

**MODELACIÓN DEL TRANSPORTE DE SOLUTO EN RÍOS DE MONTAÑA; UNA
MIRADA CFD APLICADA**

JUAN DAVID VÁSQUEZ ISAZA

Trabajo de grado para optar al título de Ingeniero Civil

**Director
LUIS JAVIER MONTOYA JARAMILLO
Doctor en Ingeniería (Universidad Nacional)**

**UNIVERSIDAD EAFIT
ESCUELA DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA CIVIL
MEDELLÍN
2013**

**MODELACIÓN DEL TRANSPORTE DE SOLUTO EN RÍOS DE MONTAÑA; UNA
MIRADA CFD APLICADA**

JUAN DAVID VÁSQUEZ ISAZA

Trabajo de grado para optar al título de Ingeniero Civil

**Director
LUIS JAVIER MONTOYA JARAMILLO
Doctor en Ingeniería (Universidad Nacional)**

**UNIVERSIDAD EAFIT
ESCUELA DE INGENIERÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA CIVIL
MEDELLÍN
2013**

Nota de aceptación:

Presidente del Jurado

Jurado

Jurado

Medellín, Junio de 2013

AGRADECIMIENTOS

Primero a Dios por poner en mi camino a todas estas personas que han contribuido en mi formación como humano. A mis padres, por todo el amor y esfuerzo desinteresado, ellos saben qué significa para mí. A mis dos hermanas por la amistad y apoyo en todas las circunstancias y a los amigos que llenaron de alegría mi vida.

A mi asesor Luis Fernando Montoya por la paciencia y las correcciones con un carácter práctico y minucioso que me ayudaron a concretar este proyecto de grado.

A la Universidad EAFIT por todas las oportunidades brindadas. Y por último, a todos y cada uno de los profesores que pasaron por mi formación, les doy gracias por sus exigencias y paciencia.

CONTENIDO

| | pag. |
|---|-------------|
| INTRODUCCIÓN | 13 |
| 1. DESARROLLO DEL TRABAJO | 17 |
| 1.1 ANTECEDENTES Y ALCANCES..... | 17 |
| 1.2 METODOLOGÍA..... | 19 |
| 1.3 OBJETIVOS | 23 |
| 1.3.1 Objetivo General.. | 23 |
| 1.3.2 Objetivos Específicos..... | 23 |
| 1.4 PRODUCTOS ESPERADOS | 23 |
| 1.5 JUSTIFICACIÓN | 24 |
| 2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA | 25 |
| 2.1 FENÓMENO DE TRANSPORTE DE SOLUTO (ADVECCIÓN Y DIFUSIÓN). 25 | |
| 2.2 CARACTERÍSTICAS GEOMORFOLÓGICAS E HIDRAULICAS EN RÍOS DE MONTAÑA | 31 |
| 2.2.1 Características geomorfológicas | 31 |
| 2.2.1.1 Pendiente longitudinal. | 32 |
| 2.2.1.2 Forma de fondo. | 32 |
| 2.2.1.3 Tamaño de los sedimentos. | 34 |
| 2.2.1.4 Transporte sólido..... | 34 |
| 2.2.2. Características hidráulicas. | 35 |
| 2.2.2.1 Categoría de flujo en áreas de montaña. | 35 |
| 2.2.2.2 Características hidráulicas en flujo de baja concentración..... | 35 |
| 2.3 MODELOS PARA LA PREDICCIÓN DE TRANSPORTE DE SOLUTO EN RÍOS DE MONTAÑA..... | 36 |
| 2.3.1 Modelo advección-difusión (ADE). | 37 |
| 2.3.2 Modelo almacenamiento transitorio (TS)..... | 39 |

| | |
|--|----|
| 2.4 CÁLCULO DE COEFICIENTES DE TRANSPORTE..... | 40 |
| 3. SOLUCIÓN COMPUTACIONAL AL PROBLEMA DE TRANSPORTE DE SOLUTO POR ADVECCIÓN Y DIFUSIÓN | 43 |
| 3.1 MÉTODO DE LAS DIFERENCIAS FINITAS | 43 |
| 3.1.1 Discretización del dominio computacional..... | 44 |
| 3.1.2 Discretización las ecuaciones diferenciales parciales. | 44 |
| 3.2 PRESENTACIÓN DE ESQUEMAS NUMÉRICOS | 47 |
| 3.2.1 Generalidades de la Consistencia, estabilidad numérica y convergencia. ... | 47 |
| 3.2.1.1 Consistencia..... | 47 |
| 3.2.1.2 Estabilidad numérica. | 47 |
| 3.2.1.3 Convergencia. | 48 |
| 3.2.2 Esquemas numéricos..... | 48 |
| 3.2.2.1 Ecuación de advección..... | 48 |
| 3.2.2.2 Ecuación de difusión. | 49 |
| 3.2.2.3 Ecuación de transporte..... | 50 |
| 3.2.2.4 Esquema explícito QUICKEST..... | 52 |
| 3.2.2.5 Esquema implícito de Crank- Nicholson. | 53 |
| 3.2.2.6 Desarrollo de las expresiones algebraicas de la ecuación de transporte. . | 53 |
| 3.3 VERIFICACIÓN, ANÁLISIS Y COMPARACIÓN DE LAS ECUACIONES EN DIFERENCIAS FINITAS VS LA ECUACIÓN ANALÍTICA | 55 |
| 3.3.1 verificación y análisis de la molécula de advección..... | 56 |
| 3.3.2 Verificación y análisis de la molécula de difusión..... | 57 |
| 3.3.3 Verificación y análisis de la ecuación en diferencias finitas de advección-difusión. | 60 |
| 4. DESCRIPCIÓN DE LOS TRAMOS DE ESTUDIO Y ENSAYOS DE CAMPO PARA LA QUEBRADA LA VOLCANA..... | 63 |
| 4.1 DESCRIPCION DE LOS TRAMOS DE ESTUDIO | 63 |
| 4.1.1 Ubicación geográfica y descripción general a lo largo del cauce. | 63 |
| 4.1.2 Descripción tramo de estudio Universidad EAFIT | 67 |
| 4.1.2.1 Descripción general..... | 67 |

| | |
|---|-----|
| 4.1.2.2 Pendiente y geomorfología..... | 69 |
| 4.1.3 Descripción del tramo de estudio 2 (aguas arriba carrera 32)..... | 71 |
| 4.2 ENSAYOS DE CAMPO..... | 72 |
| 4.3 INFORMACIÓN DE OTRAS FUENTES..... | 75 |
| 5. MODELACIÓN CON LOS DIFERENTES MÉTODOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS..... | 77 |
| 5.1 EVALUACIÓN DE LOS COEFICIENTES DE TRANSPORTE..... | 77 |
| 5.2 USO DEL MODELO ADE PARA PREDECIR EL TRANSPORTE DE SOLUTO EN LOS DIFERENTES TRAMOS..... | 78 |
| 5.1.1 Tramos Universidad Eafit y Transversal Inferior..... | 79 |
| 5.1.1.1 Tramo Universidad EAFIT..... | 80 |
| 5.1.1.2 Tramo Transversal Inferior..... | 83 |
| 5.1.2 Tramo Río Teusacá..... | 86 |
| 5.1.2.1 Modelación desde las condiciones iniciales en el sitio de medición N _o 1 hasta el sitio de medición N _o 2..... | 89 |
| 5.1.2.2 Modelación desde las condiciones iniciales en el sitio de medición N _o 2 hasta el sitio de medición N _o 3..... | 92 |
| 5.1.2.3 Modelación desde las condiciones iniciales en el sitio de medición N _o 1 hasta el sitio de medición N _o 3..... | 94 |
| 5.2 CONTRASTE ENTRE EL MODELO ADE Y EL MODELO TS PARA PREDECIR EL TRANSPORTE DE SOLUTO; RÍO TEUSACÁ..... | 99 |
| 6. CONCLUSIONES..... | 105 |
| 7. RECOMENDACIONES..... | 107 |
| BIBLIOGRAFÍA..... | 109 |
| APÉNDICE A..... | 111 |
| APÉNDICE B..... | 119 |

LISTA DE TABLAS

| | pag. |
|---|------|
| Tabla 1. Estarcidos de los diferentes operadores en diferencia..... | 46 |
| Tabla 2. Error porcentual y numero de pasos (NP) para las modelaciones con $Cr = 0.7$, $Cr = 0.25$ en comparación con el valor analítico de $Cr = 1$ | 57 |
| Tabla 3. Error porcentual y numero de pasos (NP) para las modelaciones con $Ne = 0.4$ en comparación con el valor analítico de la ecuación analítica (2.13).... | 59 |
| Tabla 4. Error porcentual y numero de pasos (NP) para las modelaciones con $Ne = 1/6$ en comparación con el valor analítico de la ecuación analítica (2.13)... | 60 |
| Tabla 5. Características generales, error porcentual y número de pasos (NP) para las modelaciones los diferentes métodos numéricos vs la ecuación analítica. | 61 |
| Tabla 6. Datos requeridos por la modelación y coeficientes para evaluar el comportamiento de los modelos matemáticos. Universidad EAFIT. | 80 |
| Tabla 7. Datos requeridos por la modelación para evaluar el comportamiento de los modelos matemáticos en la Transversal Inferior. | 84 |
| Tabla 8. Coeficientes de difusión y parámetro del error para analizar las modelaciones en los diferentes tramos. | 86 |
| Tabla 9. Características puntuales de los experimentos realizados con trazadores ejecutados en el tramo La Calera en el Río Teusacá..... | 88 |
| Tabla 10. Datos de entrada obtenidos en campo necesarios para realizar la modelación de transporte de soluto entre la estación 1 y estación 2. | 89 |
| Tabla 11. Datos de entrada obtenidos en campo necesarios para realizar la modelación de transporte de soluto entre la estación 2 y estación 3. | 92 |
| Tabla 12. Datos de entrada obtenidos en campo necesarios para realizar la modelación de transporte de soluto entre la estación 1 y estación 3. | 95 |
| Tabla 13. Coeficientes de difusión, parámetro del error y descripción del tramo para analizar las modelaciones en los diferentes tramos..... | 97 |

| | |
|---|-----|
| Tabla 14. Datos calibrados para realizar la modelación de transporte de soluto en los diferentes tramos del Río Teusacá. Modelo TS..... | 100 |
| Tabla 15. Parámetros estadísticos para comparar los modelos matemáticos TS y ADE en los diferentes tramos del Río Teusacá..... | 102 |
| Tabla 16. Ubicación de las estaciones de medida, pendiente y ancho superficial del tramo de estudio dos. | 115 |
| Tabla 17. Características del conductímetro. | 117 |
| Tabla 18. Coeficiente de correlación..... | 117 |

LISTA DE FIGURAS

| | pag. |
|--|------|
| Figura 1. Ubicada aguas arriba de la transversal superior, tramo conformado por secuencia escalón- pozo. | 14 |
| Figura 2. Transporte de un soluto por difusión molecular en el interior del cuerpo del agua en reposo..... | 25 |
| Figura 3. Componentes de flujo en un volumen infinitesimal en el interior del canal prismático. | 29 |
| Figura 4. Descripción longitudinal del tramo de análisis y ubicación de sus estaciones de modelación..... | 55 |
| Figura 5. Modelaciones con $Cr = 0.7$, $Cr = 0.25$ en comparación con el valor analítico de $Cr = 1$ | 56 |
| Figura 6. Modelación con la ecuación en diferencias finitas para la difusión, con un $Ne=0.4$ y para los tiempos 2 s y 5 s. | 58 |
| Figura 7. Modelación con la ecuación en diferencias finitas para la difusión, con un $Ne=1/6$ y para los tiempos 2 s y 5 s. | 59 |
| Figura 8. Modelaciones para los esquemas numéricos Upwind, QUICKEST y Crank Nicholson contra la ecuación analítica. | 61 |
| Figura 9. Colombia, departamento de Antioquia..... | 63 |
| Figura 10. Departamento de Antioquia área metropolitana del Valle de Aburrá..... | 64 |
| Figura 11. Municipio de Medellín, comuna El Poblado Microcuenca quebrada La Volcana. | 64 |
| Figura 12. Descripción general de la Microcuenca quebrada La Volcana; división por partes e interacción urbanística y rural..... | 67 |
| Figura 13. Ubicación general tramo de estudio uno. Extraída de Google Earth. Portería Universidad EAFIT..... | 68 |
| Figura 14. a) Box culvert de la avenida las Vegas, b) agua abajo del box culvert, avenida las Vegas..... | 68 |

| | |
|---|----|
| Figura 15. Box culvert dentro de la universidad EAFIT, b) Agua arriba del Box culvert dentro de la universidad EAFIT. | 69 |
| Figura 16. Fotografía general del tramo de estudio dentro de la universidad EAFIT, desde el puente peatonal que cruza la quebrada. | 69 |
| Figura 17. Diferentes granulometrías con su respectiva tabla de diámetros, tramo U. EAFIT. | 70 |
| Figura 18. Ubicación tramo de estudio dos. | 71 |
| Figura 19. a) Fotografía desde la estación 4, aguas arriba, b) fotografía aguas bajo de la estación de inyección y c) Descripción geomorfológica local, escalón-pozo. | 72 |
| Figura 20. Formas de viaje de una inyección instantánea de un soluto en una canal natural. | 74 |
| Figura 21. Comportamiento Concentración-Tiempo en dos secciones a lo largo del cauce aguas abajo de la inyección instantánea del trazador. | 74 |
| Figura 22. Modelación tramo Universidad EAFIT con el coeficiente de $2.0015 \text{ m}^2/\text{s}$ | 81 |
| Figura 23. Modelación tramo Universidad EAFIT con los coeficientes de dispersión asumidos. a) Con $K=0,7 \text{ m}^2/\text{s}$ y b) con $K=0,2 \text{ m}^2/\text{s}$ | 82 |
| Figura 24. Modelación en el tramo Transversal Inferior, con el coeficiente de $0,9401 \text{ m}^2/\text{s}$ | 84 |
| Figura 25. Modelación en el tramo Transversal Inferior, con los dos coeficientes asumidos. a) Con $K=0.4 \text{ m}^2/\text{s}$ y b) con $K=0.125 \text{ m}^2/\text{s}$ | 85 |
| Figura 26. Río Teusacá desde Sitio 1 hacia aguas arriba. | 87 |
| Figura 27. Esquema de sitios de medición, Río Teusacá. | 89 |
| Figura 28. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 2, con un coeficiente de difusión de campo $1,834 \text{ m}^2/\text{s}$ | 90 |
| Figura 29. Modelación en el tramo del río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 2, con un coeficiente de difusión $0,8 \text{ m}^2/\text{s}$ | 91 |
| Figura 30. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 2 con un coeficiente de difusión $0,39 \text{ m}^2/\text{s}$ | 91 |
| Figura 31. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 2 a la estación 3 con un coeficiente de difusión $1,448 \text{ m}^2/\text{s}$ | 93 |

| | |
|--|-----|
| Figura 32. Modelación en el tramo del río Teusacá, desde la estación 2 a la estación 3 con un coeficiente de difusión 0,6 m ² /s..... | 93 |
| Figura 33. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 2 a la estación 3 con un coeficiente de difusión 0,26 m ² /s..... | 94 |
| Figura 34. Modelación en el tramo Del río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 3 con un coeficiente de difusión 1,689 m ² /s..... | 95 |
| Figura 35. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 3 con un coeficiente de difusión 0,7 m ² /s | 96 |
| Figura 36. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 3 con un coeficiente de difusión 0,272 m ² /s..... | 96 |
| Figura 37. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 2, modelo TS vs ADE..... | 101 |
| Figura 38. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 3, modelo TS vs ADE..... | 101 |
| Figura 39. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 2 a la estación 3, modelo TS vs ADE..... | 102 |
| Figura 40. Descripción del tramo de estudio, Universidad EAFIT..... | 112 |
| Figura 41. Preparación del tramo de estudio para las medidas metodología de la Inyección y desarrollo de la sustancia trazadora..... | 112 |
| Figura 42. Inyección y desarrollo de la nube trazadora..... | 113 |
| Figura 43. Mediciones de conductividad en la estación 3 (E3): a) medición individual de muestra, b) medición de la muestra promedio..... | 114 |
| Figura 44. Mediciones de conductividad en la estación 4 (E4): a) medición individual de muestra, b) medición de la muestra promedio..... | 114 |
| Figura 45. Ubicación tramo de estudio dos..... | 115 |
| Figura 46. Ubicación del personal en la estación 2, 3 y 4 a lo largo del río..... | 116 |
| Figura 47. a) Medición de la conductividad en la estación (E3) y b) Medición de la conductividad en la estación 4 (E4)..... | 116 |
| Figura 48. Gráfica del coeficiente de correlación. El coeficiente de correlación se redondea a 0,6..... | 118 |

INTRODUCCIÓN

Las montañas representan aproximadamente el 24% de la superficie terrestre del planeta, (Kopos *et al.*, 2000, citado en González, 2008), a su vez es el lugar geográfico donde se origina gran parte de los ríos del mundo, tanto principales como secundarios. Viviroli *et al.*, (2003) encontraron que en promedio el 69% del aporte hídrico anual de diecinueve grandes cuencas de cuatro continentes lo genera las áreas de montaña, y estas áreas del total de la cuencas corresponden al 32%, citado en González (2008).

En extensas áreas de montaña en América Latina se están degradando los recursos naturales, ocasionando deforestación de los bosques, contaminación de las fuentes de agua natural, erosión de los suelos productivos y la generación de vulnerabilidad en partes de suelos propensos a avalanchas en el momento de un evento extremo del clima (FAO, 2000, citado en González, 2008).

Para entender el estado actual de los recursos y para plantear estrategias de control y mejoramiento, hay que cuantificarlos, una herramienta matemática importante en este sentido se encuentra en los modelos de transporte y calidad del agua, los cuales sirven como herramienta en estudios de recursos hídricos y saneamiento del medio ambiente, para buscar una aplicación efectiva de técnicas para el manejo y control de la calidad del agua (Thomann y Mueller, 1987; Chapra, 1997 citado en Camacho y Días, 2003).

Los ríos de montaña se caracterizan por presentar una serie de estructuras turbulentas muy particulares debido a: pendiente longitudinal, forma de fondo del cauce, el tamaño de los sedimentos y el transporte de sedimentos. Una característica turbulenta local muy propia es el escalón-pozos, como se muestra en la Figura 1.

Figura 1. Ubicada aguas arriba de la transversal superior, tramo conformado por secuencia escalón- pozo.



Fuente: Elaboración propia.

Las características vorticosas locales establecen cómo se transportan los sedimentos y contaminantes en los ríos de montaña. En la interacción que se presenta entre los seres humanos y las corrientes superficiales en zonas de montaña se presentan descargas de residuos y vertimientos de diferente naturaleza, que pueden afectar la vida acuática y generar problemas de salud pública, que limitan el uso del agua, afectando la ecología y causando la pérdida del valor estético natural del paisaje (Camacho y Díaz, 2003). Es necesario, entonces, determinar ¿cómo usar los recursos naturales para que se afecten en la menor medida posible?

