

Modelación numérica de la hidrodinámica, del oxígeno disuelto y la demanda bioquímica de oxígeno en sistemas con vegetación

Numerical modeling of hydrodynamics, dissolved oxygen and biochemical oxygen demand in systems with vegetation

Ricardo González-López y Hermilo Ramírez-León

Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152, San Bartolo Atepehuacan, Gustavo A. Madero, Distrito Federal, 07730. México.
e-mail: gricardo@imp.mx

González-López R. y H. Ramírez-León. 2011. Modelación numérica de la hidrodinámica, del oxígeno disuelto y la demanda bioquímica de oxígeno en sistemas con vegetación. *Hidrobiológica* 21(2): 147-158.

RESUMEN

El presente trabajo trata sobre la implementación de un modelo numérico para simular la hidrodinámica y el transporte de contaminantes en sistemas donde existe vegetación, tanto sumergida como emergente. Dicho modelo se basa en las ecuaciones de aguas someras para el cálculo de las velocidades del flujo, haciendo énfasis en la evaluación del esfuerzo cortante de arrastre de las plantas y en la turbulencia; así como en la ecuación de advección-difusión-reacción para la simulación del transporte de sustancias disueltas. En este trabajo se presenta el cálculo del transporte de la Demanda Bioquímica de Oxígeno y del Oxígeno Disuelto. El objetivo principal es reproducir las funciones de filtrado de contaminación y reaeración que cumplen las plantas en cuerpos de agua, como los humedales. En los resultados obtenidos del campo de velocidades se aprecia el cambio de comportamiento por la restricción al flujo que impone la vegetación. Las concentraciones de DBO y OD varían debido al tiempo de residencia y a la reaeración producida por el intercambio atmosférico y la respiración de las plantas. Se concluye que el modelo representa de manera óptima el comportamiento del transporte de sustancias disueltas en flujos con presencia de vegetación y que se puede aplicar a la gran variedad de ecosistemas, siendo capaz de predecir la ruta y destino de la contaminación.

Palabras Clave: Flujos con vegetación, modelación hidrodinámica, Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO), Oxígeno Disuelto (OD).

ABSTRACT

This work deals with the implementation of a numerical model to simulate hydrodynamics and transport of pollutants in flows where submerged vegetation is present. The model is based on the Shallow-Water Equations to calculate the mean velocities, emphasizing calculations of the shear stress produced by both the vegetation and turbulence. The Advection-Diffusion-Reaction Equation is used to calculate the transport of the Biochemical Oxygen Demand and the Dissolved Oxygen. The main objective is to simulate the transport of these substances and the pollution filtering and reaeration functions of plants in water bodies such as wetlands. In the obtained velocity fields, the change of the behavior due to the restriction imposed by the vegetation can be seen. The BOD and DO concentrations are influenced by the residence time and the reaeration from the atmospheric exchange and plants breathing. As a conclusion, the model represents very precisely the behavior of dissolved substances transport in flows with presence of vegetation and can be applied to different ecosystems, being capable to predict the path and fate of pollution.

Key words: Vegetated fluxes, hydrodynamic modeling, Biochemical Oxygen Demand (BOD), Dissolved Oxygen (DO).

INTRODUCCIÓN

Un buen ejemplo de los flujos donde la vegetación está presente en los humedales. Estos ecosistemas existen en la interfase entre ambientes terrestres y acuáticos. Sirven como fuentes, consumidores y transformadores de materiales. Son sitios útiles para la transformación de componentes biogeoquímicos (nitrógeno (N), fósforo (P) y carbono (C)). Las formas disueltas de estos componentes son asimiladas por microorganismos y la vegetación, incorporándose dentro de los compuestos orgánicos. Las reacciones biogeoquímicas que se llevan a cabo son importantes en la evaluación de las condiciones de nutrientes (oligotrófico, mesotrófico, eutrófico) y de déficit de oxígeno en los humedales (USEPA, 2008).

Los humedales son generalmente sumideros de sedimentos incrementando su efecto en aquellos que se encuentran conectados a ecosistemas acuáticos adyacentes (por ejemplo, ríos o estuarios). Los humedales pueden ser fuentes de materia orgánica debido a la producción de biomasa de las plantas.

Las plantas en los humedales pueden ser macrofitas o microfitas. En las primeras se incluyen plantas flotantes, sumergidas y emergentes. Estas plantas requieren oxígeno para alcanzar la demanda por crecimiento, metabolismo y reproducción. En las macrofitas la mayor parte (alrededor del 50%) de la respiración ocurre en las raíces debajo del sedimento (USEPA, 2008).

La hidrodinámica es especialmente importante en el intercambio de materiales entre los humedales y los ecosistemas acuáticos y terrestres adyacentes. De hecho, el papel de los humedales como fuentes, sumideros y transformadores de materiales, depende, en gran medida, de la hidrodinámica. El flujo de agua en estos ecosistemas puede ser unidireccional o bidireccional. En algunos humedales como las marismas y los manglares, el flujo es bidireccional debido a la acción del viento. Los humedales con flujo lateral superficial pueden ser importantes en el mantenimiento de la calidad del agua de los sistemas acuáticos adyacentes por servir como trampas de sedimentos y de otros contaminantes. Los humedales de flujo superficial pueden ser una importante fuente de C orgánico hacia los ecosistemas acuáticos cuando es transportado desde los humedales hacia los ríos o a los lagos adyacentes, estuarios y aguas cercanas a la costa (USEPA, 2008).

Es por todo lo expuesto anteriormente que, el cálculo de la hidrodinámica y del transporte de sustancias en los flujos donde existe vegetación cobra importancia; y, para ello, se desarrollan modelos numéricos que permiten conocer los patrones de corrientes y el transporte de compuestos en todo el cuerpo de agua.

Debido a que los flujos en donde existe vegetación son en general someros, el modelo que se utilizó para el desarrollo de este trabajo está basado en las ecuaciones de las aguas someras

para calcular las componentes de la velocidad y la elevación de la superficie libre, así como la ecuación de Advección-Difusión-Reacción (ADR) para modelar el transporte de contaminantes.

El modelo que se plantea puede realizar el cálculo de las velocidades diferenciando entre los sitios en donde existe vegetación y los sitios en que solo hay agua, así como la contribución de las plantas en el intercambio de compuestos disueltos y/o suspendidos en la columna de agua. La vegetación provoca una disminución en el flujo; la cual se calcula a través de un esfuerzo cortante de arrastre que afectará a las componentes de la velocidad y a la turbulencia. El esfuerzo cortante de arrastre es función de las dimensiones características de la planta, la flexibilidad de la misma y la densidad de vegetación. Otro efecto de la vegetación en el flujo es un cambio en el esfuerzo cortante de fondo, el cual se parametriza en términos del coeficiente de Manning para los sitios con vegetación y como función del coeficiente de Chezy en los sitios sin vegetación.

