de ocurrencia de eventos críticos de contaminación y, de esta manera, constituyen una ayuda extraordinaria para establecer políticas de prevención.

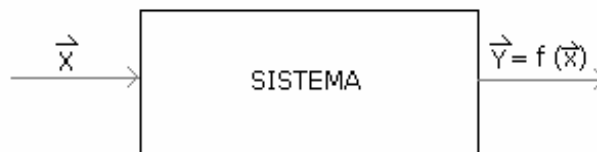
**Validación y procesamiento de información de calidad de agua.** En teoría de la información se distingue entre los datos y la información, estableciéndose que ésta

última es la que permite reducir la incertidumbre. En este sentido, los modelos matemáticos son la herramienta más poderosa que existe para transformar información sistemática de calidad del agua en información, vale decir, en un conocimiento mejorado de las características de un sistema de recursos hídricos y de las respuestas de éste frente a estímulos externos. En el mismo sentido los modelos proporcionan orientación para el establecimiento de programas de monitoreo de calidad del agua eficientes.

#### 4.- Tipos de Modelos

En los modelos matemáticos las relaciones entre las diferentes variables se reemplazan por expresiones matemáticas simplificadas que representan el comportamiento del sistema real. A veces se acostumbra a distinguir dentro de las variables del modelos a las entradas y las salidas. Las entradas corresponden a las variables que representan los estímulos que provocan la reacción del sistema y que generalmente son manejadas a voluntad por el operador del modelo. Las salidas corresponden a las variables que representan el comportamiento del modelo (y del sistema) como respuesta a los estímulos o entradas. En la figura N°1 se muestra esquemáticamente la configuración de un modelo, como sistema simplificado que representa la realidad.

**Figura N°1**  
**Esquema general de un modelo**



Un ejemplo típico de entradas en un modelo de calidad de aguas es la eficiencia de remoción de contaminantes ( $\eta_i$ ) de los sistemas de tratamiento asociados a varias descargas, siendo en este caso las salidas típicas la distribución de concentraciones resultante en el espacio y el tiempo,  $C(x,t)$ .

##### 4.1.- Modelo de simulación

Los modelos de simulación son los más usados y simplemente permiten encontrar la respuesta del sistema (salida) frente a diversos estímulos o entradas, tal como una función entrega los valores asociados a diferentes valores que asume la variable..

$$\vec{y} = f(\vec{x})$$

Un ejemplo de modelo de simulación es el ya mencionado que permite determinar la calidad ambiental resultante en una cuenca en función de las eficiencias de remoción de contaminantes de los sistemas de tratamiento:

$$C(\vec{x}, t) = f(\eta_i)$$

#### 4.2.- Modelos de optimización

En los modelos de optimización generalmente el problema es encontrar el conjunto de valores de las variables de entrada que optimiza una determinada función de las variables de salida o de las propias variables de entrada, sujeto a de determinadas restricciones. Un ejemplo típico de modelo de optimización es la minimización de costos de tratamiento sujeto a mantener una determinada calidad objetivo. En términos de ecuaciones, el problema se puede plantear como

Encontrar

$$\begin{aligned} \min \sum \text{Costo}(\eta_i) \\ \text{sujeto a } \text{Calidad}(\eta_i) \leq L \end{aligned}$$

#### 4.3.- Modelos estocásticos

Los modelos estocásticos se caracterizan por tener alguna componente desconocida, de la cual sólo se conoce su probabilidad de ocurrencia. Una forma clásica de representar estas variables es la siguiente:

$$x = \bar{x} + \xi$$

en que  $x$  representa la variable,  $\bar{x}$  representa su valor medio y  $\xi$  representa la desviación con respecto a la media que puede ser desconocida, con una distribución probabilística estimada. Normalmente, en los modelos de calidad es necesario incluir la hidrología del sistema hídrico, la mayoría de cuyas variables tienen el carácter de estocástico o aleatorio.

#### 4.4.- Modelos paramétricos

Cuando existe un total desconocimiento de alguna de las variables del sistema, una alternativa es parametrizarla, es decir, determinar los resultados que entrega el modelo para un rango de valores que puede tomar esta variable. De esta forma se obtiene al menos un rango factible de resultados, que muchas veces es suficiente para alcanzar el propósito del modelo. Por ejemplo, si no se sabe a ciencia cierta cuáles son las reglas de operación de un embalse, pero se sabe al menos que su volumen variará dentro de un rango pre-establecido, es posible generar resultados del modelo para diferentes volúmenes dentro de ese rango.

## **5.- Calibración y validación de los modelos**

### **Calibración**

En el proceso de calibración de un modelo se intenta evaluar las variables desconocidas mediante su parametrización y la comparación de los resultados que entrega el modelo con un conjunto de resultados medidos en el sistema real. Ejemplos típicos de calibración de modelos matemáticos de calidad del agua son la estimación de las constantes cinéticas asociadas a la descomposición de la materia orgánica, el decaimiento bacteriano, la reoxigenación, etc.

### **Validación**

Cuando en un modelo se calibran simultáneamente varias variables, se corre el riesgo de que el conjunto de valores que permite representar en mejor forma los resultados del sistema real carezca de sentido físico y, por lo tanto, no necesariamente represente bien una situación diferente. Para evitar esto, se acostumbra, una vez calibrado el modelo, comparar la realidad con los resultados que entrega el modelo para una situación completamente distinta e independiente a la utilizada en la calibración. Con esto se evita que la calibración sólo tenga sentido numérico y que los valores calibrados no representen individualmente las condiciones que se desea modelar.