El problema que se plantea abordar en este trabajo, es comparar entre los diferentes modelos de transporte de contaminantes conservativos en ríos de montaña. El conocimiento de estos modelos ayuda en la cuantificación y el control que se le da a los recursos hídricos. En este proceso es fundamental la determinación de parámetros por medios experimentales para una adecuada calibración del modelo en un río de montaña. Para ello se pretende modelar el transporte de un contaminante conservativo en las condiciones que los ríos de

montaña establecen, pero en el presente trabajo no se pretende la calibración para todos los ríos de montaña ni para todo un río, porque para este propósito se requiere de una cantidad significativa de recursos, con los cuales se puedan hacer los experimentos suficientes que generen el contraste necesario en que se calibre el modelo para un río. Lo que se realizará es la modelación de diferentes tramos que permitan de forma preliminar identificar los elementos necesarios para la calibración de un río de montaña.

Las modelaciones se realizarán en dos tramos en la quebrada La Volcana (con diferentes condiciones geomorfológicas). Además se modelará un tramo del río Teusacá-Bogotá, en donde la información disponible (González, 2008) presenta reportes de diferentes estaciones de medición.

Para la predicción del transporte de un soluto conservativo en un río de montaña, se utilizó la modelación matemática computacional, la cual para el presente trabajo de investigación se compone de las siguientes partes: Comprensión del fenómeno físico y sus ecuaciones matemáticas, uso de los métodos numéricos para reemplazar las ecuaciones diferenciales parciales y obtención de los coeficientes empíricos que sustentan las modelaciones. En la interacción de estos elementos es donde se materializan las modelaciones, por esto la parte del título que dice, “una mirada CFD aplicada”, entonces esta disciplina (CFD) es de mucha utilidad para solucionar problemas más complejos, en donde la solución analítica no alcanza a realizarlos. El desarrollo del presente trabajo se desarrollará en cuatro partes:

La primera parte hace una exposición del problema y las leyes fundamentales asociadas (Chapra y Canale, 2003), en donde se identifican las hipótesis, que son el norte de análisis, tanto para la evaluación de los diferentes esquemas numéricos, como para identificar las dificultades que los coeficientes empíricos presentan para dar solución al problema (capítulo 2).

En la segunda parte se hace una revisión del comportamiento de los diferentes métodos numéricos, lo cual se sustenta en encontrar el balance entre precisión y economía computacional (Abbott y Basco, 1998:7), (capítulo 3).

La tercera parte es la metodología y los resultados de las salidas de campo (capítulo 4).

Por último, la solución al problema físico y los análisis de las diferentes modelaciones (capítulo 5).

En este capítulo introductorio se presenta primero una identificación de los antecedentes de los diferentes modelos de transporte en ríos de montaña que se han desarrollado en la literatura (capítulo 1.1), con lo cual se precisarán los alcances del presente trabajo de investigación. Seguido de esto, se describirá la metodología utilizada (capítulo 1.2), luego se mostrarán los objetivos (capítulo 1.3), los productos (capítulo 1.4) y se finalizará con una identificación de los motivos que justificaron la ejecución del presente trabajo (capítulo 1.5).

1. DESARROLLO DEL TRABAJO

1.1 ANTECEDENTES Y ALCANCES

Los modelos que se encuentran en la literatura son: Advección-dispersión (ADE, e.g. Rutherford, 1994), el de almacenamiento temporal (TS, Bencala y Walters, 1983), y el de zona muerta agregada (ADZ, Beer y Young, 1983) citados en González (2008).

Estos modelos contienen en su estructura uno o varios coeficientes empíricos que pretenden cuantificar el transporte dispersivo que se desarrolla en un río de montaña. Estos ríos se caracterizan por una alta variabilidad geomorfológica e hidráulica, tanto a lo largo del cauce, como en diferentes condiciones hidrológicas. Por tal motivo, es necesario encontrar los coeficientes empíricos para diferentes tramos y en diferentes condiciones hidrológicas.

Lo que pretende un modelo de transporte de un contaminante en un río de montaña, en la forma más ideal posible, es: Cuantificar el tiempo de arribo, el tiempo promedio de viaje y el tiempo de paso del contaminante en función de las características geomorfológicas e hidráulicas del río, tales como: la pendiente del cauce, las formas de fondo, el caudal y la velocidad media (González, 2008). Para esto se requiere su calibración, la cual consiste en la determinación de un conjunto óptimo de parámetros que minimice las diferencias entre los datos observados y simulados.

En el modelo ADE el coeficiente empírico de dispersión longitudinal (K), pretende cuantificar todos los efectos de dispersión en el tramo de estudio, lo cual puede ser un inconveniente para la modelación del transporte de soluto en ríos de montaña, porque en estos ríos se presentan diferentes fenómenos turbulentos

locales, por lo cual el coeficiente (K) puede no representar la totalidad de estos fenómenos. En ríos de montaña el flujo uniforme sólo se puede presuponer desde una perspectiva macroscópica, en una escala mayor que la del canal prismático, a esto se le denomina flujo macroscópicamente uniforme (López, 2005). Por esta razón el comportamiento gaussiano obtenido con este tipo de modelo (ADE), no concuerda totalmente con los datos experimentales (mirar los datos experimentales del capítulo 5 y la tesis de González, 2008). En vista de esta dificultad, el modelo ADE evolucionó al modelo TS, que adiciona en el modelo ADE el concepto de almacenamiento temporal, el cual contiene los efectos de mezcla ocasionados por los meandros, secuencias piscina-rápido y piscina-caída, islas, material vegetal, estructuras de control e interacción con flujos sub-superficiales (Bencala y Walters, 1983, citado en González, 2008). Entonces en el modelo TS se establecen dos coeficientes, el coeficiente de dispersión (K) que se encarga del transporte a lo largo del canal principal que se comporta como el modelo ADE y el coeficiente α , que es el coeficiente de intercambio entre la zona de almacenamiento y el canal principal. Pero el principal problema de este modelo es que así se logre modelar o ajustar a la curva concentración-tiempo obtenida experimentalmente, no se puede lograr ver una dependencia directa de los parámetros a las condiciones geomorfológicas e hidráulicas (González, 2008). Y por esto se desarrolló otro modelo, el modelo ADZ, que utiliza series de datos y tiempo para verificar estadísticamente la estructura del modelo que mejor represente los fenómenos observados. Este enfoque contiene una ventaja en los procesos de calibración y simulación de transporte de soluto, comparado con el modelo ADE y TS, porque no tiene la necesidad de realizar suposiciones acerca de cómo se desarrollan los procesos físicos dispersivos, por el contrario, todos los análisis están basados en los datos de campo (González, 2008:57).

En el presente trabajo los modelos que se estudiarán son: ADE y TS. Éstos serán contrastados con ensayos de campo. Está fuera del alcance de este trabajo

realizar calibraciones con diferentes caudales, por lo que no son generalizables los parámetros obtenidos.

1.2 METODOLOGÍA

La metodología que se usó en el presente trabajo se presenta en cuatro partes:

- **Planteamiento del problema (capítulo 2):** En el primer subcapítulo 2.1 se realiza una exposición de la relación del problema de estudio con las leyes fundamentales. Primero se muestra a través de un ejemplo cómo es el transporte difusivo molecular de un soluto en un solvente (fluido agua), ocasionado por el movimiento molecular del agua, esto con el propósito de enunciar la primera Ley de Fick, que cuantifica este movimiento molecular en una constante de difusión molecular para hacer el paso a la escala macroscópica, que los gradientes de concentración del soluto presentan. Luego, se muestra cómo el fluido en los canales tiene un carácter dinámico turbulento, entonces, si se introduce un contaminante en estas condiciones de flujo, el transporte advectivo del soluto es ocasionado tanto por la velocidad media como por las velocidades fluctuantes del solvente, de esta manera, para cuantificar el transporte ocasionado por el solvente al soluto, se analiza un volumen infinitesimal de control en el interior de un canal (se supone un canal prismático con un flujo uniforme y continuo) y se aplica la ley de conservación de la masa para obtener la ecuación diferencial parcial del transporte de soluto en un canal prismático, en donde se identifica el transporte de soluto por la velocidad media en la sección transversal más el transporte difusivo ocasionado por las velocidades fluctuantes y se establece que este transporte difusivo es varios órdenes de magnitud mayor que el transporte difusivo molecular, enunciado en la ley de Fick.

En el subcapítulo 2.2 se presentan las diferentes características geomorfológicas e hidráulicas que se establecen en los ríos de montaña. En este sub-capítulo se identifica una nueva descripción de flujo uniforme a mayor escala, a lo cual se le denomina flujo macroscópicamente uniforme (López, 2005), entonces este término incluye los efectos locales que se presentan a lo largo del cauce en ríos de montaña. El propósito de este capítulo es identificar estas características para introducir los diferentes modelos que intentan predecir el transporte de soluto en ríos de montaña.

En el sub-capítulo 2.3 se presentan los diferentes modelos que se han desarrollado para predecir el transporte de soluto en los ríos de montaña, con sus respectivas ecuaciones diferenciales parciales. En estos modelos se establece un nuevo coeficiente de difusión, que es varios órdenes de magnitud mayor que los coeficientes de difusión turbulento en canales prismático para flujo uniforme, el cual es llamado coeficiente de dispersión longitudinal (K). Toda la argumentación teórica de estos modelos se basa en los trabajos realizados por Taylor (1953 y 1954).

En el sub-capítulo 2.4 se presenta cómo se han obtenido los coeficientes de dispersión en ríos de montaña en función de características geomorfológicas e hidráulicas (como la velocidad) y se presenta lo que han reportado diferentes investigaciones, mostrando un rango de variabilidad tan alto que algunos autores recomiendan hacer ensayos de campo.

□ Como la solución a las ecuaciones diferenciales parciales del modelo ADE y TS no tiene solución analítica para las condiciones geomorfológicas e hidráulicas que se presentan en los ríos de montaña, se hace necesario una solución numérica, en el capítulo 3 se presentará el funcionamiento de varios métodos numéricos para solucionar el problema del transporte de contaminantes, buscando encontrar una ecuación discreta en donde se

establezca un equilibrio entre precisión y economía computacional. Para su solución se utilizaron los métodos en diferencias finitas.

Este Capítulo 3 se dividió en tres partes:

- En el sub-capítulo 3.1 se muestra el proceso general para solucionar problemas con ordenadores, a través de las ecuaciones en diferencias finitas para un problema de condiciones iniciales, el cual se divide en tres procesos (Potter y Wiggerts, 2002): primero se discretiza el dominio espacial (obtener la retícula espacial) y se encuentra la cantidad de pasos en el tiempo para alcanzar la solución (retícula temporal). Después, se discretiza la ecuación diferencial parcial y se muestra cómo la discretización temporal se puede evaluar en el tiempo comprendido entre las condiciones iniciales (t^n) y las condiciones en el tiempo siguiente (t^{n+1}), lo que establece si los métodos son explícitos o implícitos. Se pone en evidencia que hay muchas posibles formas de discretizar las ecuaciones en diferencias finitas, lo que crea la pregunta: ¿Cuál de estos métodos numéricos es el más indicado para la modelación que el problema físico plantea?
- En el sub-capítulo 3.2 se mostrarán las herramientas de evaluación para los análisis de consistencia, estabilidad numérica y la convergencia. De éstas se hace énfasis en la estabilidad numérica y se presentan los límites de estabilidad de los diferentes métodos numéricos. En la obtención de estos límites se establece la relación de la malla computacional (en el dominio del espacio y el tiempo) con los coeficientes de las ecuaciones diferenciales parciales. Se presentan los números adimensionales de Courant, Newmann y Peclet, que serán de mucha utilidad para encontrar el esquema numérico que modela el transporte de soluto con la menor cantidad de pasos en el transcurrir del tiempo.

- En el sub-capítulo 3.3 además de los análisis de convergencia, estabilidad numérica y convergencia, es indispensable realizar el contraste con la ecuación analítica, para el caso de análisis de un transporte de un contaminante conservativo en un canal con inyección puntual, la ecuación analítica existe, entonces al hacer los contrastes entre la ecuación continua y la ecuación discreta se logran validar los esquemas numéricos para este caso en particular, lo que genera un grado más de confianza para el modelador en el momento de predecir el transporte de soluto que se establece en las condiciones reales que presentan los datos observados. Para tal propósito se presentan los resultados de los diferentes esquemas numéricos contra la ecuación analítica (ecuación, 3.24, capítulo 3.3.2).

- En el sub-capítulo 4.1 se describen las diferentes características que presenta la quebrada la Volcana, las condiciones que se establecen en el tramo de análisis de la universidad EAFIT y la descripción del tramo de análisis en la Transversal Inferior. En el sub-capítulo 4.2 se muestra la metodología en general que se usó para medir la curva de concentración-tiempo en los tramos de análisis (las particularidades de la metodología usada en los dos tramos de análisis se presentan en el Apéndice A).

- En el sub-capítulo 5.1 se modelan los tramos de la quebrada La Volcana y el tramo del Río Teusacá, con los dos métodos explícitos (Upwind y QUICKEST) y el método implícito de Crank Nicholson con el modelo ADE. Con esto se crea la plataforma para analizar la capacidad de predicción del modelo ADE con los coeficientes encontrados en campo (coeficiente de dispersión longitudinal y velocidad en la sección transversal). También se presentan los resultados obtenidos con dos coeficientes de dispersión longitudinal adicionales, con el propósito de mejorar la predicción del modelo. En el sub-capítulo 5.2 se compararan los modelos ADE y TS en su capacidad predictiva, pero solo con

el método explícito QUICKEST y el método implícito de Crank Nicholson para los casos de análisis.

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo General. Simular la ecuación unidimensional de transporte de solutos con diferentes metodologías, con el fin de realizar comparaciones para determinar cuál ofrece mejores aproximaciones en ríos de montaña.

1.3.2 Objetivos Específicos.

- Reunir información de ensayos realizados en ríos de montaña, para hacer la corrección o ajuste a los diferentes modelos de transporte.
- Estudiar la ecuación de transporte y los esquemas computacionales que permitan desarrollar un algoritmo en diferencias finitas para su solución del modelo ADE.
- Proponer un término que ajuste o calibre el modelo ADE a las condiciones físicas que establece el transporte de un soluto en un río de montaña.
- Realizar un análisis comparativo entre los modelos ADE, TS, y el modelo ajustado propuesto.

1.4 PRODUCTOS ESPERADOS

El trabajo de grado está enfocado en entender el transporte de solutos en ríos de montaña, aplicando diferentes herramientas numéricas, y con ello determinar el

comportamiento de los diferentes métodos para modelar el transporte de soluto en ríos de montaña.

Los productos que nacen de la investigación presente son:

- Varios algoritmos en diferencias finitas para los distintos esquemas numéricos escritos en MatLab, que reproduce el fenómeno de advección y dispersión superpuestos para el modelo ADE.
- Un algoritmo en diferencias finitas para el método TS en MatLab.

1.5 JUSTIFICACIÓN

Para cualquier proyecto de infraestructura es necesario estudiar la viabilidad ambiental, y esto comprende en muchos casos el estudio del fenómeno de transporte de un contaminante o de sedimentos, por lo que el problema de transporte es necesario de entender para cuantificar el impacto del ser humano sobre la naturaleza.

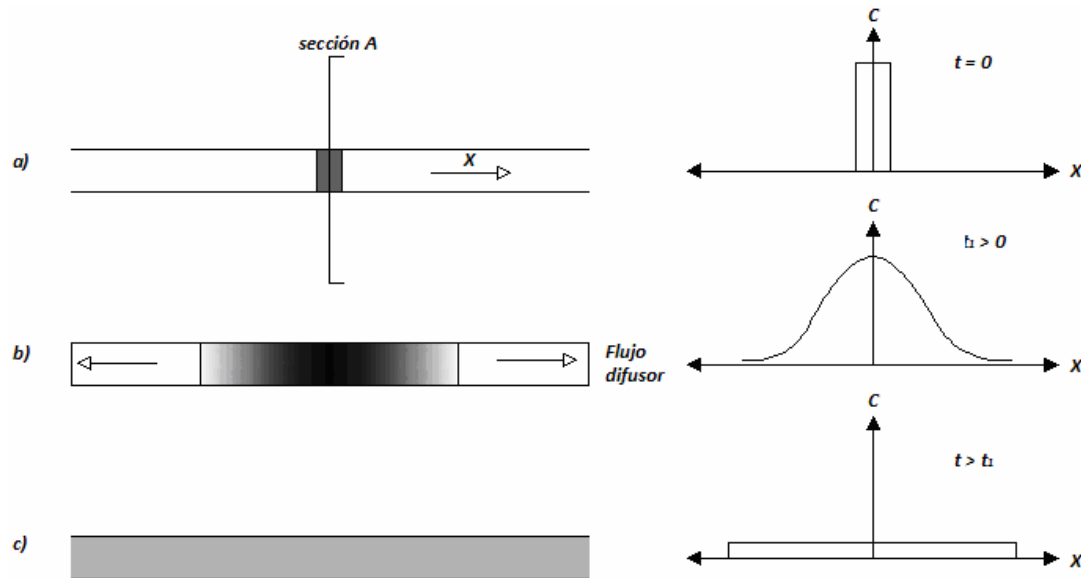
El trabajo tiene como objeto explorar la modelación numérica para el problema del transporte en ríos de montaña, porque el estudio del transporte de soluto es el pilar en el cual se encuentran los cimientos para el análisis cualitativo y cuantitativo de la calidad del agua y de auto-purificación de los ríos de montaña (Young y Wallis, 1993; Rutherford, 1994; Camacho y Lees, 2000; Camacho *et al.*, 2007, citado en González, 2008). En este sentido, el presente trabajo pretende establecer un vínculo entre la ingeniería y la protección y uso sustentable del medio ambiente.

2. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

2.1 FENÓMENO DE TRANSPORTE DE SOLUTO (ADVECCIÓN Y DIFUSIÓN)

Al inyectar en un instante una cantidad de tinta o soluto en una masa de agua en reposo (Figura 2.a) la actividad molecular en el fluido bifásico transporta el soluto en gradientes de mayor a menor concentración, como se muestra en la parte b de la Figura 2.

Figura 2. Transporte de un soluto por difusión molecular en el interior del cuerpo del agua en reposo.



Fuente: Elaboración propia.