El modelo fue adaptado para realizar cálculos en varias capas en la vertical para poder representar el comportamiento del perfil vertical de las velocidades, especialmente cuando la altura de las plantas no es uniforme. Cuando la vegetación es emergente, la única capa de celdas mojadas es bloqueada en su totalidad, de forma que la vegetación toma la función de reductor de flujo y el comportamiento esperado es el aumento en la elevación de la superficie libre del agua en el espacio anterior a la barrera vegetal. Cuando la vegetación es sumergida, existe una capa de agua que fluye libremente, por lo cual el perfil de velocidades debe crecer nuevamente en la parte superior de la columna de agua. Además del efecto físico en el flujo, las plantas alteran las concentraciones de los parámetros de calidad del agua, toda vez que realizan procesos que afectan directamente a los ciclos biogeoquímicos y tienen la capacidad de absorber y adsorber algunos contaminantes.

El objetivo del presente trabajo es reproducir los efectos que causa la presencia de vegetación en la hidrodinámica y el transporte de contaminantes dentro de los sistemas, mediante un modelo matemático-computacional, basándose en un humedal artificial.

MATERIALES Y MÉTODOS

Existen diversas formas de aproximar el cálculo de la hidrodinámica y del esfuerzo cortante de arrastre reportados en la literatura. Algunos de ellos simplemente aplican la difusión del flujo en 2D para obtener balances hidrológicos y así conocer el movimiento del agua, *v. gr.* como el *South Florida Water Management Model* (SFWMM) desarrollado por Lal (1998) y *The Natural System Model* (NSM) desarrollado por Fennema *et al.* (1994).

Algunos otros modelos realizan el cálculo de las velocidades en 2 capas, una capa inferior en la cual se encuentra la vegeta-

ción y otra superior donde el flujo es libre; el cálculo es obtenido a través de expresiones analíticas derivadas de la integración vertical del perfil de velocidades. Ejemplos de estos modelos son el desarrollado por Stone y Shen (2002) y el modelo de Järvelä (2004).

Otros modelos bidimensionales existentes utilizan ecuaciones de momento para calcular la hidrodinámica. El modelo de Rowinski y Kubrak (2002) fue desarrollado para calcular el perfil vertical de velocidades; también calcula una fuerza de arrastre para considerar la disminución de la velocidad en el flujo. El *California Tidal Wetland Modeling System* (CalTWiMS) desarrollado por Arega y Sanders (2004), el cual también calcula el esfuerzo cortante de arrastre en un esquema integrado en la vertical.

En cuanto a la forma en que los compuestos se transportan y reaccionan en el medio existen modelos que se apoyan en la ecuación de Advección-Difusión y calculan los cambios de concentración por las reacciones en base a ecuaciones diferenciales como es el caso del modelo WASP desarrollado por la *Environmental Protection Agency* de los Estados Unidos (Wool *et al.*, 2001) y el modelo CE-QUAL-ICM (Cercio & Cole, 1995). Otros modelos sólo calculan el cambio de concentraciones en base a la cantidad de contaminantes que se mueven de una sección a otra, simulando un reactor continuo (Continuous Stirred-Tank Reactor, CSTR), como el modelo presentado por Bezbaruah y Zhang (2009) para el transporte del déficit del oxígeno disuelto y de la Demanda Bioquímica de Oxígeno (en términos de el déficit de Oxígeno). Otro ejemplo es el modelo *Wetland Solute Transport Dynamics* de Kazezyilmaz-Alhan *et al.* (2007) y el modelo presentado por Yoon-Young y Caropacioglu (1998) para el transporte de hidrocarburos.

Ecuaciones Gobernantes. Las ecuaciones que resuelve el modelo son las de Navier-Stokes-Reynolds para aguas someras en las componentes U y V de la velocidad (ecuaciones 1 y 2); la componente vertical de la velocidad, W, es obtenida a partir de la ecuación de continuidad para flujo divergente (ecuación 3).

$$\underbrace{\frac{\partial U}{\partial t}}_1 + \underbrace{U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} + W \frac{\partial U}{\partial z}}_2 = - \underbrace{\frac{\rho g \partial \eta}{\rho_o \partial x}}_3 + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left((v_h + D_m) \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((v_h + D_m) \frac{\partial U}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left((v_v + D_m) \frac{\partial U}{\partial z} \right)}_4 - \underbrace{\frac{1}{\rho_o} \frac{\tau_x^v}{\Delta z}}_5 \quad (1)$$

$$\underbrace{\frac{\partial V}{\partial t}}_1 + \underbrace{U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} + W \frac{\partial V}{\partial z}}_2 = - \underbrace{\frac{\rho g \partial \eta}{\rho_o \partial y}}_3 + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left((v_h + D_m) \frac{\partial V}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((v_h + D_m) \frac{\partial V}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left((v_v + D_m) \frac{\partial V}{\partial z} \right)}_4 - \underbrace{\frac{1}{\rho_o} \frac{\tau_y^v}{\Delta z}}_5 \quad (2)$$

$$\frac{\partial W}{\partial z} = - \left(\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} \right) \quad (3)$$

Donde:

- U, V y W = componentes de la velocidad media en las capas verticales (m/s)
- g = aceleración de la gravedad (m/s²)
- ρ = densidad (kg/m³)
- ρ₀ = densidad de referencia (kg/m³)
- η = elevación de la superficie libre del agua (m)
- v_h y v_v = viscosidades cinemáticas horizontal y vertical calculadas en el tiempo y el espacio (m²/s)
- D_m = coeficiente de difusión molecular (m²/s)
- Δz = altura de la celda (m)
- τ_x^v y τ_y^v = esfuerzos cortantes de arrastre en las direcciones x, y (kg/m s²)

En las ecuaciones 1 y 2, el término (1) representa la razón de cambio de la velocidad respecto al tiempo, los términos (2) son los términos advectivos y representan el movimiento del fluido debido a las fuerzas inerciales, el término (3) es la fuerza de presión, representada a través de la variación de la superficie libre, los términos (4) son los esfuerzos viscosos que dan origen a la turbulencia dentro del flujo y el término (5) es el esfuerzo cortante de arrastre debido a la presencia de vegetación, el cual causa una reducción en la velocidad de flujo. Éste último término es igual a cero en las celdas mojadas de cálculo en donde no hay presencia de vegetación.

Modelo de turbulencia. El modelo utilizado para el cálculo del coeficiente de viscosidad turbulenta horizontal y vertical se resume en las ecuaciones 4 y 5, que son una variante del esquema de turbulencia propuesto por Stansby y Lloyd (1995).

$$v_h = \left(I_h^4 \left[2 \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial U}{\partial y} \right)^2 \right] \right)^{1/2} \quad (4)$$

$$v_v = \left(I_v^4 \left[\left(\frac{\partial U}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial z} \right)^2 \right] \right)^{1/2} \quad (5)$$

Donde:

- I_h y I_v = coeficientes de longitud de mezclado horizontal y vertical, respectivamente (m)

Los coeficientes I_h y I_v cambian dependiendo de la presencia o ausencia de plantas en la celda de cálculo. El coeficiente de longitud de mezclado horizontal es usualmente mucho mayor que el coeficiente de longitud de mezclado vertical, en una proporción β, i. e., I_h = β I_v, en este caso β toma un valor de 6 y I_v = 0.9 h, donde h es la profundidad media.