## **6.- Conceptos básicos para los modelos de calidad del agua.**

### **6.1.- Dilución**

La dilución se produce por la mezcla de las descargas concentradas con el agua natural con baja o nula concentración

### **6.2.- Reacción**

La mayoría de los contaminantes experimenta una variación neta de concentraciones, no explicada por la dilución, la que se conoce como reacción, sin que necesariamente corresponda a una reacción química o biológica. Ejemplos de reacción son la degradación (oxidación) de la materia orgánica y el decaimiento bacteriano.

La mayoría de las reacciones se pueden representar por una ley de primer orden.

### **6.3.- Transporte**

Hay dos conceptos que representan los mecanismos básicos de transporte en el agua:

- i) flujo advectivo
- ii) flujo dispersivo

## Flujo advectivo

Se refiere al transporte de sustancias disueltas a partículas “con el agua”, es decir mediante el arrastre que producen los desplazamientos netos del agua.

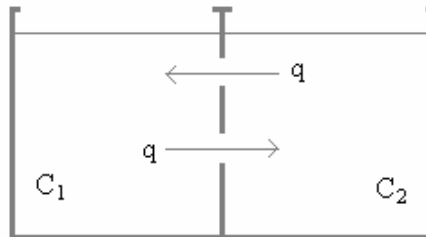
El flujo advectivo o, la cantidad de sustancia transportada por unidad de superficie y por unidad de tiempo que se mueve en la dirección de la velocidad está dada por

$$\vec{N}_a = C(\vec{x}, t) \vec{U}(\vec{x}, t)$$

## Flujo dispersivo

Se refiere al transporte de sustancias que ocurre independientemente de la existencia de un flujo de agua, por efecto de la superposición de la difusión a nivel molecular y la dispersión turbulenta. La figura N°2 ilustra la forma como se produce el flujo dispersivo.

**Figura N°2**  
**Ilustración del flujo dispersivo**



En estricto rigor corresponde al flujo advectivo de aquellos componentes del campo de velocidades no incluidas en el modelo hidrodinámico. Normalmente se representa a través de la Ley de Fick, inicialmente establecida para la difusión molecular, que establece que el flujo es directamente proporcional al gradiente de concentraciones, aunque con dirección opuesta a éste.

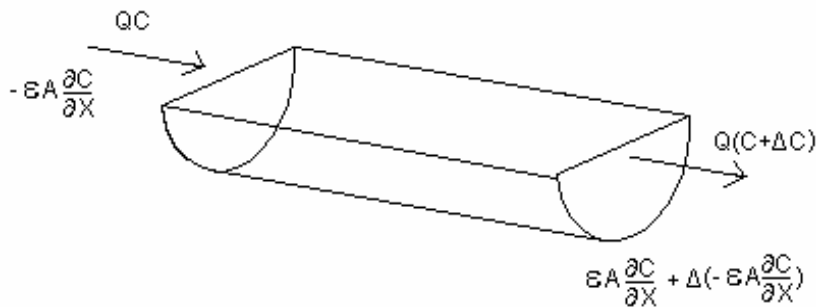
$$\vec{N}_d = -\varepsilon \nabla C(\vec{x}, t)$$

Los conceptos de flujo advectivo y dispersivo permiten generar las ecuaciones que describen el comportamiento de una sustancia en un sistema lineal, transversalmente homogéneo. Estableciendo un balance de masas según la figura N°3:

$$M = V\bar{C} = \bar{A}\Delta x\bar{C}$$

$$\frac{dM}{dt} = V \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \bar{A}\Delta x \frac{\partial C}{\partial t} = QC - \varepsilon A \frac{\partial C}{\partial x} - Q\left(C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x\right) + \varepsilon A \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon A \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Delta x \pm \bar{F}A\Delta x$$

**Figura N°3**  
**Sistema lineal transversalmente homogéneo**



Dividiendo la ecuación por el volumen  $\bar{A}\Delta x$  y haciendo tender  $\Delta x$  a cero, con lo cual las aproximaciones resultan exactas y  $\frac{\partial \bar{C}}{\partial t}$  se hace igual a  $\frac{\partial C}{\partial t}$  en  $x$ , resulta la ecuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon A \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{Q}{A} \frac{\partial C}{\partial x} \pm F$$

o bien

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon A \frac{\partial C}{\partial x} \right) - U \frac{\partial C}{\partial x} \pm F$$

Si tanto el área transversal como el coeficiente de dispersión longitudinal no dependen de  $x$ , la ecuación se puede simplificar a

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} \pm F$$

$F$  representa las “fuentes” o “sumideros” y tiene dimensiones de concentración por unidad de tiempo ( $\partial c/\partial t$ )

## 7.- Ejemplos de aplicación de modelos específicos

### 7.1.- Modelos de mezcla completa

Embalse Conchi  
Embalse Paloma  
Tranques de relaves

### 7.2.- Modelos fluviales unidimensionales

Descarga de relaves



Balance de oxígeno en el río Mapocho  
Valle Nevado  
Descargas al mar