Para cuantificar el flujo de masa del soluto (J) que se establece en la dirección de x , es necesario encontrar un área determinada y un delta de tiempo en el que se establezca el flujo de masa del soluto como un continuo (suficiente para no medir el flujo en la escala microscópica en que se presentan los movimientos aleatorios del agua sobre el soluto). La primera ley de Fick presenta un coeficiente de proporcionalidad (coeficiente de difusión molecular), que contiene de una forma

compacta y macroscópica el transporte aleatorio que el material presenta en su forma microscópica, y que se puede escribir como se presenta en la ecuación (2.1):

$$J_{(molecular)} = -D_m \frac{dC}{dx} \quad 2.1$$

Donde D_m es el coeficiente de difusión molecular de masa que enlaza la física microscópica con la macroscópica del material, al cuantificar de forma macro el transporte del soluto por efecto del movimiento aleatorio del solvente, C es la concentración del soluto por unidad de volumen del solvente y x es el eje longitudinal a lo largo del canal (Potter y Wiggert, 2002).

Se espera que después de un tiempo lo suficientemente largo, el soluto por efecto de la difusión molecular sea transportado por efecto del movimiento aleatorio de las partículas, por lo cual se alcanza una concentración uniforme del soluto, a lo cual se le denomina difusión binaria uniforme (Potter y Wiggert, 2002:638), como ilustra la Figura 2.c.

Con el fluido en reposo, el movimiento molecular del fluido bifásico produce un transporte del soluto, a lo cual se le denomina difusión molecular, y este flujo es medible si se hace en una escala macroscópica y esta escala se referencia cuantitativamente a la escala de Batchelor (escala en donde los gradientes de concentración son difundidos por difusión molecular). (Potter y Wiggert, 2002).

Cuando el fluido está en movimiento, se pueden presentar dos tipos de flujo: uno, es el flujo laminar en donde las fuerzas viscosas predominan y el otro es donde las condiciones dinámicas del fluido llegan a un punto en donde los movimientos rotacionales son tan altos que rompen la cohesión interna del agua que se presentaba en el fluido laminar (Cadavid, 2009:332) y se establece otro tipo de flujo, al cual se le da el nombre de flujo turbulento, en el cual prevalecen las

fuerzas inerciales sobre las viscosas, siendo ésta la condición principal que se presenta en ríos de montaña.

Cuando las condiciones dinámicas establecen un flujo turbulento, la difusión de masa también es causada por los remolinos turbulentos. La estructura del flujo turbulento transporta al soluto en una escala macroscópica mucho mayor que la escala de difusión molecular, por este motivo el efecto de la difusión molecular pasa a un segundo plano y no se toma en cuenta en el momento del cálculo (Potter y Wiggert, 2002).

El transporte advectivo se define como el transporte de una cantidad escalar por efectos de un campo vectorial, o, en otras palabras, como una cantidad de partículas que tienen una cantidad de movimiento dado, que transportan a otras partículas en su misma dirección y sentido (como el solvente transporta al soluto), como se expresa en la ecuación (2.2):

$$J_{(advectivo)} = UC \quad 2.2$$

Donde U es la velocidad de flujo y C es la concentración del soluto por unidad de volumen del solvente.

Si el fluido es turbulento, se presenta un transporte de soluto que se puede dividir y superponer en dos tipos: uno de difusión turbulenta, y otro de advección turbulenta. Estos dos tipos de transporte se representan con la ecuación (2.3). En esta expresión el $J_{(turbulento)}$ se identifican dos términos, uno debido a la advección del flujo medio y otra que puede ser entendida como la difusión turbulenta por las fluctuaciones de velocidad en el flujo.

$$J_{(turbulento)} = \bar{u}\bar{c} + u'c' \quad 2.3$$

Donde \bar{u} es la velocidad media de flujo, \bar{c} es la concentración media del soluto por unidad de volumen del solvente, u' es la velocidad fluctuante de flujo y c' es la

concentración fluctuante del soluto, $J_{(turbulento)}$ es el flujo de masa del soluto en el seno del solvente turbulento.

El transporte de masa de un soluto en un flujo turbulento, ecuación (2.3), se realiza por una componente de velocidad media (transporte por advección) y por una componente de velocidad fluctuante (transporte por difusión).

Si la velocidad media tiene un valor mucho mayor que los valores fluctuantes, el transporte es predominantemente advectivo, pero si el caso fuera lo contrario, el transporte de masa sería predominantemente difusivo. En la práctica, cuantificar la escala comparativa entre estos dos fenómenos de transporte es lo que permite modelar el transporte de soluto en las condiciones que se presentan en los ríos de montaña.

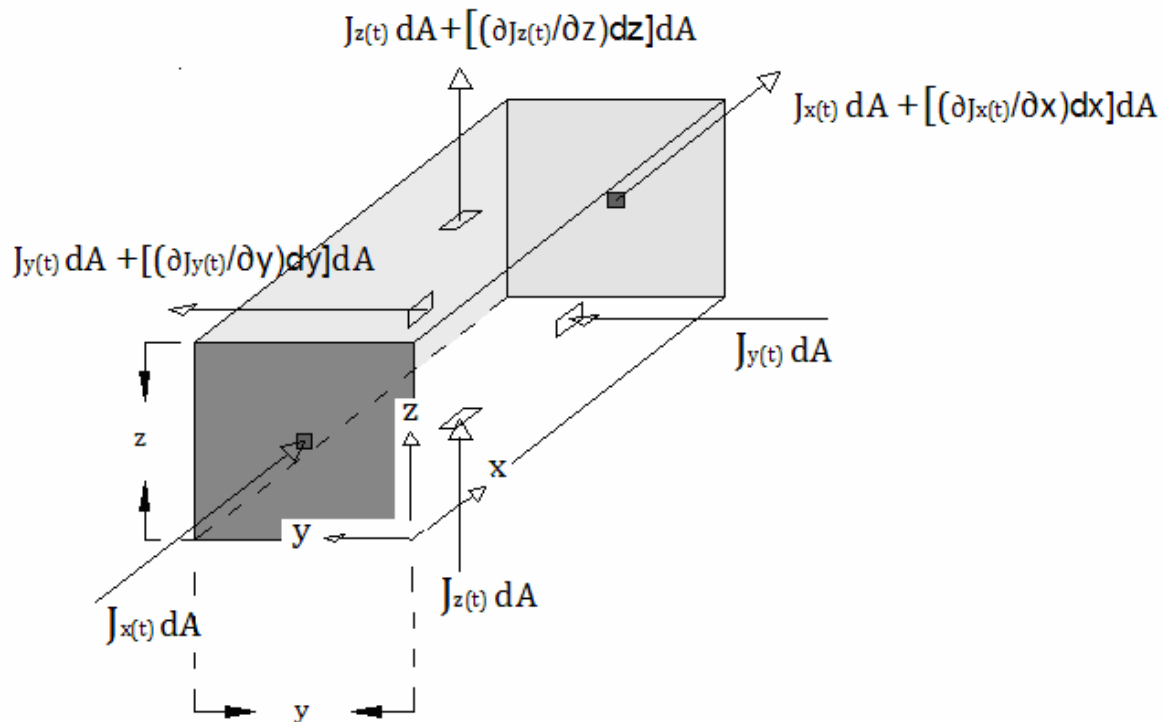
Para el desarrollo de la ecuación del transporte de soluto en un flujo turbulento, se supone un canal prismático, el cual en sus características de contorno (rugosidad, pendiente, longitud y sección transversal) y fuerzas de cuerpo actuantes, establezcan en su equilibrio un flujo uniforme, continuo y turbulento.

La ecuación (2.3) puesta en un volumen infinitesimal (Figura 3) en el interior de un canal prismático, en el cual sólo hay velocidad media en la dirección de x (\bar{u}), pero si tiene velocidades fluctuantes en las tres direcciones de x, y y z, las cuales son: $u', v' y w'$ respectivamente (ver Figura 3).

Entonces el transporte de soluto $J_{(turbulento)}$ en las tres direcciones en el volumen diferencial es:

$$J_{x(z)} = \bar{u}\bar{c} + u'c' \quad J_{y(z)} = \bar{v}\bar{c} + v'c' \quad y \quad J_{z(z)} = \bar{w}\bar{c} + w'c' \quad 2.4$$

Figura 3. Componentes de flujo en un volumen infinitesimal en el interior del canal prismático.



Fuente: Elaboración propia.

Se realiza la conservación de la masa en el volumen de control (Figura 3). Se considera una mezcla de fluido que contiene una sustancia, puede ser un contaminante químico. Sea la propiedad extensiva su masa (la masa del soluto) y se define a la concentración de la sustancia como c , la cual se expresa como masa por unidad de volumen de la mezcla ($c = m/dV$), dV es la cantidad de espacio del volumen de control (Potter y Wiggert, 2002).

La tasa neta de flujo másico que entra y sale del volumen de control es $\left(\frac{\partial m}{\partial t}\right)$, la cual se expresa en la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = 0 \text{ entonces } \frac{\partial c}{\partial t} dV = 0 \text{ y } \frac{\partial c}{\partial t} = 0; \text{ entonces } \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial(\bar{c} + c')}{\partial t} = \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial c'}{\partial t}\right) \quad 2.5.a$$

Si se realizan los promedios temporales en los términos de la ecuación (2.5 a) en un periodo de tiempo (T), a la escala macroscópica que establece las componentes de la concentración media, se tiene:

$$\bar{c}' = \frac{1}{T} \int_0^T (c - \bar{c}) dt = \bar{c} - \bar{c} = 0 \quad 2.5.b$$

De la ecuación (2.5.b) el diferencial $\frac{\partial c'}{\partial \tau}$ se hacen cero porque las cantidades fluctuantes están por debajo de la escala que establece la física macroscópica, entonces la ecuación 2.5.a se reduce a:

$$\frac{\partial m}{\partial \tau} = \left(\frac{\partial \bar{c}}{\partial \tau} + \frac{\partial c'}{\partial \tau} \right) = \frac{\partial \bar{c}}{\partial \tau} \quad 2.5.c$$

Luego se reemplazan las expresiones de la ecuación (2.4) en la ecuación (2.5.c) y se desarrollan para cada dirección por separado y se obtiene:

$$\frac{\partial J_{x(t)}}{\partial x} dx dA = \frac{\partial(\bar{u}\bar{c})}{\partial x} dV + \frac{\partial u'c'}{\partial x} dV = \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} dV + \bar{c} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} dV + \frac{\partial u'c'}{\partial x} dV \quad 2.6 a$$

$$\frac{\partial J_{y(t)}}{\partial y} dy dA = \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} dV + \bar{c} \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} dV + \frac{\partial v'c'}{\partial y} dV \quad 2.6 b$$

$$\frac{\partial J_{z(t)}}{\partial z} dz dA = \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} dV + \bar{c} \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} dV + \frac{\partial w'c'}{\partial z} dV \quad 2.6 c$$

Entonces, aplicando la conservación de la masa en el volumen diferencial de la Figura 2.2 se obtiene:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \bar{c}}{\partial \tau} dV + \left(-J_{x(t)} dA + \left(J_{x(t)} dA + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} dV + \bar{c} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} dV + \frac{\partial u'c'}{\partial x} dV \right) \right) + \left(-J_{y(t)} dA + \right. \\ & \left. \left(J_{y(t)} dA + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} dV + \bar{c} \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} dV + \frac{\partial v'c'}{\partial y} dV \right) \right) + \left(-J_{z(t)} dA + \left(J_{z(t)} dA + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} dV + \right. \right. \\ & \left. \left. \bar{c} \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} dV + \frac{\partial w'c'}{\partial z} dV \right) \right) = 0 \end{aligned}$$

2.7

Teniendo en cuenta que bajo la hipótesis de flujo incompresible;

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} = 0 \quad 2.8$$

Y por manipulaciones algebraicas, se llega a la siguiente expresión:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{u}'c'}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}'c'}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}'c'}{\partial z} = 0 \quad 2.9$$

Si las condiciones turbulentas del flujo no cambian con el tiempo ni con el espacio (condiciones turbulentas, estacionarias y homogéneas), se pueden relacionar los términos de flujo turbulento con una propiedad de flujo medio como una analogía a la ley de Fick (González, 2008), entonces: □□

$$\bar{u}'c' = -D_{x(t)} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}, \quad \bar{v}'c' = -D_{y(t)} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}, \quad \bar{w}'c' = -D_{z(t)} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad 2.10$$

Donde los signos negativos significan que los gradientes de concentración del soluto efectúan de mayor a menor. Sustituyendo las ecuaciones de (2.10) en la ecuación (2.9) se obtiene:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{x(t)} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{y(t)} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{z(t)} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) = 0 \quad 2.11$$

Donde, los valores $D_{x(t)}$; $D_{y(t)}$ y $D_{z(t)}$ son la difusión turbulenta o los coeficientes de difusión de torbellino en las tres dimensiones. La ecuación (2.11) es la ecuación de transporte turbulento de un soluto conservativo en un canal.

2.2 CARACTERÍSTICAS GEOMORFOLÓGICAS E HIDRAULICAS EN RÍOS DE MONTAÑA

2.2.1 Características geomorfológicas. Los ríos de montaña se caracterizan por una alta variabilidad, tanto entre secciones trasversales consecutivas a lo largo del cauce, como en sus características altitudinales (López, 2005).

Los parámetros fundamentales para describir la geomorfología que afectan las condiciones hidráulicas en ríos de montaña para modelar el fenómeno de transporte de soluto, son: la pendiente longitudinal, forma de fondo del cauce, el tamaño de los sedimentos y el transporte de sedimentos.

2.2.1.1 Pendiente longitudinal. No existe un criterio unificado para correlacionar la pendiente con otros parámetros físicos, pero en López (2005) se enuncian unas clasificaciones realizadas por Jarrett (1991), quien considera a un cuerpo de agua como río de montaña si en la mayor parte de su trazado tiene una pendiente longitudinal igual o superior al 2%. López (2005) citando los trabajos de Bathurst (1993), presenta una clasificación que relaciona el tamaño predominante del sedimento y la pendiente longitudinal, considerando que en los cauces formados por grava y cantos la pendiente varía entre 0,05% y 0,5%, en los cauces formados por bolos la pendiente varía entre 0,5% y 5%, y en los pequeños cauces de cabecera la pendiente es superior al 5%. López (2005) citando a Montgomery y Buffington (1993), presenta que existe una relación entre las formas de fondo y la pendiente, la cual en los tramos de cascada varía entre 3% y 20%, en los tramos de secuencia escalón-pozo varía entre 2% y 9%, en los tramos de lecho plano es inferior al 2%, en los tramos de secuencias pozo-rápido varía entre 0,1% y 3% y en los tramos duna-rápido es inferior al 0,1% (López, 2005).

2.2.1.2 Forma de fondo. Las formas de fondo se pueden clasificar de diferentes maneras, en López (2005) describen la clasificación utilizada por Montgomery y Buffington (1993, 1997 respectivamente), quienes proponen clasificar las formas de fondo como:

- **Cascada:** tramo caracterizado por alta pendiente (3%-20%) y material del lecho grueso (canto-bolo), localizado en forma desorganizada en el sentido longitudinal y lateral. En este tipo de tramos el flujo es altamente turbulento y

se presentan trayectorias convergentes y divergentes alrededor de los materiales del lecho.

- **Escalón-piscina:** tramo caracterizado por pendientes pronunciadas (2%-9%) y material del lecho grueso (canto y bolo). El lecho se organiza en el sentido longitudinal en una secuencia de escalones que están conformados por sedimentos de mayor calibre y pozos constituidos por partículas más finas. En forma general, el flujo sobre los escalones presenta una alta turbulencia que es disipada en las zonas de pozos.
- **Lecho plano:** tramo caracterizado por pendientes que varían entre 2% y 5%. El material del lecho varía entre grava y canto. En general, estos tramos no presentan formas de fondo bien definidas, existiendo ocasionalmente algunos elementos gruesos.
- **Piscina-rápido:** tramo caracterizado por pendientes medias que varían entre 0.1% y 3%, cuyo material del lecho es generalmente grava. En el sentido longitudinal del flujo, se producen secuencias ondulantes entre los pozos (material fino) y los rápidos (material más grueso). En algunas ocasiones se aprecian barras laterales en las márgenes del cauce, produciéndose oscilaciones del flujo.
- **Duna-rizo:** El lecho está formado por partículas de arena y presenta una pendiente inferior a 0.1%. El transporte de sedimentos se produce para la mayoría de caudales.

Otra clasificación ampliamente utilizada es la propuesta por Bathurst (citada en López, 2005).

2.2.1.3 Tamaño de los sedimentos. En el cauce del río se desarrolla un transporte de sedimentos con alta gradación, produciéndose una interacción de los diferentes diámetros de partículas durante la erosión, transporte y sedimentación, generando lechos muy heterogéneos.

Los tamaños de los sedimentos en ríos de montaña tienden a variar entre gravas y bolos en mayor proporción. Las gravas se clasifican entre 2 mm y 64 mm de diámetro, si el rango del diámetro está entre 64 mm y 256 mm se clasifica como canto y si el sedimento supera a 256 mm se clasifica como bolo (USGS, 1998). Las arenas se clasifican en función de su tamaño como las partículas con diámetro medio superior a 0.063 mm e inferior a 2 mm.

El río se puede clasificar en función de las características del sedimento que transporta, por lo que en la literatura se le ha dado la connotación de ríos con lecho en grava a los ríos de montaña, pues su lecho se encuentra constituido en gran proporción por materiales mayores a las gravas (López, 2005).

2.2.1.4 Transporte sólido. En términos generales, los ríos de montaña poseen una variabilidad morfológica distinta a la de los ríos de llanura, debido al mayor diámetro de los sedimentos y a la disposición y agrupación que adoptan las partículas en el fondo del lecho, que hace que requieran de esfuerzos mayores para ser transportados en condiciones normales. Por esto, en los ríos de montaña, en caudales ordinarios, el flujo no posee la suficiente capacidad de transportar el material en las magnitudes necesarias para modelar el cauce. A esta característica en los cauces de sedimento grueso, se denomina cauces de umbral o estables, porque los sedimentos sólo se transportan en caudales elevados y el flujo es menos capaz de modelar una organización aluvial característica a lo largo del cauce (López, 2005).

2.2.2. Características hidráulicas.

2.2.2.1 Categoría de flujo en áreas de montaña. Los ríos de montaña cuentan con una gran capacidad de transporte de sedimento en momentos que se presentan caudales elevados. Este transporte se ocasiona por las altas pendientes de la cuenca y las tormentas de alta intensidad, que juntos causan un efecto en el flujo que lo capacita para transportar cargas sólidas con tamaños que van desde arcillas hasta bolos.

Los ríos de montaña se pueden clasificar en función de su carga sólida. Si el transporte de sólido no condiciona al flujo líquido, se dice que es un flujo de baja concentración, también puede describirse como un fluido bifásico. Si el flujo aumenta la cantidad de transporte sólido hasta el punto en que condicione al flujo líquido, se le clasifica como flujo hiper-concentrado. Por último, se clasifica como lava torrencial en donde los diferentes tamaños de los sedimentos y el líquido forman una matriz continua como un material visco-plástico (fluido no newtoniano) (López, 2005).