Por otra parte, los esfuerzos de fondo en términos de la ley cuadrática de arrastre son calculados con las ecuaciones 6 y 7:

$$\tau_x^b = \rho_0 C_D^b U \sqrt{U^2 + V^2} \quad (6)$$

$$\tau_y^b = \rho_0 C_D^b V \sqrt{U^2 + V^2} \quad (7)$$

Donde:

C_D^b = coeficiente de arrastre de fondo y es función de la rugosidad relativa del fondo k_s/h y el número de Reynolds.; k_s a su vez se obtiene de la relación $k_s = 0.3048 (m/0.031)^6$, donde m es el coeficiente de Manning, el cual tiene un valor de 0.02.

Una formulación de arrastre es utilizada también para modelar la resistencia por vegetación (Kadlec, 1990), representada por las ecuaciones 8 y 9.

$$\tau_x^v = \frac{1}{2} \rho_0 C_D^v A_i M U \sqrt{U^2 + V^2} \quad (8)$$

$$\tau_y^v = \frac{1}{2} \rho_0 C_D^v A_i M V \sqrt{U^2 + V^2} \quad (9)$$

Donde:

M = la densidad de vegetación por unidad de área ($1/m^2$)

A_i = área efectiva de bloqueo de la planta. (m^2)

El esfuerzo cortante por viento en la superficie libre del agua en las direcciones x y y , $\tau_{\omega x}$ y $\tau_{\omega y}$, está dado por las ecuaciones 10 y 11:

$$v_t \left. \frac{\partial U}{\partial z} \right|_{superficie} = \tau_x^\omega, \quad (10)$$

$$v_t \left. \frac{\partial V}{\partial z} \right|_{superficie} = \tau_y^\omega, \quad (11)$$

Donde:

$$\tau_x^\omega = C_\omega \rho_a \omega_x |\omega_x| \quad \text{y} \quad \tau_y^\omega = C_\omega \rho_a \omega_y |\omega_y|$$

ρ_a = densidad del aire (kg/m^3)

ω_x y ω_y = componentes de velocidad del aire promediadas en el tiempo (m/s).

El coeficiente de arrastre del viento C_ω es calculado mediante la fórmula de Garratt $C_\omega = (0.75 + 0.067\omega) \times 10^{-3}$, donde ω es la magnitud del vector de velocidad del viento 10 m encima de la superficie libre del agua.

Modelo de transporte. Posterior al cálculo hidrodinámico se realiza el cálculo de las concentraciones de variables ambientales, utilizando los campos de flujo que se obtuvieron para alimentar a la ecuación de transporte (ecuación 12).

$$\underbrace{\frac{\partial C}{\partial t}}_1 + \underbrace{U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z}}_2 = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(E_h \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(E_h \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(E_h \frac{\partial C}{\partial z} \right)}_3 \pm \underbrace{\Gamma_c}_4 \quad (12)$$

Donde:

C = concentración (mg/L)

E_h y E_v = coeficientes de difusión horizontal y vertical (m^2/s)

Γ_c = término de reacción ($kg/m^3/s$)

En esta ecuación el término 1 se conoce como el término temporal, los términos marcados con el número 2 representan la advección en las direcciones longitudinal, transversal y vertical; del lado derecho están los términos dispersivos en las tres dimensiones y el término de reacción.

Los coeficientes de difusión son calculados mediante las ecuaciones 13 y 14:

$$E_h = \frac{v_h}{Pr} \quad (13)$$

$$E_v = \frac{v_v}{Pr} \quad (14)$$

Donde:

Pr = número de Prandtl turbulento (adimensional)

El transporte es calculado primero para el movimiento de las sustancias por advección y difusión, y posteriormente para el término de reacción. Cabe mencionar que el término de reacción de ésta ecuación es particular para cada contaminante y es calculado haciendo una diferencia entre las zonas con y sin vegetación; cuando la variable calculada tiene interacción con la vegetación estas interacciones son calculadas únicamente en la zona con presencia de plantas, mientras el resto de los procesos (decaimiento, sedimentación, resuspensión, intercambio atmosférico, etc.) sí son calculados en todo el dominio.

Término de reacción para la Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO). En base a las consideraciones de cinética de reacciones, el modelo matemático utilizado para calcular la concentración de la DBO corresponde a una reacción de primer orden, en donde hay una proporcionalidad entre el grado de utilización de oxígeno y la degradación de materia orgánica por oxidación biológica, la ecuación puede escribirse en función de la concentración en materia orgánica, de tal forma que, el término de reacción que se resuelve en la ecuación 12 para la DBO resulta:

$$\Gamma_{DBO} = \frac{dDBO}{dt} = -K_D \Theta^{(T-20)} \left(\frac{OD}{K_{DBO} + OD} \right) DBO - \underbrace{V_{s3} (1-f_{DS}) DBO}_{\text{Término de reaireación}} \quad (15)$$

Donde:

- DBO = concentración de la DBO (mg/L)
- OD = concentración de OD (mg/L)
- K_D = tasa de desoxygenación (1/s)
- $\Theta^{(T-20)}$ = expresión de Arrhenius para la corrección de la constante cinética a la temperatura deseada.
- T = temperatura (°C)
- K_{DBO} = constante de saturación media de Oxígeno (mg/L)
- V_{s3} = velocidad de de sedimentación (m/s)
- f_{DS} = fracción disuelta de DBO (adimensional)
- D = profundidad (m)

Término de reacción para el Oxígeno Disuelto (OD). El OD en el agua es un elemento primordial para la existencia de la biota acuática. En los ecosistemas acuáticos procede principalmente de dos fuentes: de la atmosférica y de su generación por los productores primarios

Una causa común del agotamiento del oxígeno es la eutrofización, causada por una cantidad elevada de nutrientes. Los productores primarios generan oxígeno pero también lo consumen durante la noche por la respiración.

En ecosistemas acuáticos como lagos y lagunas el oxígeno puede presentar una distribución vertical, disminuyendo su presencia en la medida que se aproxima el fondo.