Para el proceso de modelado en el presente trabajo, la aproximación requerida se comporta como un flujo de baja concentración, entonces los flujos clasificados como hiper-concentrados y lava torrencial, no serán descritos, para observar ampliamente en qué consisten estos flujos consultar a López (2005:11).

2.2.2.2 Características hidráulicas en flujo de baja concentración. Las características hidráulicas principales en el flujo de baja concentración son: la sumersión relativa reducida, el flujo turbulento e hidráulicamente rugoso, el régimen subcrítico, la distribución de velocidades no logarítmicas y el flujo macroscópicamente uniforme (López, 2005).

La sumersión relativa de flujo es el cociente entre la profundidad de la corriente y el diámetro de los sedimentos, se caracteriza en los ríos de montaña por ser

reducida, lo que significa que en la mayor parte del cauce los elementos más gruesos superan la superficie libre, lo que no pasa en los ríos con lechos de arena en cauces de llanura.

El efecto combinado de las pendientes longitudinales elevadas, el gran calibre de los sedimentos y la forma en que se establece la relación entre la profundidad de la corriente y el diámetro de los sedimentos, ocasiona una distribución de velocidades no logarítmica.

En los ríos de montaña se tiende a un equilibrio entre el flujo líquido, transporte sólido y morfología del cauce (aún con pendientes muy elevadas) que genera un régimen de flujo subcrítico en la mayoría de los tramos, tan solo observándose régimen supercrítico durante períodos cortos de tiempo o en tramos muy cortos (asociados a tramos de caídas o rápidos) (López, 2005).

Estas características hidráulicas que se establecen en la geomorfología del cauce, provocan perturbaciones locales del flujo o fenómenos hidráulicos locales, en estas condiciones es necesario replantear la escala del flujo uniforme para incluir los diferentes fenómenos hidráulicos locales y ampliarla a una macro-escala en donde algunos tramos presentan un patrón de regularidad geomorfológica e hidráulica, que es a lo que se le llama *flujo macroscópicamente uniforme* (López, 2005).

2.3 MODELOS PARA LA PREDICCIÓN DE TRANSPORTE DE SOLUTO EN RÍOS DE MONTAÑA

Para la modelación del transporte de soluto en un río de montaña se han desarrollado varios modelos de carácter predictivo. El modelo de advección-dispersión y el modelo de almacenamiento transitorio (TS), el cual es un modelo que evoluciona del ADE para corregir e incluir algunas características locales que

se presentan en los ríos de montaña. Otro modelo que es importante es el ADZ, que fue desarrollado paralelamente al modelo ADE y TS (González, 2008).

2.3.1 Modelo advección-difusión (ADE). El transporte del soluto es realizado por dos fenómenos: por la difusión y por la advección, y esto se expresa en la ecuación (2.11). La dificultad de esta expresión es que los coeficientes de mezcla de difusión turbulenta $D_x(z)$, $D_y(z)$ y $D_z(z)$ y el campo de las velocidades en las tres direcciones, no es fácil de obtener para un río de montaña en una situación real. Sin embargo, el transporte de soluto en un canal natural de un río de montaña se puede considerar como un modelo unidimensional (González, 2008:34). Esta simplificación se puede llevar a cabo porque se asume que en un tiempo suficiente después de la inyección del contaminante, la mezcla en la dirección transversal y vertical se uniformizan y solamente se presentan gradientes de concentración en la dirección longitudinal del canal. La teoría que sustenta este modelo unidimensional se sustenta en principios presentados por Taylor (1953 y 1954).

Al reconocer que la difusión turbulenta en ríos de montaña se realiza en la sección transversal a lo largo del eje longitudinal, se establece un nuevo término de transporte, al cual se le denomina el coeficiente de dispersión longitudinal (K), y este coeficiente puede ser de varios órdenes de magnitud mayor que el coeficiente de mezcla de difusión turbulenta $D_x(z)$ (Potter y Wiggert, 2002).

Para simplificar la ecuación de transporte de soluto (ecuación, 2.11) a la forma unidimensional, se integra a lo largo de la sección trasversal, de modo que los parámetros que representan el transporte cambien solamente a lo largo de la dirección longitudinal y del tiempo. Entonces, la ecuación (2.11) se transforma en la siguiente expresión:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = K \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} \quad 2.12$$

Donde \bar{c} es la concentración promedio en la sección transversal, \bar{u} es la velocidad promedio a través de la sección transversal y K es el coeficiente de dispersión longitudinal en el río de montaña.

El coeficiente K es función de los coeficientes de difusión turbulenta $D_x(t)$, $D_y(t)$ y $D_z(t)$ y la velocidad promedio \bar{u} y sus valores, que se encargan de cuantificar los efectos generados por la difusión y advección, entonces miden la forma como se desarrolla la mezcla del flujo en curvas, cambios abruptos de la sección transversal del lecho (vertical y transversal), en las zonas estancadas (zona muerta), son las cantidades encargadas de cuantificar el transporte de todos los fenómenos locales en un tramo en donde se establezcan características macroscópicamente uniformes.

El proceso para llegar a la ecuación (2.12) se explica ampliamente en el Apéndice A del trabajo de González (2008).

El modelo de transporte de masa por advección-dispersión (ADE) se expresa en la ecuación (2.12), y ésta tiene solución analítica para una descarga instantánea de masa de soluto, la cual fue desarrollada por Chatwin y Allen (citado en Chanson, 2004).

$$C(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi Kt}} e^{-\frac{(x-\bar{u}t)^2}{4Kt}} \quad 2.13$$

Donde M es la masa de soluto, K es el coeficiente de difusión, A es el área efectiva de transporte de la corriente y \bar{u} es la velocidad promedio en la sección transversal.

De acuerdo al desarrollo presentado, se puede ver que el modelo ADE para el presente trabajo de grado presenta las siguientes restricciones: los datos de campo se toman cuando se haya establecido una mezcla uniforme en la sección transversal, esta sección se idealiza como constante, la turbulencia es estadísticamente estacionaria, el campo de velocidades es permanente y no hay generación o degradación del soluto. Para estas condiciones, la concentración del soluto a lo largo del tiempo tendría la forma de una distribución Gaussiana (González, 2008).

2.3.2 Modelo almacenamiento transitorio (TS). Este modelo nace de la necesidad de predecir el comportamiento observado en los experimentos hechos con trazadores en ríos de montaña, para explicar las largas colas observadas que se presentan en estos experimentos (Comportamiento asimétrico, comparado con un comportamiento Gaussiano), se desarrolló el concepto de zona muerta o zona de almacenamiento temporal (González, 2008:38).

Las zonas de almacenamiento temporal, se caracterizan por la retención temporal del soluto por efectos de pequeños remolinos, zonas estancadas de agua y por la significativa cantidad del soluto que es retenida temporalmente por la circulación que se realiza a través de la grava gruesa del lecho y las áreas porosas en las orillas. Estas zonas se encargan del almacenamiento temporal. Por estas características, el transporte del soluto tiene una tasa que comparada con las aguas más rápidas cerca del centro del canal parecieren estacionarias (Runkel, 1998). El canal principal transporta los solutos aguas abajo por advección y dispersión, interactuando con las zonas de almacenamiento. Entre el canal principal y las zonas de almacenamiento se establece un intercambio de masa, a lo cual se le denomina almacenamiento temporal, y se modela como un proceso de transferencia de masa de primer orden (Runkel, 1998).

El modelo fue deducido por Bencala y Walters (1983), en cuyo texto se encuentran ampliamente deducidas las ecuaciones. Estas ecuaciones en forma general presentan al modelo dividido en dos sub-modelos, uno físico y el otro cinético. El sub-modelo físico estudia el comportamiento del soluto en el seno del canal natural y el sub-modelo cinético evalúa el comportamiento de las sustancias no conservativas.

Si se considera que el soluto es conservativo y que las variaciones de los parámetros a lo largo del tramo seleccionado para la modelación son constantes, las ecuaciones que presenta el modelo TS son las siguientes (González, 2008):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} + K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \alpha(c_s - c) \quad 2.14 a$$

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} = \alpha \frac{A}{A_s} (c - c_s) \quad 2.14 b$$

Dónde: A es el área de la sección transversal promedio en el tramo de estudio, c_s es la concentración del soluto conservativo en la zona de almacenamiento, A_s es el área transversal promedio de la zona de almacenamiento, α es el coeficiente de intercambio entre la zona de almacenamiento y el canal principal.

El modelo TS al incorporar el proceso de almacenamiento temporal para predecir el transporte real en canales, involucra unos parámetros físicos que son necesarios calibrar con datos experimentales.

2.4 CÁLCULO DE COEFICIENTES DE TRANSPORTE

Elder (citado en Fischer, 1973:71), realizó un estudio en el cual mediante diferentes ensayos en canales, obtuvo una ecuación para obtener el coeficiente de dispersión K :

$$K = 5.05 hV_*$$

2.16

Donde V_* es la velocidad de corte y h es la profundidad de flujo.

$$V_* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}}$$

Donde τ_0 son los esfuerzos promedios cortantes en la frontera (Pa) y ρ es la densidad en (Kg/m³).

Los resultados se basan en la suposición de una distribución de velocidades logarítmica. Las estimaciones para el coeficiente de dispersión realizados por Elder (1959) son muy inferiores a los coeficientes encontrados en cauces naturales, como lo revela un estudio hecho por Ficher (1979: 125–127) citado en el libro de Chanson (2004), en que la relación $\frac{K}{hV_*}$ está entre los valores 9 y 75000.

Estos resultados muestran que hay una alta variabilidad de las líneas de igual velocidad de flujo entre los diferentes ríos, lo que sugiere que el coeficiente es necesario encontrarlo empíricamente o basado en estudios de coeficientes con unas características geomorfológicas e hidráulicas muy similares al cauce natural de estudio y contemplar la necesidad de factores de seguridad razonables (Chanson, 2004).

Investigaciones experimentales proponen la ecuación siguiente para hallar un coeficiente de dispersión en ríos naturales (Chanson, 2004):

$$K = 0.011 \frac{u^2 W^2}{hV_*} \quad 2.17$$

Donde u es la velocidad de flujo (m/s) W es el ancho del canal (m). En la ecuación (2.17) se recomienda un factor de seguridad de 4.

Chanson (2004) describe que Rutherford (1994: 193-204) con un gran número de datos de campo define nuevos rangos de variabilidad en cauces naturales y sugiere hacer las mediciones de campo para hallar el coeficiente.

$$2 < \frac{K}{WV_c} < 50 \quad 2.18$$

Hunt (citado en Chanson, 2004) realizó estudios sobre el coeficiente de dispersión en ríos de montaña y propuso una relación directa con la velocidad, donde el coeficiente de proporcionalidad hay que hallarlo experimentalmente.

$$K \propto u^3 \quad 2.19$$

Deng (citado en Chanson, 2004), a partir de estudios sobre los coeficientes de dispersión para ríos naturales rectos, dedujo la siguiente ecuación:

$$K = \frac{0.15 W^{3/2} u^2}{8E_t h^{2/3} V_c} \quad 2.20$$

Donde E_t es un coeficiente adimensional de difusión transversal:

$$E_t = 0.145 + \frac{1}{3520} \frac{u}{V_c} \left(\frac{W}{h} \right)^{1.38} \quad 2.21$$

En conclusión, el coeficiente de dispersión tiene una variación que se establece en un rango muy amplio, por tal motivo es indispensable la obtención de este coeficiente a través de datos de campo, en el capítulo 5 se mostrará la ecuación para hallar este coeficiente experimentalmente.

3. SOLUCIÓN COMPUTACIONAL AL PROBLEMA DE TRANSPORTE DE SOLUTO POR ADVECCIÓN Y DIFUSIÓN

En este capítulo se presenta la forma como se realiza la solución del problema de transporte de soluto utilizando discretización numérica de las ecuaciones. En el sub-capítulo 3.1 se muestra el proceso general para solucionar problemas con computadores, a través de las ecuaciones en diferencias finitas para un problema de condiciones iniciales en la frontera. Para esta solución se siguen tres pasos (Potter y Wiggerts, 2002); primero se discretiza el dominio espacial (obtener la retícula espacial) y se encuentra la cantidad de pasos en el tiempo para alcanzar la solución (retícula temporal) y por último se discretiza la ecuación diferencial parcial y se presentan los operadores en diferencias, estableciendo métodos explícitos e implícitos.

En el sub-capítulo 3.2.1 se argumenta que para proceder a aplicar los diferentes métodos numéricos, es necesario tener herramientas de análisis, en este capítulo se mostrarán dichas herramientas de evaluación.

3.1 MÉTODO DE LAS DIFERENCIAS FINITAS

Para dar solución a las ecuaciones diferenciales parciales que expresan los modelos para el capítulo anterior, se hace uso de la computadora, lo cual impone limitaciones. Entre estas limitaciones, las cuatro más críticas son: los ordenadores sólo permiten operaciones aritméticas y lógicas, esto implica que las operaciones no aritméticas, como las derivadas y las integrales tienen que expresarse en función de operaciones aritméticas y lógicas. La segunda limitación es que la representación de los números tiene un límite de dígitos, esto implica que hay que controlar los errores de redondeo (se controla con la estabilidad numérica). La tercera limitación es que la memoria de las computadoras es limitada, lo que genera una solución en un número finito de puntos en el espacio y el tiempo (se

incrementa en los métodos explícitos). La limitación final se da porque la computadora realiza un número finito de operaciones por unidad de tiempo, esto implica que debe reducirse al mínimo el número de operaciones (Potter y Wiggert, 2002).

Se utilizó el método numérico de las diferencias finitas para dar solución a las ecuaciones diferenciales parciales del transporte de solutos. En éste el método para obtener las ecuaciones de diferencia finita se realiza la discretización de las ecuaciones diferenciales parciales en el dominio computacional y se desarrolla un algoritmo computacional para dicha solución.

3.1.1 Discretización del dominio computacional. El dominio continuo espacial y temporal se sustituye por un dominio discreto compuesto por puntos que conforman una retícula espacial que se repite en los niveles de tiempo. La discretización ideal presenta la menor cantidad de puntos de retícula y menor cantidad de niveles de tiempo para solucionar el problema con la precisión deseada.

3.1.2 Discretización las ecuaciones diferenciales parciales. Con el dominio computacional de forma discreto, se procede con el método de diferencias finitas a discretizar las ecuaciones diferenciales parciales, lo cual se logra al sustituir las derivadas por operadores en diferencia. Esta sustitución se realiza en dos pasos: obtención y selección de los operadores en diferencia.

- **Obtención de los operadores de diferencia:** para comportamientos matemáticos en donde no hay discontinuidades, se utiliza con frecuencia el siguiente teorema: “si una función, u , y sus derivadas son continuas de un solo valor y finitas, entonces el valor de dicha función en cualquier punto puede ser expresado en función de u y sus derivadas en cualquier otro punto mediante

una expansión de las series de Taylor, siempre que este otro punto quede dentro del radio de convergencia de la serie” (Potter y Wiggert, 2002).

Entonces de este teorema se desprende:

$$u_{j+1} = u_j + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j \frac{\Delta x^2}{2!} + \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_j \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad 3.1.a$$

$$u_{j-1} = u_j - \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j \Delta x + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j \frac{\Delta x^2}{2!} - \left(\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}\right)_j \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad 3.2.b$$

Sumando o restando estas dos expresiones (ecuaciones, 3.1.a y 3.1.b), y/o resolviendo de forma directa, se desprenden los cuatro operadores de diferencia siguientes:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j = \frac{u_{j+1} + u_j}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad 3.3$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j = \frac{u_j - u_{j-1}}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad 3.4$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_j = \frac{u_{j+1} + u_{j-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad 3.5$$

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right)_j = \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad 3.6$$

La parte de los operadores de diferencia anteriores, $O(\Delta x)$ y $O(\Delta x^2)$ denotan los errores de truncamiento, que son los términos de la serie de Taylor que son truncados, para revisar mejor los errores de truncamiento en las series Taylor revisar a Chapra y Canale (2003). Dependiendo de la cantidad de puntos y su dirección respecto al punto con dirección j , aparecen diferentes tipos de esquemas. En la Tabla 1 se muestran cuatro tipos de esquemas.

Tabla 1. Estarcidos de los diferentes operadores en diferencia.

| De scripcion | Diferencia finita | Estarcido |
|------------------|---|-----------|
| Primera derivada | | |
| retrasada | $\frac{u_j - u_{j-1}}{\Delta x}$ | |
| Adelantada | $\frac{u_{j+1} + u_j}{\Delta x}$ | |
| Centrada | $\frac{u_{j+1} + u_{j-1}}{2\Delta x}$ | |
| Segunda derivada | | |
| Centrada | $\frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}}{\Delta x^2}$ | |

Fuente: Elaboración propia.

- **Selección de los operadores de diferencia:** para resolver una ecuación en diferencias finitas donde se conocen sus condiciones iniciales, se parte de la solución en el instante t^n ($n=1$) y se predice la solución en el instante siguiente t^{n+1} (time marching), la información se propaga de un nivel de tiempo a otro. Como se mostró en la Tabla 1, las derivadas espaciales son discretizadas en un punto arbitrario (j) de la retícula que pueden tener diferentes esquemas y las derivadas temporales se pueden evaluar entre el nivel de tiempo de las condiciones iniciales (t^n) y en el tiempo (t^{n+1}) en donde se busca la solución.

Las ecuaciones en diferencias finitas derivadas de la ecuación diferencial parcial no es única. Se deben considerar varios criterios para escoger los operadores en diferencia más adecuados.

3.2 PRESENTACIÓN DE ESQUEMAS NUMÉRICOS

En el momento de aplicar los métodos numéricos, se busca escoger la combinación correcta entre la malla computacional, para obtener la menor cantidad de puntos en el dominio y la precisión necesaria.

Los métodos numéricos que serán usados en el presente trabajo para modelar el fenómeno de transporte en ríos de montaña, son: los métodos explícitos, Upwind y QUICKEST, y el método implícito; Crank Nicholson.

Antes de proceder al análisis de estos esquemas, se analizará el esquema Upwind para la advección pura y el método centrado en el espacio y adelante en el tiempo para la difusión pura, con el propósito de identificar los errores por redondeo, los errores por truncamiento y la obtención de la malla computacional para los dos procesos de transporte por separado e identificar la utilidad de dos números adimensionales: el número de Courant (Cr) para la advección y el número de Newman para la difusión. Estos dos números son de utilidad para encontrar el número de pasos en el tiempo para modelar el proceso de transporte.

3.2.1 Generalidades de la Consistencia, estabilidad numérica y convergencia.

3.2.1.1 Consistencia. Es un concepto que mide lo correcto que una expresión algebraica en diferencias finitas representa una ecuación diferencial parcial en el límite en que la separación de la retícula espacial y el paso temporal tienden a cero.

3.2.1.2 Estabilidad numérica. La estabilidad es una propiedad de los esquemas numéricos que permite analizar cómo los errores se propagan a través del esquema, si el método es estable los errores se controlan a medida que el

esquema avanza en el tiempo, mientras que si el método es inestable los errores se magnifican durante el proceso (Potter y Wiggert, 2002).

3.2.1.3 Convergencia. Se dice que una ecuación de diferencias finitas es convergente si las soluciones se aproximan a la solución exacta de la ecuación diferencial parcial.

El proceso analítico para analizar la convergencia suele ser tedioso, pero existe una teoría general conocida como el teorema de la equivalencia de Lax, el cual establece que una ecuación de diferencias finitas de una ecuación diferencial parcial lineal bien planteada es convergente, si dicha ecuación es consistente y estable (Potter y Wiggert, 2002).

3.2.2 Esquemas numéricos.

3.2.2.1 Ecuación de advección. *Es una ecuación hiperbólica de la forma:*

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \tau} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = 0 \quad 3.7$$

Se realizará bajo el método explícito Upwind con el operador de diferencia hacia atrás para la derivada espacial $\partial \bar{c} / \partial x$, mirar la Tabla 1, el error de truncamiento $O(\Delta x)$, diferencia finita adelantada para la derivada que representa el cambio en el tiempo ($\partial \bar{c} / \partial t$), Tabla 1, error de truncamiento $O(\Delta x)$, entonces de la ecuación 3.7 se obtiene:

$$\begin{aligned} \text{Si } \bar{c} \geq 0 \therefore \frac{\bar{c}_j^{n+1} - \bar{c}_j^n}{\Delta t} + \bar{u} * \frac{\bar{c}_j^n - \bar{c}_{j-1}^n}{\Delta x} &= 0 \\ \therefore \bar{c}_j^{n+1} &= (1 - Cr) \bar{c}_j^n + Cr \bar{c}_{j-1}^n \end{aligned} \quad 3.8$$

donde, $\frac{\bar{u} * \Delta t}{\Delta x}$ es el numero adimencional de Courant (Cr)

- Verificando consistencia y estabilidad del esquema explícito Upwind:

El sistema es incondicionalmente consistente.

Si $C_r = 1$ no hay difusión numérica y entre el Δx más pequeño se reduce la difusión numérica, que no es otra cosa que la tendencia al número de Courant igual a uno.

Para el análisis de estabilidad, se debe cumplir entonces con: $C_r \leq 1$, condición de Courant-Friedrichs-Levy (CFL). Del análisis de esta condición se puede establecer el número de pasos en el dominio del tiempo para generar la solución numérica al problema de transporte (Abbott y Basco, 1989).

Para este esquema la celeridad computacional ($\Delta x/\Delta t$) no puede ser menor que la celeridad analítica (\bar{u}) (lo que significa $C_r > 1$), porque no alcanzaría a leer esta información, entonces desde esta perspectiva se establece la restricción: $\Delta x/\Delta t \geq \bar{u}$ para que la malla lea la información de transporte. Entonces de forma analítica se concluye que si $C_r = 1$ la malla escogida capta la información a la misma tasa que establece el valor analítico (\bar{u}) y sin difusión numérica (es igual a la solución analítica) y por el contrario si $C_r < 1$ la malla computacional capta la información a una menor tasa que el valor analítico (\bar{u}); lo que se traduce en más pasos en el delta de tiempo (Δt) para alcanzar el mismo transporte y en difusión numérica.

3.2.2.2 Ecuación de difusión. Es una ecuación parabólica de la forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} - K * \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0$$

3.9

Donde K es el coeficiente de difusión y \bar{c} es la concentración promedio a través de la sección transversal.

Por la forma en que transporta la información su discretización se realiza bajo el método explícito adelante en el tiempo para la derivada temporal $(\partial C)/\partial t$, Tabla 1, error de truncamiento $O(\Delta t)$ y central en el espacio para la derivada espacial $(\partial^2 C)/(\partial x^2)$, Tabla 3.1, error de truncamiento $O(\Delta x^2)$, de lo cual se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{c_j^{n+1} - c_j^n}{\Delta t} - \frac{K}{\Delta x^2} * (c_{j-1}^n - 2 * c_j^n + c_{j+1}^n) &= 0 \\ \therefore c_j^{n+1} &= c_j^n + \frac{K \Delta t}{\Delta x^2} * (c_{j-1}^n - 2 * c_j^n + c_{j+1}^n) \\ \therefore c_j^{n+1} &= c_j^n + N_e * (c_{j-1}^n - 2 * c_j^n + c_{j+1}^n) \end{aligned} \quad 3.10$$

Donde, $\frac{K \Delta t}{\Delta x^2}$ es el número adimensional de Newman N_e .

El sistema es consistente y además por el método lineal de estabilidad se concluye que el método es estable para $N_e = \frac{K \Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$ (Abbott y Basco, 1989: 107).

3.2.2.3 Ecuación de transporte.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} - K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0 \quad 3.11$$

Se discretizará como una superposición de los dos esquemas mostrados en los párrafos anteriores. Discretización central en el espacio para la derivada espacial para la difusión $\partial^2 C/\partial x^2$, con un error de truncamiento $O(\Delta x^2)$, operador de diferencia hacia atrás para la derivada espacial en el término advectivo $\partial C/\partial x$, con un error de truncamiento $O(\Delta x)$, y adelante en el tiempo para la derivada temporal

$\partial C / \partial t$ con error de truncamiento $O(\Delta t)$. A este esquema, se le denomina Upwind. Se obtiene:

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} + U \left(\frac{C_j^n - C_{j-1}^n}{\Delta x} \right) = K \left(\frac{C_{j-1}^n - 2C_j^n + C_{j+1}^n}{\Delta x^2} + \frac{C_{j-1}^{n+1} - 2C_j^{n+1} + C_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right)$$

Se despeja C_j^{n+1} y se obtiene:

$$\therefore \bar{C}_j^{n+1} = (Ne + Cr) \bar{C}_{j-1}^n + (1 - Cr - 2Ne) \bar{C}_j^n + Ne \bar{C}_{j+1}^n \quad 3.12$$

Para el esquema Upwind se adiciona el criterio de difusión numérica, el cual necesita ser cuantificado para no tener problemas en el momento de modelado. La obtención de este número en el desarrollo y análisis de los términos de truncamiento para el esquema Upwind se presenta por Abbott y Basco (1989: 144) quienes desarrollan un término para la difusión numérica:

$$K_{Num} = \frac{\bar{U} \Delta x}{2} * (Cr - 1)$$

El K_{Num} es la difusión numérica. En el momento de usar el método se compara con la difusión física (K), para saber cuál de las dos clases de difusión domina. Si $K_{Num} > K$ el método presenta grandes imprecisiones.

Este esquema corresponde a un esquema consistente.

El esquema Upwind es una superposición de los esquemas de advección del sub-capítulo (3.2.2.1) y el esquema de la difusión del sub-capítulo (3.2.2.2), es estable para la ecuación de advección ($Cr \leq 1$) y estable para la ecuación de difusión, para $Ne \leq \frac{1}{2}$ (Abbott y Basco, 1989).

3.2.2.4 Esquema explícito QUICKEST.

- Desarrollo del esquema

El esquema fue desarrollado por Leonard (1979) basado en una interpolación cuadrática *Upwind* para el término advectivo. Basco (1984) demostró que este desarrollo es idéntico si se desarrolla como un esquema FTCS (centrado en el espacio para el término advectivo y difusivo y adelante en el tiempo), pero con la incorporación de otro nodo corriente abajo ($j-2$), el cual amplía el dominio de aplicación para la diferenciación en el término advectivo. Y al comparar esto con los esquemas *Upwind* arriba enunciados, se obtiene al incorporar este nodo la sustracción de los errores de truncamiento y eliminando la inestabilidad ampliando el rango de uso (Abbott y Basco, 1989).

$$\begin{aligned} \bar{c}_j^{n+1} = & \bar{c}_j^n + \left[N_e(1 - C_r) + \frac{C_r}{6}(C_r^2 - 3C_r + 2) \right] \bar{c}_{j+1}^n \\ & - \left[N_e(2 - 3C_r) - \frac{C_r}{2}(C_r^2 - 2C_r - 1) \right] \bar{c}_j^n + \\ & \left[N_e(1 - 3C_r) - \frac{C_r}{2}(C_r^2 - C_r - 2) \right] \bar{c}_{j-1}^n + \left[N_e(C_r) + \frac{C_r}{6}(C_r^2 - 1) \right] \bar{c}_{j-2}^n \end{aligned} \quad 3.13$$

Este esquema QUIKEST es incondicionalmente consistente. También amplía el rango de estabilidad y sustrae la difusión numérica comparada con el esquema *Upwind*, pero no se enuncia de una forma tan directa los límites de estabilidad como en el método *Upwind*. Los límites de estabilidad para este esquema no se describen de forma tan directa como para el método *Upwind*. Para la obtención de los límites de estabilidad en el método explícito QUICKEST se puede usar el método de análisis de Fourier o el método de estabilidad lineal de Von Newman (Abbott y Basco, 1989: 81-149), por medio del cual se obtiene una función llamada el factor de amplificación, la cual depende en su dominio por los números adimensionales de C_r y N_e , entonces esta función se grafica y se identifica en qué

rango entre las diferentes combinaciones de Ne y Cr se presenta estabilidad y en qué rangos no se presenta. (Abbott y Basco, 1989: 150).

3.2.2.5 Esquema implícito de Crank- Nicholson. Para este esquema se realiza una discretización central para las derivadas espaciales promedias en los niveles n y n+1.

$$\frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} + \frac{U}{2} \left(\frac{C_{j+1}^n - C_{j-1}^n}{2\Delta x} + \frac{C_{j+1}^{n+1} - C_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} \right) - \frac{K}{2} \left(\frac{C_{j-1}^n - 2C_j^n + C_{j+1}^n}{\Delta x^2} + \frac{C_{j-1}^{n+1} - 2C_j^{n+1} + C_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) = 0$$

$$-\left(\frac{Cr}{2} + Ne\right)\bar{C}_{j-1}^{n+1} + 2 * (1 + Ne)\bar{C}_j^{n+1} + \left(\frac{Cr}{2} - Ne\right)\bar{C}_{j+1}^{n+1} = \left(\frac{Cr}{2} + Ne\right)\bar{C}_{j-1}^n + 2(1 - Ne)\bar{C}_j^n - \left(\frac{Cr}{2} - Ne\right)\bar{C}_{j+1}^n$$

3.14

Corresponde a un esquema consistente, que es un esquema incondicionalmente estable (Runkel, 1998).

3.2.2.6 Desarrollo de las expresiones algebraicas de la ecuación de transporte. (Modelo de almacenamiento temporal TS). *Para dar solución a las ecuaciones del modelo TS se escoge el método numérico implícito de Crank- Nicholson, las razones son que es un método eficiente, seguro e incondicionalmente estable en un mayor rango, comparado con el método QUICKEST y Upwind. El desarrollo de este método numérico se encuentra en el modelo OTIS, Transporte Unidimensional con Flujo Lateral y Almacenamiento (OTIS, One Dimensional Transport With Inflow And Storage, Runkel (1998)).*

□ Esquema implícito de Crank-Nicholson para el modelo TS:

En la implementación numérica por el método de las diferencias finitas de Crank-Nicholson, se obtiene el esquema numérico implícito presentado en la ecuación (3.15), adicionándole el término $\alpha(c_s - c)$ del almacenamiento temporal, y realizando algunas manipulaciones algebraicas se obtiene:

$$-\left(\frac{Cr}{2} + Ne\right) \bar{C}_{j-1}^{n+1} + 2 * (1 + Ne + \alpha) \bar{C}_j^{n+1} + \left(\frac{Cr}{2} - Ne\right) \bar{C}_{j+1}^{n+1} = \left(\frac{Cr}{2} + Ne\right) \bar{C}_{j-1}^n + 2(1 - Ne) \bar{C}_j^n - \left(\frac{Cr}{2} - Ne\right) \bar{C}_{j+1}^n + \alpha \bar{C}_s^{n+1}$$

3.15

Para dar solución a la ecuación (3.15) se necesita una técnica de solución iterativa. Este proceso se presenta más extenso en Runkel (1998).

- Zona de almacenamiento:

La diferenciación adelante en el tiempo ($n + 1$) para la ecuación (2.14b33) es:

$$\frac{dc_s}{dt} = \frac{c_s^{n+1} - c_s^n}{\Delta t} = \left\{ \alpha \frac{A}{2A_s} (c - c_s) \right\}^{n+1} + \left\{ \alpha \frac{A}{2A_s} (c - c_s) \right\}^n$$

3.16

Resolviendo la ecuación 3.16 en forma explícita y con algunas manipulaciones algebraicas, se obtiene:

$$c_s^{n+1} = \frac{\gamma c^{n+1} + \gamma c^n + (2-\gamma)c_s^n}{(2+\gamma)}$$

3.17

$$\gamma = \frac{\alpha \Delta t A}{A_s}$$

3.18

Combinando las ecuaciones (3.15 y 3.17) el esquema numérico resultante es (Runkel, 1998):

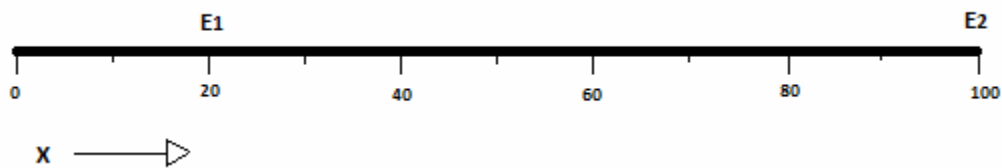
$$-\left(\frac{Cr}{2} + Ne\right) \bar{C}_{j-1}^{n+1} + \left(2(1 + Ne) + \alpha \left(2 - \frac{\gamma}{2+\gamma}\right)\right) \bar{C}_j^{n+1} + \left(\frac{Cr}{2} - Ne\right) \bar{C}_{j+1}^{n+1} = \left(\frac{Cr}{2} + Ne\right) \bar{C}_{j-1}^n + 2(1 - Ne) \bar{C}_j^n - \left(\frac{Cr}{2} - Ne\right) \bar{C}_{j+1}^n + \alpha \left(\frac{\gamma \bar{C}_j^n + (2-\gamma)c_s^n}{(2+\gamma)}\right)$$

3.19

3.3 VERIFICACIÓN, ANÁLISIS Y COMPARACIÓN DE LAS ECUACIONES EN DIFERENCIAS FINITAS VS LA ECUACIÓN ANALÍTICA

En el presente sub-capítulo se presentan los resultados para un caso de un canal recto (Figura 4), cuyo coeficiente de difusión longitudinal es igual a $K = 2 \text{ m}^2/\text{s}$ y la velocidad promedio en la sección transversal igual a $\bar{u} = 0.8 \text{ m/s}$. El tramo tiene una distancia de 100 m y la distancia entre sus dos estaciones de medida (E1 a E2) es de 80 m ($X_c = 80 \text{ m}$), la estación 1 (E1) está ubicada en la coordenada 20 m. Las condiciones iniciales pertenecen a una distribución de la concentración $C \text{ (mg/m}^3\text{)}$, que sigue una forma gaussiana, como la ecuación analítica lo plantea.

Figura 4. Descripción longitudinal del tramo de análisis y ubicación de sus estaciones de modelación.



Fuente: Elaboración propia.

La ecuación analítica (2.13) de transporte de soluto será usada para los diferentes análisis menos para la advección pura.

En los siguientes análisis se pretende cuantificar el error por truncamiento entre la ecuación analítica y las ecuaciones en diferencias finitas y documentar la cantidad de pasos requeridos para modelar el transporte entre la estación 1 (E1) y la estación 2 (E2) con los diferentes métodos numéricos.

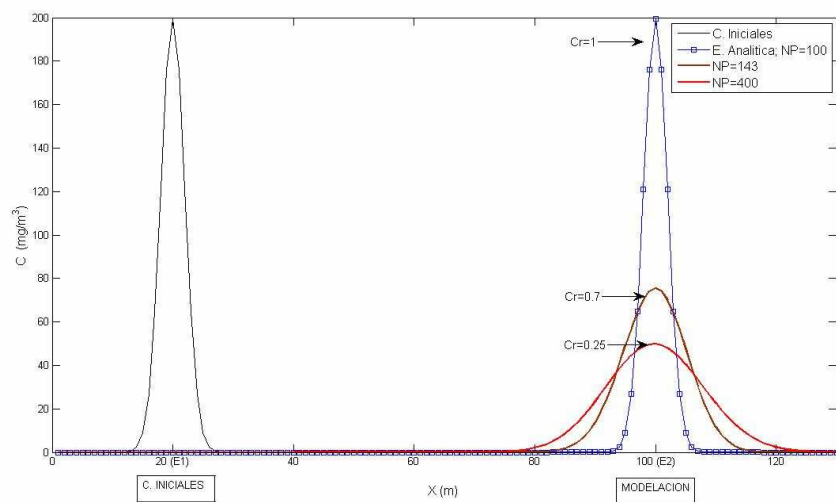
Primero se analizará el esquema para el fenómeno de advección, luego el esquema para la difusión, y con el análisis de estos dos esquemas se desarrollará

el análisis de los esquemas que representa el transporte para la advección y la difusión conjunta (Upwind, QUICKEST y Crank Nicholson).

3.3.1 verificación y análisis de la molécula de advección. La modelación se realizará desde la estación 1 a la estación 2 (Figura 4), lo que se pretende es observar los errores por truncamiento y el número de pasos en el tiempo que modelan el transporte de soluto advectivo para dos casos del número de Courant (C_r): Courant de $C_r = 0.8$ y Courant por debajo de $\frac{1}{2} C_r = 0.25$. Se comparan estas dos modelaciones con la solución obtenida con Courant de uno $C_r = 1$, que es el valor en donde la ecuación discreta se comporta de una forma ideal, como si fuera la ecuación analítica.

En la Figura 5 se presentan los resultados que mostrarán las diferentes modelaciones con sus respectivos números de pasos en el tiempo, y en la Tabla 2 se observan los errores relativos porcentuales de las concentraciones máximas con referencia a la concentración obtenida al compararlas con el caso con Courant igual a uno ($C_r = 1$).

Figura 5. Modelaciones con $C_r = 0.7$, $C_r = 0.25$ en comparación con el valor analítico de $C_r = 1$.



Fuente: Elaboración propia.

Tabla 2. Error porcentual y numero de pasos (NP) para las modelaciones con $Cr = 0.7$, $Cr = 0.25$ en comparación con el valor analítico de $Cr = 1$.

| Para una modelación con: u (m/s)=0.8 y X_T (m)=80 m | | | | | |
|---|----------------|----------------|-------------------|----------------------------|-----------|
| Cr | Δx (m) | Δt (s) | Numero pasos (NP) | C max (mg/m ³) | Error (%) |
| 1 | 0,8 | 1 | 100 | 199,47 | 0 |
| 0,7 | 0,8 | 0,7 | 143 | 75,37 | 62,21 |
| 0,25 | 0,8 | 1 | 400 | 49,82 | 75,02 |

Fuente: Elaboración propia.