Para el oxígeno disuelto también se implementó el mecanismo de reacción propuesto en el modelo WASP (Wool *et al*, 2001), con una corrección para la respiración de las macrofitas y para la demanda por crecimiento de la biomasa de las mismas propuesto por Bezbaruah (Bezbaruah & Zhang, 2009). De esta forma el término reactivo en la ecuación 12 para el OD resulta:

$$\Gamma_{OD} = \frac{dOD}{dt} = \underbrace{K_2 (C_s - OD)}_{\text{Término de reaireación}} - K_d \Theta^{(T-20)} \left(\frac{OD}{K_{DBO} + OD} \right) DBO - \underbrace{\frac{SOD}{D} \Theta^{(T-20)}}_{\text{Demanda de oxígeno por los sedimentos}} + \underbrace{K_R (C_s - OD)}_{\text{Término de reaireación por las raíces de las plantas}} - \underbrace{r_{BM}}_{\text{Término de demanda de oxígeno por crecimiento de la biomasa}} \quad (16)$$

Donde:

- K_2 = constante de reaireación (1/s)
- C_s = concentración de saturación de oxígeno (mg/L)
- SOD = demanda de oxígeno de los sedimentos (g/m²día)
- K_R = constante de reaireación de las plantas (1/s)
- r_{BM} = tasa de demanda de oxígeno de la biomasa (mg/L s)

Solución Numérica. La solución numérica de las ecuaciones del modelo se realiza mediante un esquema semi-implícito en diferencias finitas para la variación temporal y una malla tipo *staggered cell* para la variación espacial. En este tipo de mallado las cantidades vectoriales se colocan en las caras de las celdas y los escalares se ubican en los centros de las celdas, la figura 1 muestra la discretización en diferencias finitas para una malla 2D (a) y una malla 3D (b).

RESULTADOS

Para probar la resistencia al flujo causada por vegetación y el transporte de concentraciones, se diseñó un escenario teórico en el que realizó la simulación. Este escenario propone una primera zona de flujo libre, seguida de una zona de vegetación a manera de barrera y finalmente una zona donde el agua fluye libremente otra vez.

Diseño del Experimento Numérico. El dominio de cálculo se planteó de 10 km de largo por 5 km de ancho, con una profundidad de 1.2 m. La figura 2 representa el dominio en esquema.

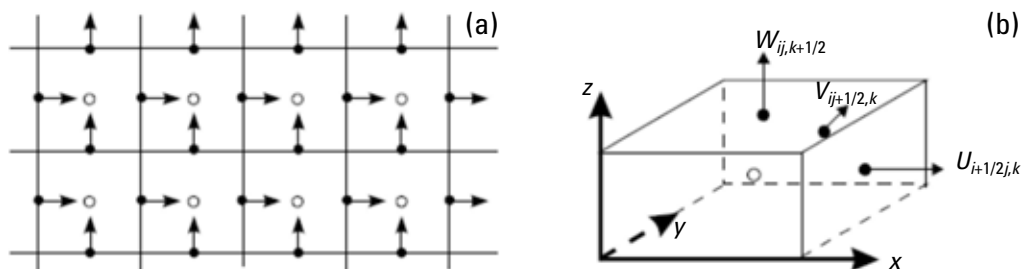


Figura 1 a-b. Discretización en diferencias finitas (a) Malla bidimensional y (b) Malla tridimensional.

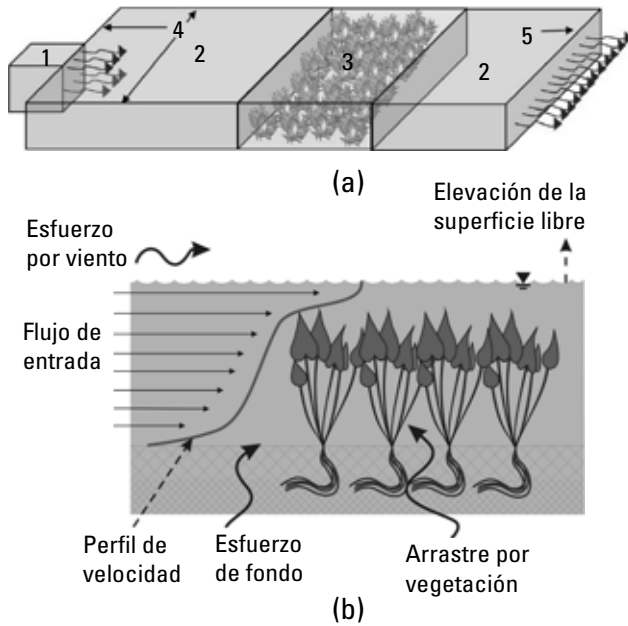


Figura 2a-b. (a) Esquema del dominio teórico. (b) esquema de las variables a calcular.

En la figura 2a el número 1 representa la entrada de un jet, el número 2 señala las zonas inundadas donde el flujo es libre, la primera ocupa el 50% del dominio y la segunda zona de flujo libre ocupa los últimos 2.5 km. La zona con vegetación (señalada con el número 3) mide 2.5 km, el número 4 representa las paredes rígidas o fronteras sólidas y el número 5 la salida del flujo que ocupa toda la pared derecha del dominio.

En la zona con vegetación las plantas se encuentran sumergidas, la altura de las mismas es de 72 cm, por lo cual el perfil vertical de velocidades se puede dividir en dos, la capa donde la vegetación afecta al flujo y una capa superior donde el flujo está libre de fricción por plantas. La figura 2b esquematiza el perfil vertical de velocidades y las principales variables que se toman en cuenta en el modelo.

Condiciones Iniciales y de Frontera. El sistema se inicializó con una velocidad de 0.1 m/s en todo el dominio y el jet que ingresa al dominio lleva una velocidad de 1 m/s. La concentración de DBO con la que se inicializa el modelo es de 2 mg/L (ppm) y como condición inicial de OD se impone la concentración de saturación, asumiendo que el sistema se encuentra "limpio" y el jet ingresa con una carga de contaminación considerable, con el objeto de ver como se dispersa/reacciona en el sistema, ésta carga se fijó en 35 mg/L.

Los valores de los parámetros de las ecuaciones se calibraron para la simulación del sistema en estudio y sus valores se enlistan en la Tabla 1.

Tabla 1. Variables y Valores Considerados en las simulaciones numéricas.

Variable	Valor	Descripción o Referencia
ρ	ρ_0	
ρ_0	1000 kg/m ³	densidad del agua
g	9.8 m/s ²	aceleración de la gravedad terrestre
T	20°C	temperatura ambiente
Δz	0.24m	altura de las capas en la dirección vertical
D_m	0.0001 m ² /s	difusión molecular del agua
Pr	0.9	Ryeol, (2001)
M	3 plantas/m ²	impuesta por los desarrolladores
A_i	0.368 m ²	Freeman <i>et al.</i> , (2000)
C_s	8.6 mg/L	Wool <i>et al.</i> , (2001)
K_D	0.18 1/s	Wool <i>et al.</i> , (2001)
K_{DBO}	0.5 mg/L	Wool <i>et al.</i> , (2001)
V_{s3}	0.1 m/s	Wool <i>et al.</i> , (2001)
f_{DS}	0.5	Wool <i>et al.</i> , (2001)
K_2	1.028 1/día	Wool <i>et al.</i> , (2001)
SOD	0.21 g/m ² día	Wool <i>et al.</i> , (2001)
K_R	0.235 1/día	Bezbarua & Zhang, (2009)
r_{BM}	5 mg/L día	Bezbarua & Zhang, (2009)

La malla se diseñó para tener celdas uniformes de dimensiones 100 m × 100 m, obteniendo un total de 100 celdas activas en el eje longitudinal y 50 en el eje transversal. En la dirección vertical se generaron 5 capas verticales de 0.24 m de espesor. En las fronteras rígidas se aplicó la condición de Dirchlet y en la salida de flujo se utilizó la condición tipo Newmann. El paso de tiempo de cálculo se fijó en 10 segundos.