Para esta ecuación se escogió un operador de diferencia retrasada para la derivada espacial $(\partial c)/\partial x$, error de truncamiento $O(\Delta x)$, con este grado de precisión entre Cr sea más pequeño que uno, los errores por truncamiento se aumentan (Tabla 2). A estos errores de truncamiento también se les denomina difusión numérica.

También se observa en la Figura 5 y en la Tabla 2 que a medida que el Cr se distancia por debajo con referente a la unidad ($Cr < 1$) los pasos se incrementan para alcanzar el transporte advectivo de 80 m.

3.3.2 Verificación y análisis de la molécula de difusión. Como en este análisis no hay advección, la modelación se realizó para una estación fija en la coordenada $X = 40$ m de la Figura 4, desde las condiciones iniciales se escogerán dos tiempos para modelar la difusión en el tiempo $T_{T(difusion)} = 2s$ y $T_{T(difusion)} = 5s$.

Lo que se pretende es observar, bajo estos dos tiempos de modelación, los errores por truncamiento y el número de pasos en el tiempo que modelan el transporte de soluto difusivo con dos números de Newman diferentes ($N_e = \frac{1}{6}$ y $N_e = 0.4$), estos valores se escogen para observar el contraste, porque con un

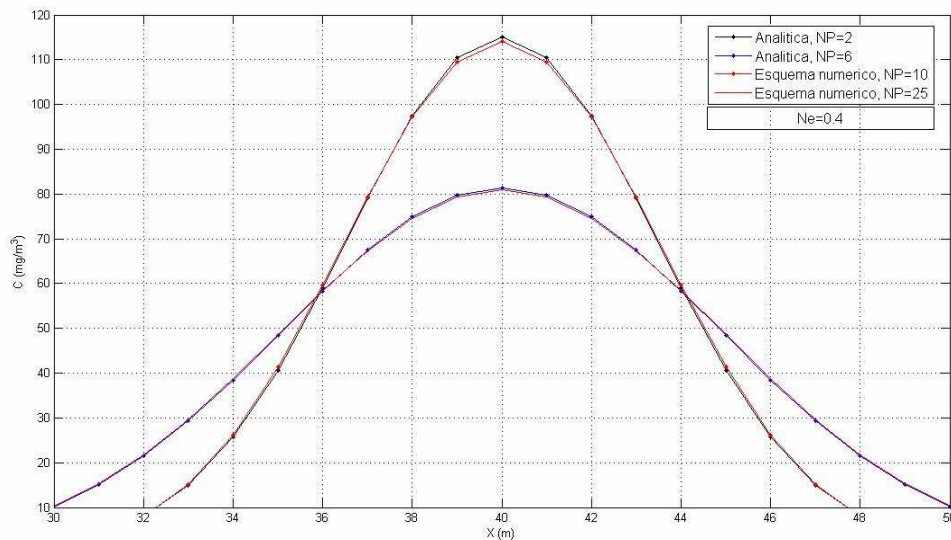
$N_e = \frac{1}{\epsilon}$ los errores por truncamiento se minimizan (esta deducción se muestra en detalle en el libro Abbott y Basco, 1989:106).

La ecuación analítica que será utilizada es la misma que la ecuación (3.24) pero con la velocidad (\bar{u}) igual a cero y un coeficiente de difusión igual a dos ($K = 2$), como se muestra a continuación:

$$C(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi Kt}} e^{-\frac{x^2}{4Kt}} \quad 3.20$$

En la Figura 6 y en la Tabla 3 se muestran para $N_e = 0.4$ los respectivos números de pasos y los errores relativos porcentuales de las concentraciones máximas con referencia a la concentración máxima con la ecuación analítica (3.20).

Figura 6. Modelación con la ecuación en diferencias finitas para la difusión, con un $Ne=0.4$ y para los tiempos 2 s y 5 s.



Fuente: Elaboración propia.

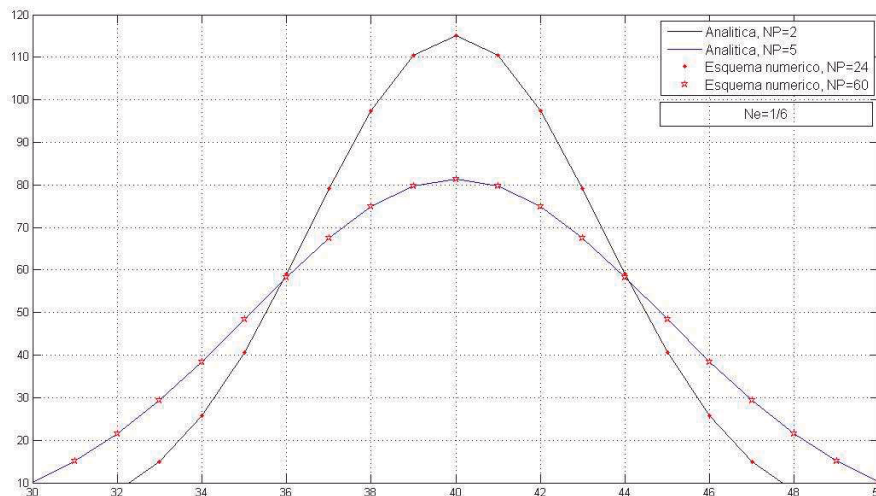
Tabla 3. Error porcentual y numero de pasos (NP) para las modelaciones con $Ne = 0.4$ en comparación con el valor analítico de la ecuación analítica (2.13).

| Modelación con: $K (m^2/s)=2$ | | | | | |
|-------------------------------|---------------|----------------|-------------------|----------------------------|-----------|
| Ne | $\Delta x(m)$ | $\Delta t (s)$ | Numero pasos (NP) | C max (mg/m ³) | Error (%) |
| Analítica | | | 2 | 115,17 | |
| 0,4 | 1 | 0,7 | 10 | 114,018 | 0,996 |
| Analítica | | | 5 | 81,43 | |
| 0,4 | 1 | 1 | 25 | 80,94 | 0,611 |

Fuente: Elaboración propia.

En la Figura 7 y en la Tabla 4 se muestra para $Ne = 1/6$ los respectivos números de pasos y los errores relativos porcentuales de las concentraciones máximas con referencia a la concentración máxima con la ecuación analítica (2.13).

Figura 7. Modelación con la ecuación en diferencias finitas para la difusión, con un $Ne=1/6$ y para los tiempos 2 s y 5 s.



Fuente: Elaboración propia.

Tabla 4. Error porcentual y numero de pasos (NP) para las modelaciones con $Ne = 1/6$ en comparación con el valor analítico de la ecuación analítica (2.13).

| Modelación con: $K (m^2/s)=2$ | | | | | |
|-------------------------------|---------------|----------------|-------------------|----------------------------|-----------|
| Ne | $\Delta x(m)$ | $\Delta t (s)$ | Numero pasos (NP) | C max (mg/m ³) | Error (%) |
| Analítica | | | 2 | 115,1647 | |
| 0,1667 | 1 | 0,2 | 24 | 115,162 | 0,0023 |
| Analítica | | | 5 | 81,4338 | |
| 0,1667 | 1 | 0,0833 | 60 | 81,4332 | 0,0007 |

Fuente: Elaboración propia.

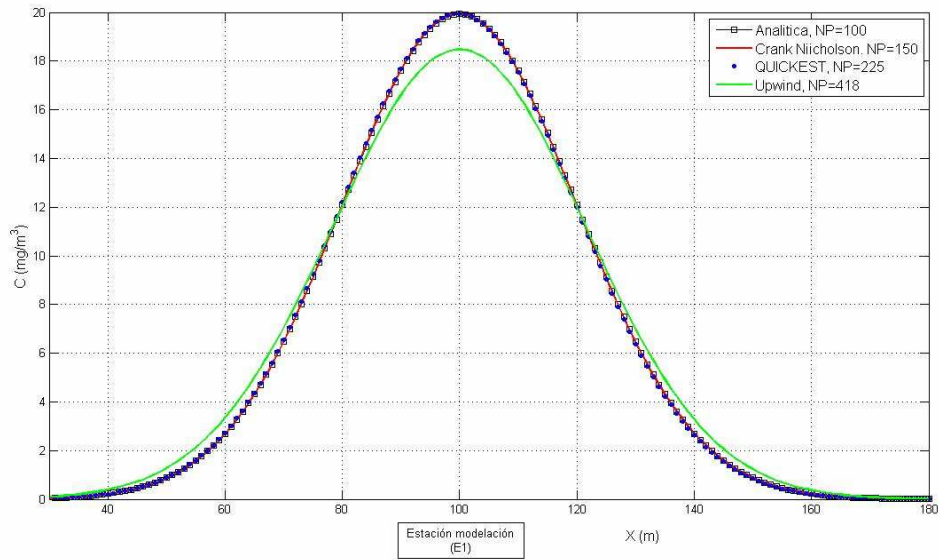
Comparando los resultados de la Tabla 3 y la Tabla 4, se observa que los errores por truncamiento son menores en todos los casos a un 1%. También se observa que a medida que Ne es más pequeño, el número de pasos es mayor para alcanzar la modelación. Se observa cómo los errores por truncamiento se disminuyen con un $Ne = 1/6$, como se observa en las Tablas 3 y 4.

3.3.3 Verificación y análisis de la ecuación en diferencias finitas de advección-difusión. Para evaluar el comportamiento de los esquemas numéricos explícitas (Upwind y QUICKEST) y el esquema implícito de Crank Nicholson, se comparan los diferentes métodos numéricos entre sí con respecto a la ecuación analítica (2.13). El propósito de esto es comparar cuál es el método con más precisión y con el menos número de pasos en el tiempo, para modelar el transporte de soluto. El problema que se quiere resolver es el mismo que se establece anteriormente en este capítulo. El caso de modelación es el que se describió en el inicio del presente Capítulo (3), con $u = 0.8$, $K = 2$, $X_T = 80 m$.

En la Figura 8 se presentan los resultados de la modelación, no se presentan las condiciones iniciales en la estación 1 (E1), solamente se mostrarán las modelaciones en la estación 2 (E2) para poder evidenciar en una mejor escala el

comportamiento de los diferentes esquemas numéricos. En la Tabla 5 se presentan las características utilizadas en esta modelación y los errores obtenidos.

Figura 8. Modelaciones para los esquemas numéricos Upwind, QUICKEST y Crank Nicholson contra la ecuación analítica.



Fuente: Elaboración propia.

Tabla 5. Características generales, error porcentual y número de pasos (NP) para las modelaciones los diferentes métodos numéricos vs la ecuación analítica.

| $\frac{C(x,t)}{C_0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Kx}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Kt}\right)$ | | | | | | | | | |
|---|--------|--------|--------------|--------------|--------|-------------------|---------|----------------------------|-----------|
| Ecuación | Cr | Ne | $\bar{x}(m)$ | $\bar{t}(s)$ | Pe | Numero pasos (NP) | K (NUM) | C max (mg/m ³) | Error (%) |
| $\frac{C(x,t)}{C_0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Kx}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Kt}\right)$ | | | | | | 22222222 | ?? | 22222222 | 22222222 |
| $\frac{C(x,t)}{C_0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Kx}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Kt}\right)$ | 222222 | 222222 | 222222 | 222222 | 222222 | 22222222 | 2222 | 22222222 | 22222222 |
| $\frac{C(x,t)}{C_0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Kx}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Kt}\right)$ | 222222 | 222222 | 222222 | 222222 | 222222 | 22222222 | 2222 | 22222222 | 22222222 |
| $\frac{C(x,t)}{C_0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi Kx}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Kt}\right)$ | 222222 | 222222 | 222222 | 222222 | 222222 | 22222222 | 222222 | 22222222 | 22222222 |

Fuente: Elaboración propia.

El error para el método Upwind fue el más grande de los tres métodos, principalmente por la mayor difusión numérica presente. Como era de esperarse, el esquema QUICKEST, al incluir más términos en las series de Fourier para la diferenciación del término advectivo, genera menores errores. Como se observa en la Figura 8 y en la Tabla 5, las modelaciones de los métodos numéricos QUICKEST y Crank Nicholson se ajustan bien a la ecuación analítica con un error para los dos modelos por debajo de 0,15%. La diferencia del error entre los métodos es de 0,0837% siendo mejor la del esquema de Crank Nicholson. Los dos métodos son para esta modelación recomendables.

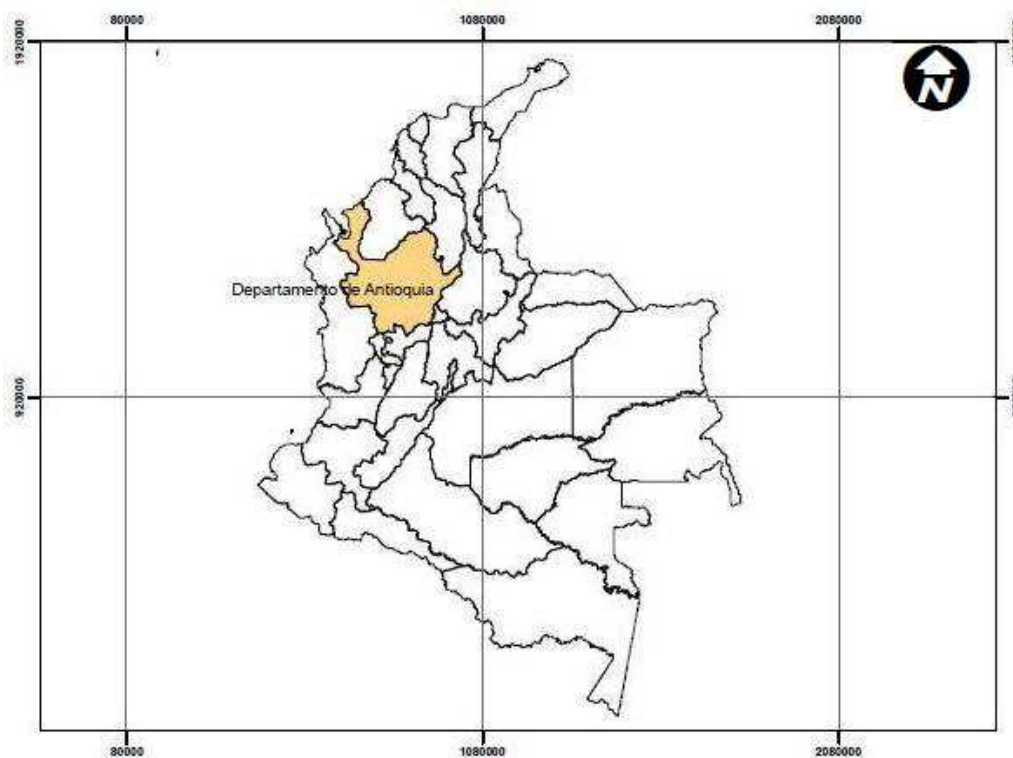
En lo que sí establece una ventaja el esquema Crank Nicholson sobre el esquema QUICKEST, es que permite límites de estabilidad más amplios, lo que permite obtener la solución en menos pasos en el tiempo, como se muestra en la Tabla 5 para este caso particular, lo que genera una malla computacional mejor.

4. DESCRIPCIÓN DE LOS TRAMOS DE ESTUDIO Y ENSAYOS DE CAMPO PARA LA QUEBRADA LA VOLCANA

4.1 DESCRIPCIÓN DE LOS TRAMOS DE ESTUDIO

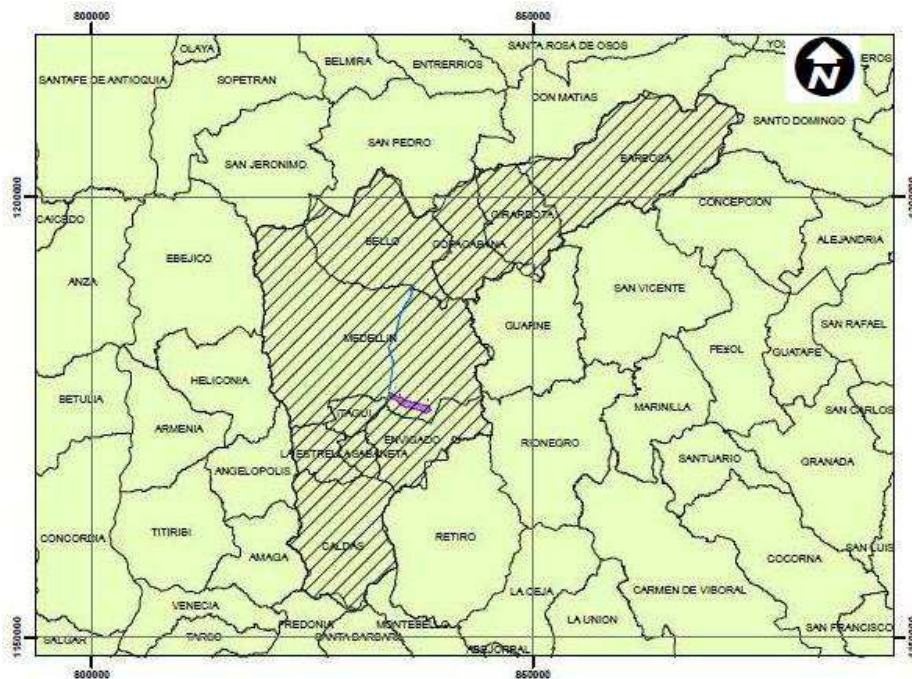
4.1.1 Ubicación geográfica y descripción general a lo largo del cauce. La quebrada La Volcana se encuentra ubicada en Colombia en el departamento de Antioquia, Figura 9; de forma más específica se muestra en la Figura 10 los municipios que rodean el Área Metropolitana del Valle de Aburrá en el departamento de Antioquia; y para finalizar en la Figura 11 se describen las diferentes comunas que rodean la microcuenca de la quebrada La Volcana en el municipio de Medellín, la cual se encuentra entre la comuna 14 y el corregimiento de Santa Elena en el municipio de Medellín.

Figura 9. Colombia, departamento de Antioquia.