Simulación de la Hidrodinámica. Los resultados del modelo se presentan a continuación (Fig. 3), iniciando con los campos de velocidades en un corte horizontal a 60 cm. de profundidad, es decir, en la capa de fondo, donde el flujo es afectado por la presencia de vegetación.

Simulación del transporte de la DBO y el OD. En la figura 4 se muestran los resultados obtenidos para el comportamiento de la DBO y del OD en un corte horizontal a 60 cm. de profundidad, donde el flujo es afectado por la presencia de vegetación (Fig. 4).

En la figura 5 se muestran los resultados obtenidos mediante el modelo sobre el comportamiento de la DBO y del OD sobre la superficie libre del agua, es decir, la cara superficial de la capa que no presenta resistencia al flujo (Fig. 5).

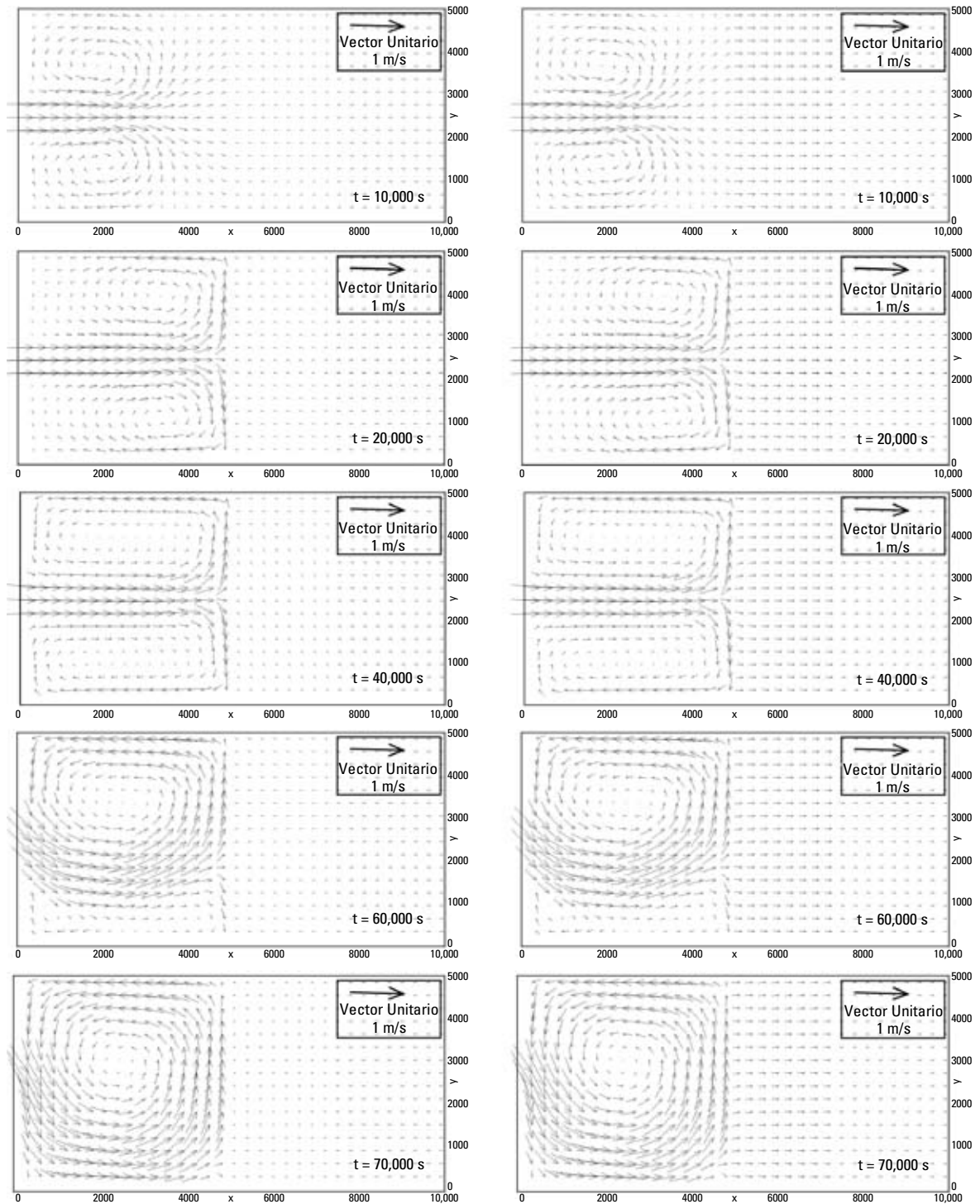


Figura 3. Campo vectorial de velocidades a los 60 cm de profundidad (izq.) y sobre la superficie libre (der.) a los 10,000 s, 20,000 s, 40,000 s, 60,000 s y 70,000 s.

Validación y justificación de los resultados. Para la validación del transporte se hizo uso de la expresión analítica de la ecuación de transporte unidimensional, la cual fue comparada con perfiles longitudinales a todo lo largo del dominio. Para ésta validación se

realizó el cálculo de las concentraciones en 2 pasos. El primero considerando transporte escalar en un flujo uniforme en estado estable cumpliendo con las restricciones de $0.5 \leq Cu < 1$ y $Pe \approx 1.5$ (Cu y Pe , son los números adimensionales de Courant y Peclet

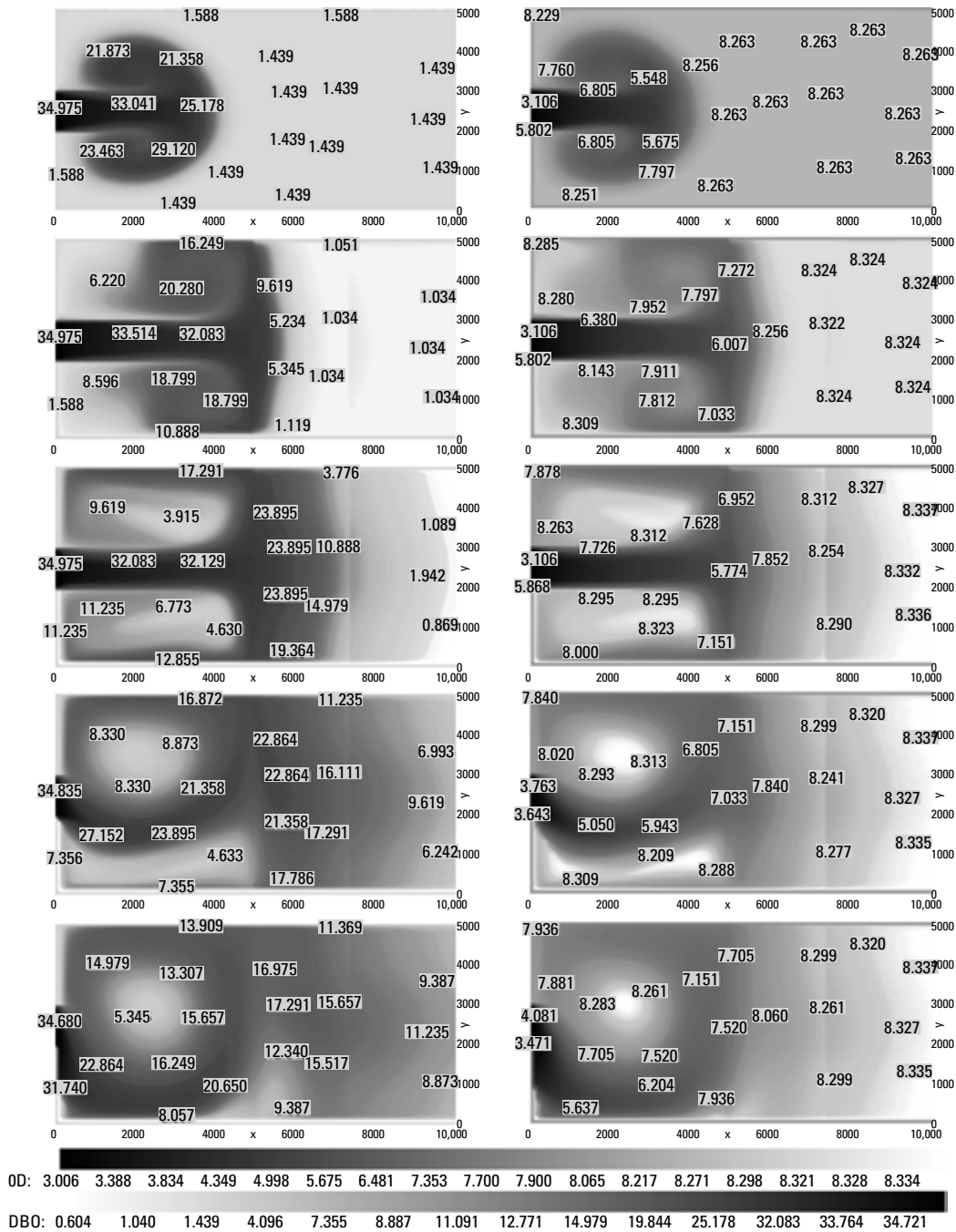


Figura 4. Evolución de la DBO (izq.) y del OD (der.) en la capa con vegetación.

respectivamente) como lo señalan Torres y Ramírez (2007), para ello se resuelve la ecuación de transporte escalar (ecuación 17), la cual tiene solución analítica (ecuación 18); y, en serie, se resuelve un segundo paso en el que se calcula el mecanismo de reacción propuesto por Streeter-Phelps (ecuaciones 19 y 23), el cual tiene como soluciones analíticas las ecuaciones 20 y 24, y utilizando como concentración de entrada el resultado obtenido del transporte escalar. Las ecuaciones 21 y 22 son los procesos

del OD, sin embargo, son representados como déficit de oxígeno (D). El modelo de Streeter-Phelps tiene solución analítica y es representado por las ecuaciones 22 y 23. Así, las soluciones analíticas fueron empleadas para calcular la concentración a todo lo largo del dominio, empleando un $\Delta x = 100$ m y un $\Delta t = 1$ s.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_L \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (17)$$

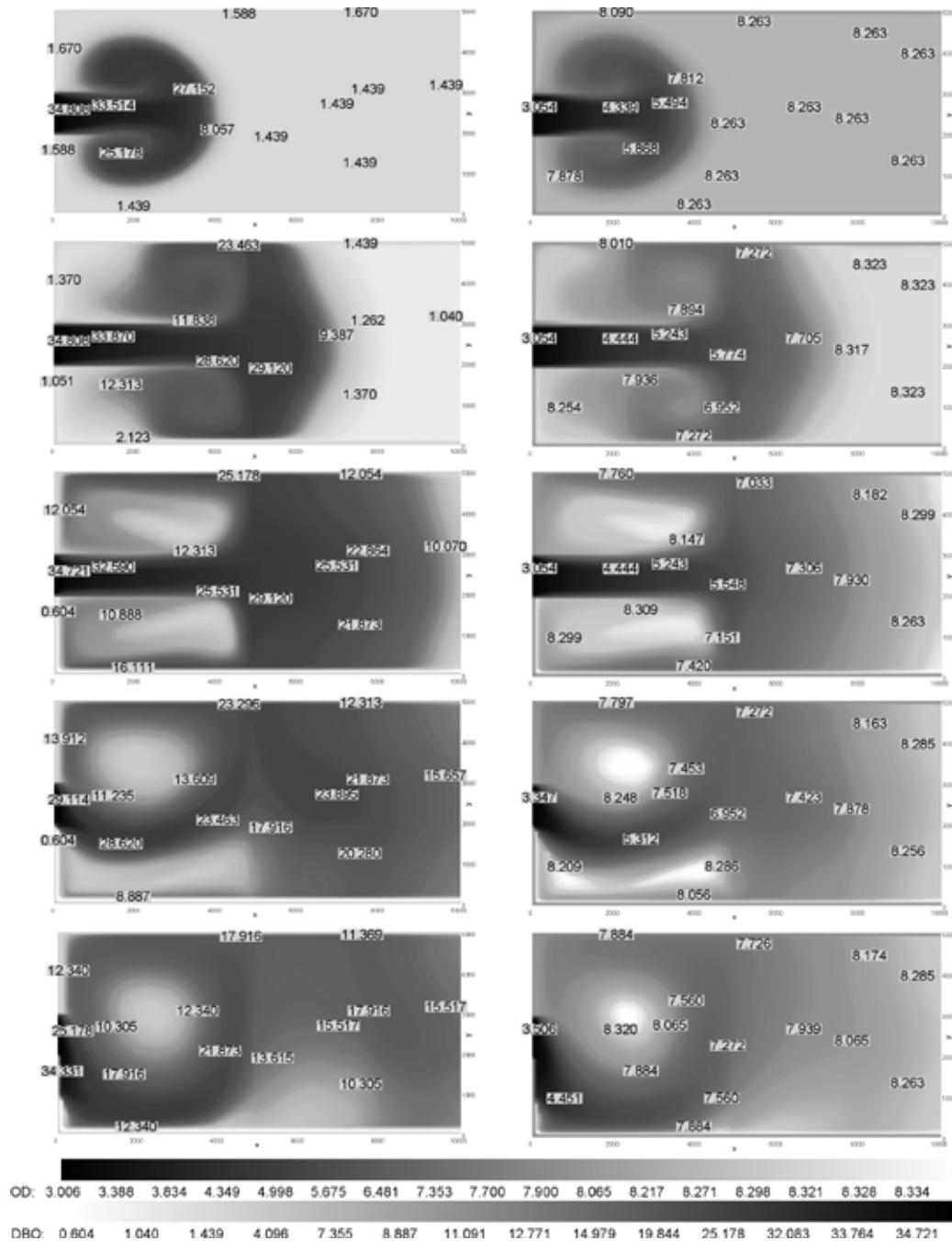


Figura 5. Evolución de la DBO (izq.) y del OD (der.) en la capa sin vegetación.