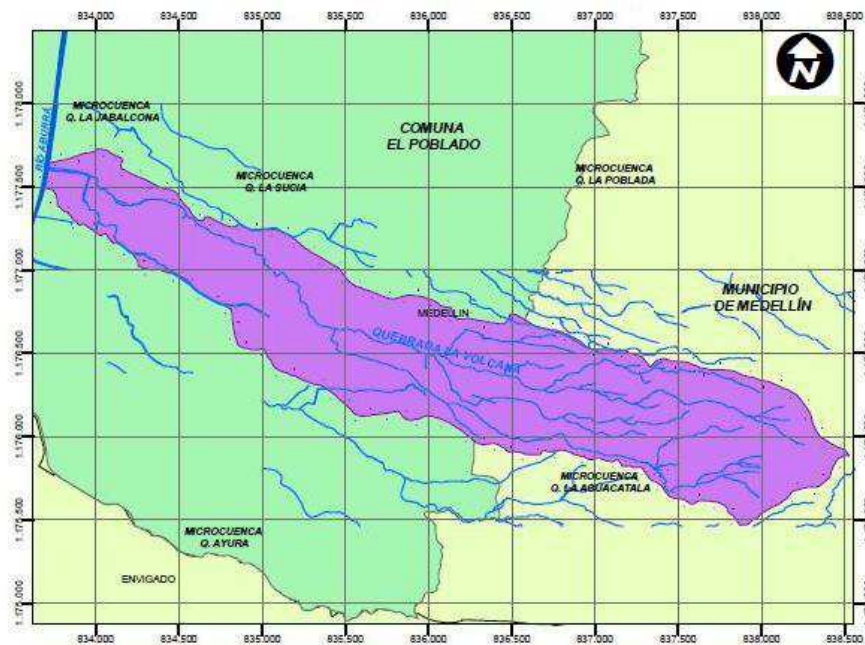
Fuente: Área Metropolitana del Valle de Aburrá. Plan de ordenación y manejo de la quebrada La Volcana, Municipio de Medellín, Tomo v (Atlas). Noviembre de 2007.

Figura 10. Departamento de Antioquia área metropolitana del Valle de Aburrá.



Fuente: Área Metropolitana del Valle de Aburrá. Plan de ordenación y manejo de la quebrada La Volcana, Municipio de Medellín, Tomo v (Atlas). Noviembre de 2007.

Figura 11. Municipio de Medellín, comuna El Poblado Microcuencas quebrada La Volcana.



Fuente: Área Metropolitana del Valle de Aburrá. Plan de ordenación y manejo de la quebrada La Volcana, Municipio de Medellín, Tomo v (Atlas). Noviembre de 2007.

La quebrada se encuentra ubicada entre las cuencas La Sucia y La Presidenta por el norte, la cuenca de La Aguacatala por el sur, el altiplano de Rionegro por el oriente y el río Medellín por el occidente, Figura 11. Nace en la cota 2416 m.s.n.m. en la vereda Las Palmas, su corriente fluye en dirección este-oeste y desemboca en la altura 1500 m.s.n.m. cerca de la universidad EAFIT en el Río Aburrá. Su longitud aproximada es de 5 km. (Área metropolitana del valle de Aburrá, 2007).

La calidad del agua de la quebrada La Volcana presenta afectaciones por aguas residuales, basuras y escombros. Es la cuenca más larga y estrecha de la zona sur del municipio de Medellín, su área es de 312,12 hectáreas, correspondiéndole al área urbana 176,07 hectáreas (56,4%) y al área rural 136,05 hectáreas (43,6%). Dentro del área urbana se encuentran los barrios los Balsos 1 y 2 y La Aguacatala, además de numerosos conjuntos multifamiliares cerrados (Área Metropolitana del Valle de Aburrá, 2007). El sector rural comprende la vereda San Joaquín. Como es una quebrada que está en suelo rural y urbano, la autoridad ambiental es compartida por el Área Metropolitana del Valle de Aburrá y la Corporación Autónoma Regional del Centro de Antioquia, CORANTIOQUIA.

Su precipitación media anual es de 1.344 mm, una temperatura media de 17°C, una humedad relativa del 68,3%. La quebrada La Volcana topográficamente se puede caracterizar por tener tres tramos, la parte alta, media y baja (Área Metropolitana del Valle de Aburrá, 2007).

La caracterización y delimitación que se le otorga a cada tramo o parte de la quebrada La Volcana, es la siguiente: la parte alta comienza en el extremo este a los 2.500 m.s.n.m., hasta la cota 1.860 m.s.n.m. que es el límite entre el área urbana y rural y está compuesto por el contacto entre la anfibolita y los depósitos de flujo de escombros, donde las pendientes son escarpadas desde 25 hasta 75% y mayores, las cuales se van suavizando hasta la cota 1.950 m.s.n.m. Los cañones en este sector están conformados por vertientes cortas y debido a la

pendiente del terreno genera cañones cerrados pero de poca profundidad (Área Metropolitana del Valle de Aburrá, 2007).

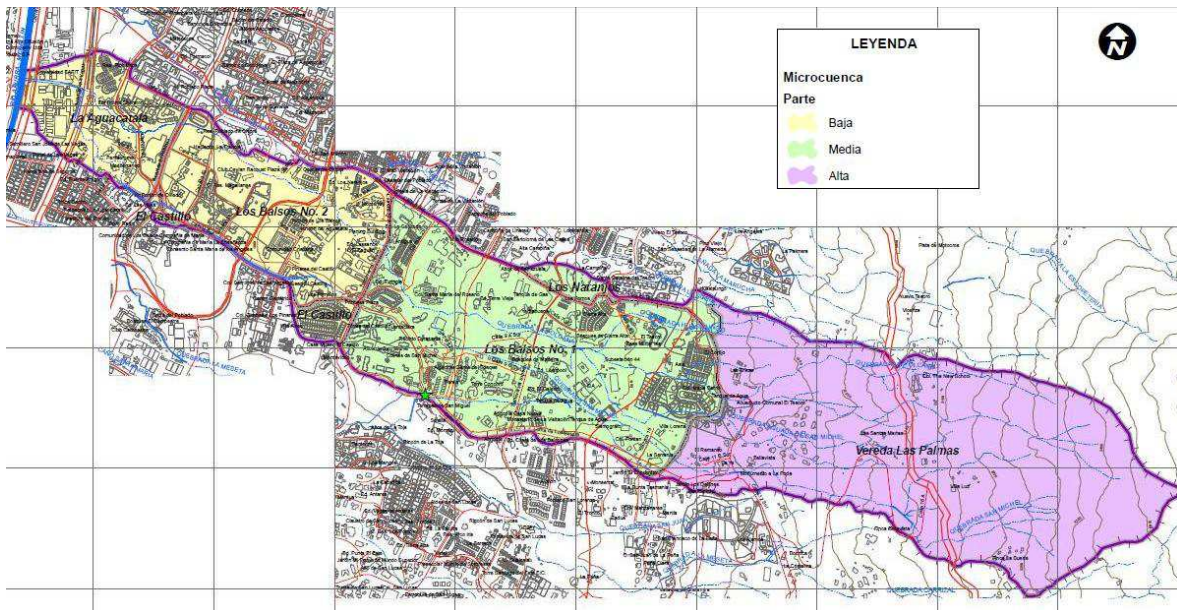
La parte media está ubicada en el límite de la zona rural hasta la Transversal Inferior, entre las cotas 1.860 m.s.n.m. y 1.640 m.s.n.m., tiene pendientes que oscilan entre 7 y 25% y en algunos tramos con pendientes entre 25 y 50%. Se compone de depósitos de flujos de escombros intercalados con flujo de lodos, los cuales le dan un modelado moderadamente suave a la vertiente, las características de estos depósitos se caracterizan en algunos cortes de vías o en taludes que conforman el cauce, Figura 12.

Los cañones son profundos, amplios con las vertientes tendidas, en algunos tramos se encuentra el cauce protegido con vegetación arbórea y rastrojo bajo, así mismo, en otros tramos los retiros se encuentran invadidos por obras civiles de protección, cerramientos, adecuaciones y ampliaciones de zonas verdes en urbanizaciones, las cuales, en la mayoría de las veces, invaden el área de inundación de la quebrada. El cauce presenta un lecho pedregoso con bloques de tamaño métrico a sub-métrico sub-angulares, los cuales se aglomeran en zonas de escasa pendiente, formando pequeñas caídas de agua y pozos. (Área Metropolitana del Valle de Aburrá, 2007).

Después de descender por la vertiente entra en la parte baja, Figura 12, comprendida entre la Transversal Inferior en la cota 1.640 m.s.n.m. y la desembocadura a la altura de la Universidad EAFIT a los 1.500 m.s.n.m., predominando pendientes entre 0 y 12% en la cuenca de la llanura aluvial del río Medellín, donde el enmascaramiento urbano no deja apreciar las características morfométricas del cauce, observándose en los tramos naturales el lecho pedregoso, donde el material transportado se presenta en cantos muy redondeados. El cauce, a la altura de la Universidad EAFIT, se ha modificado con la construcción de un canal y luego de un box culvert hasta la desembocadura en

el Río Medellín. Por la Avenida las Vegas recibe el afluente de los Balsos sobre la margen izquierda (Área Metropolitana del Valle de Aburrá, 2007).

Figura 12. Descripción general de la Microcuenca quebrada La Volcana; división por partes e interacción urbanística y rural.



Fuente: Área Metropolitana del Valle de Aburrá. Plan de ordenación y manejo de la quebrada La Volcana, Municipio de Medellín, Tomo v (Atlas). Noviembre de 2007.

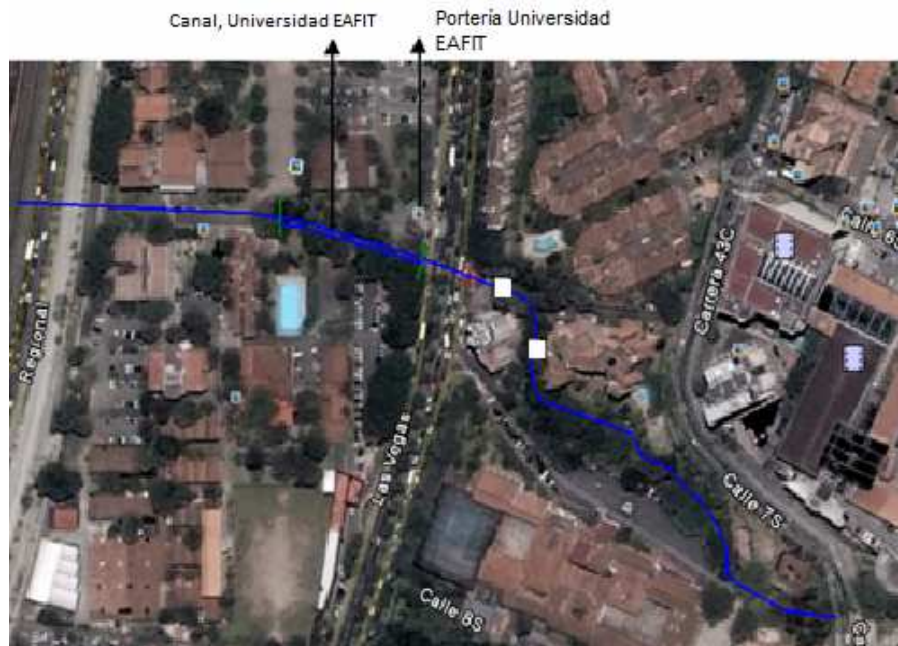
4.1.2 Descripción tramo de estudio Universidad EAFIT

4.1.2.1 Descripción general. En la Figura 13 se muestra el tramo de estudio que se encuentra dentro de la Universidad EAFIT. Está ubicado entre el *box culvert* de la Avenida Las Vegas (Figura 14 parte **Fuente:** google.earth.com.

Figura 14) y un *box culvert* interno (Figura 14 parte b) por el que cruza y desemboca en el Río Aburrá - Medellín. Este sitio se encuentra a una altura respecto al nivel del mar de 1.500 m.s.n.m. El tramo total que se encuentra entre la carrera 43C y la desembocadura en el Río Aburrá-Medellín tiene una longitud de 545 m aproximadamente y específicamente el canal de estudio dentro de la

Universidad tiene 88,75 m, como se muestra en la Figura 14 parte b de una forma general y más específicamente las Figura 15 y 16.

Figura 13. Ubicación general tramo de estudio uno. Extraída de Google Earth. Portería Universidad EAFIT.



Fuente: google.earth.com.

Figura 14. a) Box culvert de la avenida las Vegas, b) agua abajo del box culvert, avenida las Vegas.



Fuente: Elaboración propia.

Figura 15. Box culvert dentro de la universidad EAFIT, b) Agua arriba del Box culvert dentro de la universidad EAFIT.



a)

b)

Fuente: Elaboración propia.

Figura 16. Fotografía general del tramo de estudio dentro de la universidad EAFIT, desde el puente peatonal que cruza la quebrada.

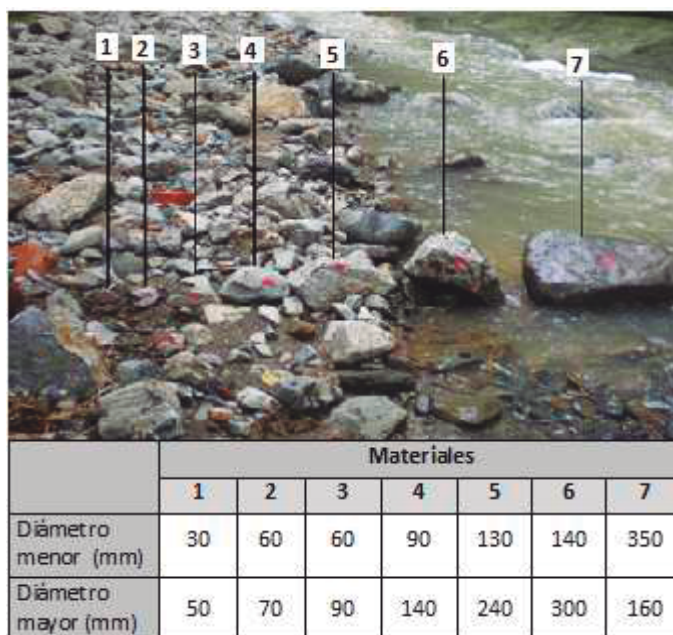


Fuente: Elaboración propia.

4.1.2.2 Pendiente y geomorfología. Instrumentos utilizados para la medición: Lienza, 2 Jalones, el nivel Abney, y el nivel Locke.

- **Pendiente:** El tramo se subdividió en segmentos y en cada porción se medía el ancho del canal y las diferencias de nivel con el Nivel Abney y el Nivel Locke, con lo que se encontró la pendiente promedio.
- **Geomorfología:** La descripción del diámetro promedio de algunos materiales característicos se muestra en la Figura 17 y están señalados con un punto rojo, de izquierda a derecha de diámetros menor a mayor. En general, éstos son los materiales característicos de un río de montaña.

Figura 17. Diferentes granulometrías con su respectiva tabla de diámetros, tramo U. EAFIT.



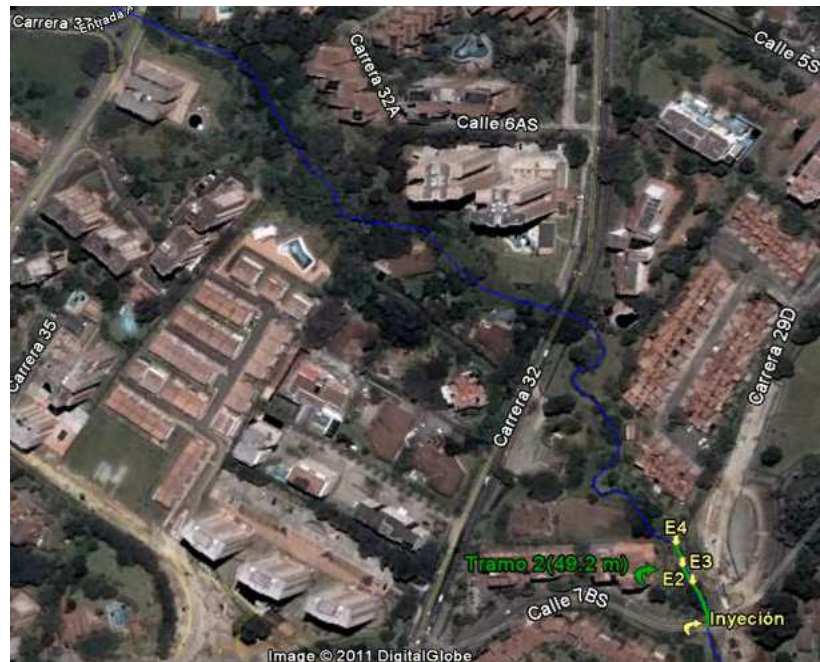
Fuente: Elaboración propia.

Dentro de los materiales que se midieron no hay diámetros inferiores a 2 mm, pero se aclara que se encontraba buena cantidad de arena. Como se ve en la Figura 17. Los materiales 1 y 2 se clasifican como gravas, los materiales 3, 4 y 5 se clasifican como cantos y por último los materiales 6 y 7 se clasifican como bolos. Es importante anotar que antes del invierno del año 2011 no se encontraba en el

canal todo este material, esto muestra la gran capacidad que tienen los caudales picos para transportar material en ríos de montaña.

4.1.3 Descripción del tramo de estudio 2 (aguas arriba carrera 32). En la Figura 18 se muestra el tramo de estudio dos. Se encuentra entre la Transversal Inferior (Carrera 32) y la Calle 7B Sur. Está a una altura respecto al nivel del mar de 1.649 m.s.n.m. El tramo total de estudio tiene una longitud de 49,2 m.

Figura 18. Ubicación tramo de estudio dos.



Fuente: google.earth.com.

Este tramo de estudio fue escogido porque tiene condiciones geomorfológicas e hidráulicas de un cauce natural en ríos de montaña, caracterizado como un tramo de escalón-pozo (López, 2005) lo cual permite generar un contraste con el tramo que pasa por la Universidad EAFIT.

La descripción del tramo de estudio se compone de escalon-pozo, como se muestra en la Figura 19.

Figura 19. a) Fotografía desde la estación 4, aguas arriba, b) fotografía aguas bajo de la estación de inyección y c) Descripción geomorfológica local, escalón-pozo.



Fuente: Elaboración propia.

4.2 ENSAYOS DE CAMPO

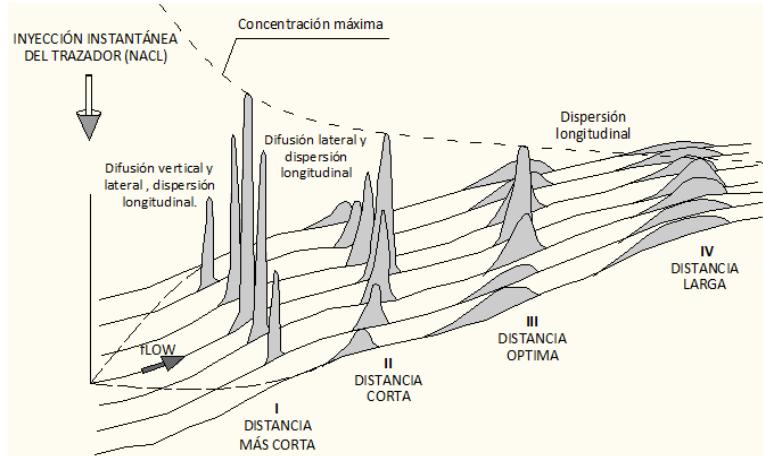
Los ensayos de campo se realizarán en la quebrada La Volcana. En ésta se escogieron dos tramos de estudio: uno en la Universidad Eafit; que está próximo a desembocar en el Río Aburrá del municipio de Medellín y el otro se seleccionó río arriba del primer tramo.