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - Ut}{2\sqrt{D_L t}} \right) + \operatorname{erfc} \left(\frac{x + Ut}{2\sqrt{D_L t}} \right) \exp \left(\frac{Ux}{D_L} \right) \right] \quad (18)$$

Donde:

C_0 = Concentración inicial del compuesto que se transporta (mg/L)

Modelo para DBO:

$$\frac{d[DBO]}{dt} = -k_1 [DBO] \quad (19)$$

Donde:

k_1 = constante cinética (1/s)

Solución analítica para la DBO:

$$[DBO] = [DBO]_0 \exp(-k_1 t) \quad (20)$$

Donde:

$[DBO]_0$ = concentración inicial de DBO (mg/L)

Modelo para OD:

Desoxigenación:

$$\frac{d[DO]}{dt} = -k_1 [DBO] \quad (21)$$

Reaeración:

$$\frac{d[DO]}{dt} = k_2 (C_s - [DO]) \quad (22)$$

Streeter y Phelps lo expresan en términos del déficit (D):

$$\frac{d[D]}{dt} = k_1 [DBO] - k_2 [D] \quad (23)$$

Solución analítica para el OD:

$$D = \frac{k_1 [DBO]_0}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) + [D]_0 e^{-k_2 t} \quad (24)$$

Donde:

$[D]_0$ = déficit inicial de oxígeno (mg/L)

Los resultados obtenidos con las simulaciones y con las soluciones analíticas fueron comparados para comprobar la validez de los resultados.

Los datos de velocidad para alimentar a la solución de la reacción fueron tomados de las velocidades obtenidas mediante el cálculo hidrodinámico. Siendo éstas 1 m/s al inicio del perfil, una disminución del 4% al inicio de la zona con vegetación (a los 5000 m) y llegando a una disminución del 80% a los 7000 m. Para la solución del transporte se utilizó un valor del coeficiente de

dispersión de 200 m²/s, un Δx de 100 m y se realizaron cálculos cada 10 s para comparar los comportamientos. Para que los resultados fueran comparables, a partir de los 5000 m se incrementó el valor de la variable de reaeración por el valor obtenido de la suma de la constante cinética de reaeración y la constante de respiración de las plantas. Para ambos cálculos se introdujo una concentración inicial de 35 mg/L de DBO y 3 mg/L de OD.

Se eligió el tiempo de 20000 s, debido a que es el momento en que la descarga ha alcanzado a la zona con vegetación y continúa siendo un flujo estable y es claramente dominado por la advección. La figura 6 muestra el perfil longitudinal obtenido con el modelo y con la solución analítica en el centro del dominio y a 60 cm de profundidad a los 20,000 s.

La figura 7 muestra el perfil longitudinal obtenido con el modelo y con la solución analítica en el centro del dominio, sobre la superficie libre del agua a 20,000 s.

DISCUSIÓN

En la figura 3 se muestran los vectores de velocidad resultante para la capa superficial y para la capa intermedia en la vertical. En ésta se aprecia el cambio en el comportamiento del jet al chocar con la zona vegetada. Se puede ver una disminución en la magnitud de las velocidades y la generación de un gran vórtice en la zona anterior al espacio con vegetación.

En la zona intermedia las plantas bloquean el flujo a partir de los 5000 m y hasta los 7500 m en la capa intermedia (verticalmente). En esta capa se puede observar la restricción al flujo que impone la vegetación. En la capa superficial las plantas no bloquean al flujo, tan solo generan fricción al tomar el papel de fondo de esta capa. A partir de los 7500 m el flujo es libre y se nota un aumento en la velocidad, además de la velocidad que se agrega por el flujo libre que se encuentra en las capas superficiales.

Con la disminución de la velocidad en la zona vegetada, se genera una sobre-elevación de la superficie libre del agua en la parte anterior a esta zona, debido a que se continúa inyectando

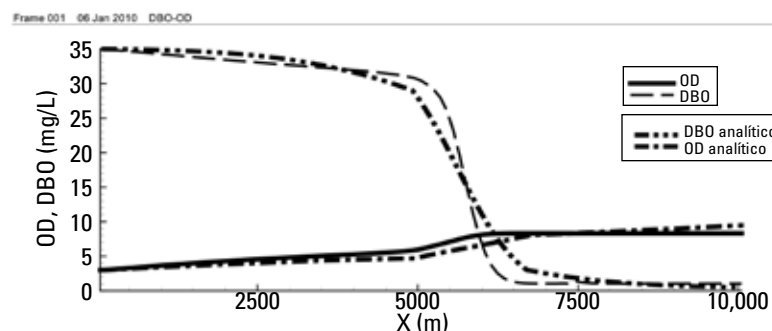


Figura 6. Perfil longitudinal obtenido con el modelo y obtenido mediante solución analítica a los 20,000 s.

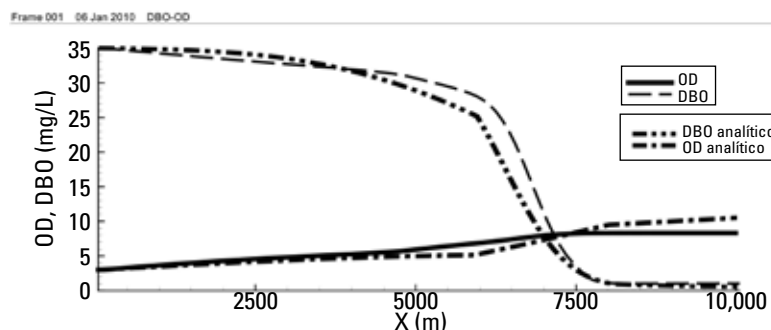


Figura 7. Perfil longitudinal obtenido con el modelo y obtenido mediante solución analítica a los 20,000 s.

constantemente un volumen de agua que no puede fluir libremente. Esta sobre-elevación tiene una magnitud máxima de 5.6 cm, la cual provoca un incremento en la velocidad del 5 al 6% en las capas que se encuentran sobre la zona vegetada. Estos efectos son puramente locales y no interfieren sustancialmente en el comportamiento global del flujo.

Las figuras 4 y 5 muestran el comportamiento de las concentraciones de DBO y OD en el tiempo. En estas figuras se observa que la ruta de las sustancias tiene similitud con el patrón hidrodinámico.

Debido a que el flujo es disminuido en la zona con vegetación, la concentración de la DBO disminuye debido a que el tiempo de residencia es mayor y tiene más tiempo para oxidar la materia orgánica, mientras que la concentración de OD aumenta debido a la reaeración producida por el intercambio atmosférico y la respiración de las plantas. Éste fenómeno se puede apreciar tanto en la capa intermedia como en la capa superficial del sistema. Sin embargo, en la capa superficial el aumento de concentración del OD (y la consecuente disminución de la concentración de DBO) es menor, debido a que en la superficie el flujo se encuentra libre de obstáculos y no disminuye su velocidad en la misma medida que en la capa intermedia, provocando que las sustancias sean arrastradas fuera de la zona vegetada con mayor rapidez, con lo cual se obtiene un menor tiempo de residencia en la zona de alta reaeración.

De lo anterior se puede concluir que, los resultados hidrodinámicos y de transporte de contaminantes que se presentan en este trabajo fueron calculados en 3 dimensiones, sin embargo, muestran una gran similitud con los resultados obtenidos a partir de las soluciones analíticas del transporte unidimensional y del mecanismo reactivo de las sustancias que se seleccionaron. Las diferencias que se encontraron se deben en parte a que los mecanismos de reacción utilizados incluyen, para el caso de la DBO, la velocidad de sedimentación y, para el caso del OD, las interacciones con la vegetación (reaeración por respiración y la demanda de oxígeno de la biomasa); y en el mecanismo propuesto por Streeter y Phelps solo se incluye a la reaeración (por

contacto con la atmósfera) y el decaimiento de la DBO por deoxigenación, disminuyendo con esto la precisión de la solución; además de que en sistemas en donde se encuentran obstáculos presentes (plantas en este caso), la difusión (tanto vertical como horizontal) toman un papel muy importante en el comportamiento del fluido. Aunque la solución unidimensional concuerda con el perfil longitudinal calculado con el modelo, es conveniente realizar un cálculo de mayor nivel de precisión cuando se quieren obtener tendencias del comportamiento de los contaminantes, ya que ésta provee resultados en el punto donde deseamos conocer la concentración y utilizando solo una componente de la velocidad (componente longitudinal), sin embargo, en la realidad, las descargas son más complejas y se puede dar el caso en que la vorticalidad tome mayor importancia en la trayectoria del flujo y no sea un flujo estable y/o laminar, como en el ejemplo que se presenta (cuando el jet comienza a cambiar de dirección formando un solo vórtice que se estabiliza y permanece).

El modelo desarrollado presenta resultados óptimos para representar el comportamiento del transporte de contaminantes en flujos con presencia de vegetación, incluyendo las transformaciones químicas que dichos contaminantes experimentan a lo largo del flujo. Toda la metodología presentada se puede aplicar a la gran variedad de ecosistemas que tienen presencia de vegetación (principalmente los humedales), siendo capaz de predecir la ruta y destino de la contaminación.

Actualmente se están desarrollando los modelos de reacción para otros compuestos de relevancia para la evaluación de la calidad del agua (eutroficación y toxicidad), todos los mecanismos de reacción se pueden encontrar en González-López (2011).

REFERENCIAS

- AREGA, F. & B. F. SANDERS. 2004. Dispersion Model for Tidal Wetlands. *Journal of Hydraulic Engineering* 130 (8): 739-754.
- BEZBURAH, A. N. & T. C. ZHANG. 2009. Incorporation of oxygen contribution by plant roots into classical dissolved oxygen deficit model for subsurface flow treatment wetland. *Water Science and Technology* 59 (6): 1179-1184.

- CERCO, C. F. & T. COLE. 1995. *User's Guide to the CE-QUAL-ICM Three-Dimensional Eutrophication Model*. U.S. Army Corps of Engineers, Technical Report EL-95-15.
- FENNEMA, R. J., C. J. NEIDRAUER, R. A. JOHNSON, T. K. MACVICOR & W. A. PERKINS. 1994. *A computer model to simulate natural Everglades hydrology. Everglades, The Ecosystem and its restoration*. Eds. Davis, S. M. and Ogden, J. C. St. Lucie Press, Florida, pp. 249-289.
- FREEMAN, G. E., W. J. RAHMEYER & R. R. COPELAND. 2000. *Determination of resistance due to shrubs and woody vegetation - Final Report*. Coastal and Hydraulics Laboratory, US Army Corps of Engineers, pp. 5-23.
- GONZÁLEZ-LÓPEZ, R. 2011. Evaluación Integral Ambiental de Humedales vinculados a la industria del Petróleo. Tesis de Doctorado en Ciencias, Instituto Mexicano del Petróleo, a sustentarse en 2011.
- JÄRVELÄ, J. 2004. Effect of submerged flexible vegetation on flow structure and resistance. *Journal of Hydrology* 307: 233-241.
- KADLEC, R. H. 1990. Overland flow in wetlands: Vegetation resistance. *Journal of Hydraulic Engineering* 116 (5): 691-706.
- KAZEZYILMAZ-ALHAN, C. M., M. A. MEDINA & C. J. RICHARDSON. 2007. A wetland hydrology and Water Quality Model incorporating water/ground-water interactions. *Water Resources Research* 43 (4): 1-16.
- LAL, W. 1998. A weighted implicit finite volume model for overland flow. *Journal of Hydraulic Engineering* 24 (9): 941-950
- ROWINSKI, P. M. & J. KUBRAK. 2002. A mixing-length model for predicting vertical velocity distribution in flows through emergent vegetation. *Hydrological Sciences-Journal* 47 (6): 893-904.
- RYEOL SEO, E. 2001. A numerical study of buoyant turbulent flows using low-Reynolds number k-ε model. Tesis de Doctorado en Filosofía, Graduate Faculty. Texas Tech University. 72 p.
- STANSBY, P. K. & P. M. LLOYD. 1995. A semi-implicit lagrangian scheme for 3D shallow water flow with a two-layer turbulence model. *International Journal for numerical methods in fluids* 20: 115-133.
- STONE, B. M. & H. T. SHEN. 2002. Hydraulic Resistance of Flow in Channels with Cylindrical Roughness. *Journal of Hydraulic Engineering* 128 (5): 500-506.
- USEPA. 2008. Nutrient Criteria - Technical Guidance Manual - Wetlands. Office of Water, United States Environmental Protection Agency. EPA-822-B-08-001. pp. 2-1, 2-4.
- TORRES-BEJARANO, F. & H. RAMÍREZ-LEÓN. 2007. El programa Anaite para el estudio de la dinámica y la calidad del agua en cauces naturales con pendiente suave. *Revista Internacional de Contaminación Ambiental* 23: 115-127.
- WOOL, T. A., R. B. AMBROSE, J. L. MARTIN & E. A. COMER. 2001. *Water Quality Analysis Simulation Program (WASP) User's Manual Version 6.0*. USEPA.
- YOON-YOUNG, C. & M. Y. CAROPACIOGLU. 1998. Plant Enhanced Subsurface bioremediation of nonvolatile hydrocarbons. *Journal of Environmental Engineering* 124 (2): 162-169.

Recibido: 16 de marzo del 2010.

Aceptado: 20 de junio de 2011.