Los ensayos de campo pretenden medir cómo se desarrolla el transporte por difusión y por advección de una sustancia soluble a través de uno o varios tramos de estudio, estableciendo en el tramo diferentes estaciones de medición. La metodología que se utiliza para la salida de campo de la quebrada La Volcana se basa en el manual de Kilpatrick y Wilson (1982) para tiempos de viaje, aplicable a diferentes tipos de trazadores. En estos ensayos se usará NaCl como sustancia trazadora, de tal modo que será utilizado el manual de medición del caudal en

corrientes de montaña usando el método de la dilución de sal por Merz y Doppmann (2006). Toda la metodología que se adaptó para la quebrada La Volcana se anexa en el apéndice A.

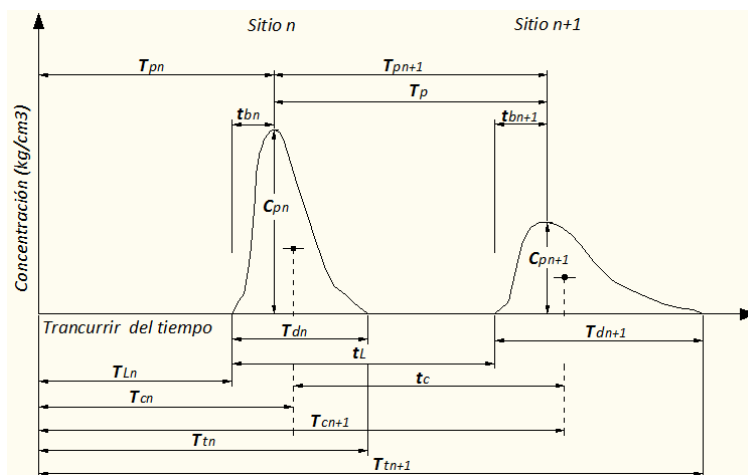
Las estaciones de medida están a una distancia del punto de inyección lo suficientemente larga para que se establezca una mezcla completa en la sección transversal (después de la Distancia Larga (IV), Figura 20. En la salida de campo primero se toma la conductividad base de la corriente (la conductividad sin la inyección del trazador), luego se procede a la inyección puntual del trazador, y en este instante la masa inyectada comienza su proceso de transporte; en dos puntos a lo largo del eje longitudinal del cause, río abajo de la Distancia Larga (IV), Figura 20, se encuentran dos estaciones de medida, Figura 21 , en las cuales se registra el paso del soluto o el trazador, esto se registra con un conductímetro a intervalos de tiempo en que se capte la variabilidad y durante un tiempo suficiente en que se registre la totalidad de la nube del trazador inyectado. Con esto se obtiene la curva de conductividad-tiempo en cada estación, pero en la modelación es pertinente transformar la curva conductividad-tiempo por concentración-tiempo (Figura 21). Entonces las medidas de conductividad se transforman a concentración del soluto por unidad de volumen con un coeficiente de calibración propio del aparato hallado en el laboratorio, para más detalles mirar Apéndice A.

Figura 20. Formas de viaje de una inyección instantánea de un soluto en una canal natural.



Fuente: Elaboración propia.

Figura 21. Comportamiento Concentración-Tiempo en dos secciones a lo largo del cauce aguas abajo de la inyección instantánea del trazador.



Fuente: Elaboración propia.

Donde:

T_L , es el tiempo transcurrido hasta empezar la curva de respuesta en un punto de muestreo.

T_p , es el tiempo transcurrido entre las concentraciones pico (C_p) de la curva de respuesta en los dos puntos de muestreo.

T_c , es el tiempo transcurrido hasta llegar al centroide de la curva de respuesta en un punto de muestreo.

T_t , es el tiempo transcurrido hasta el borde de ataque de la curva de respuesta en un punto de muestreo.

Todos los otros tiempos de la Figura 21 son función de los tiempos T_L , T_p , T_c , y T_t .

En el proceso de toma de datos es importante tener un criterio que corrobore que las muestras fueron bien ejecutadas, este criterio se sustenta en un parámetro, el cual se denomina estado de ganancia estable (SSG). En el caso en que SSG esté en el rango de 0,95 a 1,05 los datos se aceptan, en el caso contrario, se hace necesario ampliar la longitud de mezcla escogida o se cambia la estación de medida. La ecuación de SSG es:

$$SSG = \int C_2 \partial t / \int C_1 \partial t \quad 4.1$$

Esta ecuación es la relación del balance de masas del trazador inyectado entre dos estaciones consecutivas (Figura 21), lo cual se cumple si no hay ni salida ni entrada de caudal; caudal permanente (Kilpatrick y Wilson, 1982).

Los tiempos que se desprenden de la toma de datos necesarios para la modelación se encuentran en las curvas de concentración-tiempo entre dos estaciones consecutivas (Figura 21).

4.3 INFORMACIÓN DE OTRAS FUENTES

Para complementar los análisis, se utilizaron los datos tomados por Ricardo González para su tesis doctoral (2008), quien suministró amablemente todos los experimentos hechos con trazadores realizados por Cantor (2006), en el tramo de estudio la Calera en el Río Teusacá, el cual es un afluente del Embalse San

Rafael, que abastece de agua potable a la ciudad de Bogotá. En contraste con los tramos escogidos en la quebrada La Volcana, en este río, se escogió sólo un tramo. En este tramo de análisis se cuenta con la información de las curvas de Concentración-Tiempo entre tres estaciones de medida a diferentes longitudes.

5. MODELACIÓN CON LOS DIFERENTES MÉTODOS Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

Para el modelo ADE se usaran los métodos numéricos explícitos Upwind y QUICKEST y el método implícito Crank Nicholson en la quebrada La Volcana y en el Río Teusacá el método QUICKEST y el método de Crank Nicholson. Para el modelo TS el esquema de Crank Nicholson.

5.1 EVALUACIÓN DE LOS COEFICIENTES DE TRANSPORTE

Los coeficientes de transporte para el modelo ADE y TS que se infieren de los datos tomados en campo son: el coeficiente de dispersión K , ecuación (5.1), velocidad promedio de la sección transversal U , ecuación (5.2) y el área transversal 'efectiva'. Para evaluar el coeficiente de dispersión, se utilizará la técnica de momentos (Potter y Wiggert, 2002).

$$K = \frac{1}{2} U^2 \frac{\sigma_t^2(E_2) - \sigma_t^2(E_1)}{T_{C2} - T_{C1}} \quad 5.1$$

T_c , es el tiempo transcurrido hasta llegar al centroide de la curva de respuesta en un punto de muestreo, como se mostró en la Figura 21. $\sigma_t^2(E)$ es la variancia temporal en una estación de medida (E), la cual es la medida de la dispersión alrededor del centroide de la concentración promediada a través de la sección transversal.

$$U = \frac{x_2 - x_1}{T_{C2} - T_{C1}} \quad 5.2$$

Donde x es la ubicación de la estación de medida referente al punto de inyección. Los coeficientes para evaluación del comportamiento de los modelos matemáticos son: error cuadrático medio (s), ecuación (5.3), y el coeficiente de determinación

(R^2), ecuación (5.4). Según Rodríguez (citado en Gonzáles, 2008), R^2 , es el coeficiente que posiblemente más usan en la literatura hidrológica para evaluar el comportamiento de los modelos matemáticos. Este estimador representa el porcentaje o proporción de veces que los datos de campo son explicados por la modelación matemática.

$$s = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (c_i - \hat{c})^2} \quad 5.3$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (c_i - \hat{c})^2}{\sum (c_i - \bar{c})^2} \quad 5.4$$

Donde n es el número de datos, c_i son los datos observados, \hat{c} son los datos calculados o modelados y \bar{c} es la media de los valores observados.

5.2 USO DEL MODELO ADE PARA PREDECIR EL TRANSPORTE DE SOLUTO EN LOS DIFERENTES TRAMOS

Se realizará la modelación del transporte de soluto para todos los tramos de análisis sin variar la velocidad promedio en la sección transversal (U), ecuación, 5.2, pero con tres coeficientes de dispersión (K) diferentes: el primer coeficiente de dispersión empírico para las modelaciones, es el encontrado con los datos de campo, $K_{(\text{ensayo})}$; luego se cambiará el coeficiente de dispersión encontrado en campo ($K_{(\text{ensayo})}$) por $K_{(\text{modificación 1})}$, con el propósito de mejorar la modelación, tanto desde el punto de vista cualitativo (ajuste visual de las curva modelada a la obtenida en campo) como desde el punto de vista cuantitativo (mejorar los coeficientes estadísticos s y R^2), y por último se cambiará el coeficiente de dispersión $K_{(\text{modificación 1})}$ por un $K_{(\text{modificación 2})}$, esto con el propósito de observar cómo cambia la modelación en la condición límite en que coinciden la concentración máxima del modelo con la concentración máxima de los datos de

campo. Entonces se modifica el coeficiente de dispersión en los puntos extremos comprendidos entre $K_{(\text{ensayo})}$ y $K_{(\text{modificación } 2)}$, más la modificación de este coeficiente en un punto intermedio, todo con el propósito de observar cómo al cambiar el coeficiente empírico de difusión se mejoran las modelaciones.

Los métodos numéricos que se usaron para la modelación en la quebrada La Volcana son: el Upwind, QUICKEST y Crank Nicholson. La modelación en los dos tramos de esta quebrada se usará como parámetro de estabilidad la restricción del método numérico Upwind: $Ne \leq 0.5$ y $Cr \leq 1$.

En la modelación del tramo de Río Teusacá no se usará el método Upwind, para ampliar los límites de estabilidad y comparar la cantidad de pasos que genera el método QUICKEST y el método de Crank Nicholson.

Los coeficientes que determinan el comportamiento matemático de los modelos, el error cuadrático medio ($\bar{\epsilon}$) y el coeficiente de determinación (R^2), se realizará con la curva de concentración-tiempo modelada con el método numérico de Crank Nicholson en contraste con la curva concentración-tiempo hallada en campo.

La modelación se realizará entre dos estaciones de medida, por tal motivo las condiciones iniciales son los datos de campo de la primera estación para predecir el comportamiento en la siguiente estación.

5.1.1 Tramos Universidad Eafit y Transversal Inferior. El objetivo de análisis de los dos tramos se sustenta en comparar dos condiciones geomorfológicas diferentes, con la intención de ver cómo se comporta el modelo y no con el objeto de realizar conclusiones de carácter físico. El tramo de la Universidad EAFIT se clasifica geomorfológicamente como un rápido y está ubicado en las inmediaciones de la desembocadura en el Río Aburrá, tiene características muy particulares por ser un canal revestido en concreto, pero por un evento hidrológico extremo se llenó del

material que contienen los ríos de montaña. El tramo de la Transversal Inferior tiene características geomorfológicas típicas de ríos de montaña, clasificadas como escalón pozo, se encuentra ubicada en la zona media de la quebrada, Figura 12.

5.1.1.1 Tramo Universidad EAFIT. En la Tabla 6 se muestran los datos necesarios en la modelación para los tres coeficientes de dispersión (K) utilizados, donde: T_{c1} es el tiempo al centroide de la curva (concentración-tiempo) que se establece en las condiciones iniciales (E3), T_{c2} es el tiempo al centroide de la curva (concentración-tiempo) que se establece en el sitio que se pretende modelar, estación cuatro (E4), X_1 es la distancia de la estación de las condiciones iniciales (E3) y X_2 es la distancia de la estación en donde se pretende proyectar la modelación, estación 4 (E4).

Tabla 6. Datos requeridos por la modelación y coeficientes para evaluar el comportamiento de los modelos matemáticos. Universidad EAFIT.

| UNIVERSIDAD EAFIT | | | | | |
|----------------------------|------|---------------------------------|------|---------------------------------|------|
| CONDICIONES INICIALES (E3) | | CONDICIONES DE LA ESTACIÓN (E4) | | CONDICIONES DE LA ESTACIÓN (E4) | |
| 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |
| 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 | 0.00 |

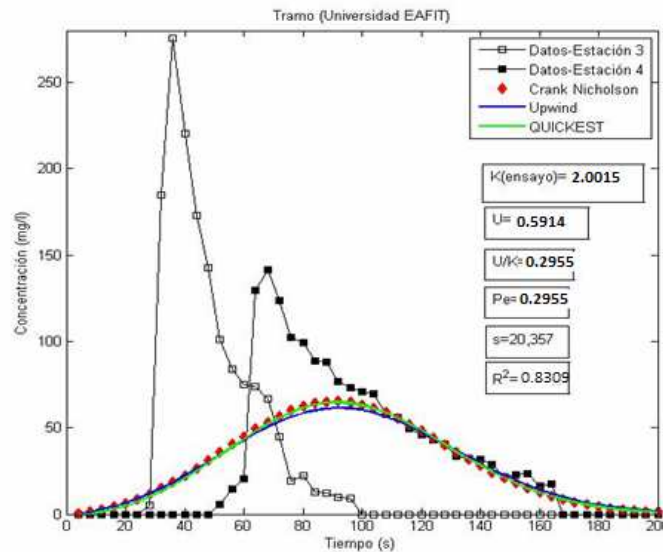
Fuente: Elaboración propia.

Los datos de la Tabla 6 son los valores de entrada para la modelación, cuyo algoritmo se programó en MatLab para los diferentes métodos numéricos. En la

Figura 22 se muestran los resultados de la modelación para los coeficientes empíricos (U y $K_{(\text{ensayo})}$) encontrados con los datos en campo con la ecuaciones (5.1 y 5.2).

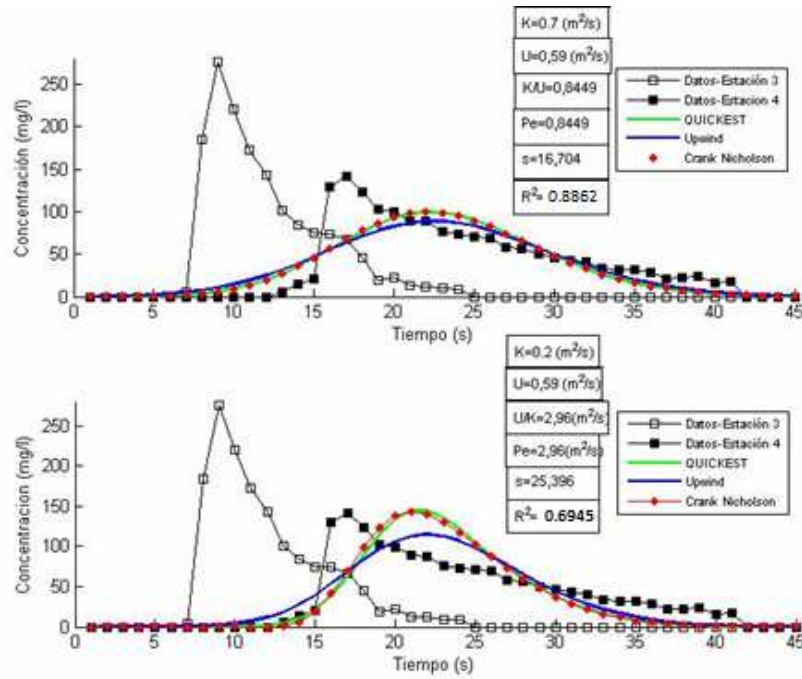
En la se muestran las modelaciones cambiando el coeficiente de difusión encontrado en campo ($K_{(\text{ensayo})}$) por el $K_{(\text{modificación 1})}$ y $K_{(\text{modificación 2})}$; con el $K_{(\text{modificación 1})}$ se busca obtener un mejor ajuste a los parametros estadísticos, s y R^2 ; luego se procede con $K_{(\text{modificación 2})}$, que es el coeficiente de difusión límite, en donde la curva concentración-tiempo de campo y la curva de concentración-tiempo modelada coincidan en la concentración máxima (Figura 23).

Figura 22. Modelación tramo Universidad EAFIT con el coeficiente de 2.0015 m²/s.



Fuente: Elaboración propia.

Figura 23. Modelación tramo Universidad EAFIT con los coeficientes de dispersión asumidos. a) Con $K=0,7 \text{ m}^2/\text{s}$ y b) con $K=0,2 \text{ m}^2/\text{s}$.



Fuente: Elaboración propia.

El tiempo de modelación que se usó para todas las modelaciones de este capítulo (5.1), es el tiempo entre los centroides de las dos curvas concentración-tiempo de los datos de campo (Figura 21).

El mejor ajuste se logró para un coeficiente de difusión igual a $k(\text{m}^2/\text{s}) = 0.7$, el cual es diferente al encontrado con los datos de campo. En este coeficiente de difusión se obtuvieron los parámetros estadísticos que reflejan el mejor comportamiento (observar s y R^2 en la Figura 22 y Figura 23).

En la Figura 23 se muestra que el coeficiente de difusión que más se aproxima a la concentración máxima es de $k(\text{m}^2/\text{s}) = 0.2$, que no es el mejor ajuste estadístico logrado con los dos coeficientes de difusión modificados.

Se observa en la comparación de la curva de concentración-tiempo de los datos de campo y la curva de concentración-tiempo de los datos modelados (en la estación 4 (E4)) con $K_{\text{(modificación 2)}}$ que el tiempo entre las concentraciones máximas no coinciden, se presenta un transporte advectivo con un desfase muy notorio y no se logra un R^2 mayor o igual a 0,95. A esta modelación no se le puede atribuir un significado físico, porque faltaría hacer más pruebas de campo, pero sí se puede puntualizar que es un comportamiento muy particular comparado con todos los otros tramos analizados en el transcurrir del presente trabajo de investigación, porque en éstos al hacer coincidir las concentraciones máximas de la modelación y los datos de campo se obtienen buenos resultados (R^2 mayor o igual a 0,95) y se podría generar la hipótesis que el comportamiento de los datos de campo, donde se presenta un comportamiento ascendente muy abrupto (Figura 22), se debe a un alto componente de transporte advectivo, lo cual requiere ser corroborado con otro trabajo investigativo en donde se presente un diseño en las pruebas de campo.

5.1.1.2 Tramo Transversal Inferior. En la Tabla 7 se muestran los datos necesarios para la modelación y los tres coeficientes de dispersión K utilizados, donde: T_{c1} es el tiempo a el centroide de la curva (concentración-tiempo) que se establece en las condiciones iniciales, T_{c2} es el tiempo a el centroide de la curva (concentración-tiempo) que se establece en el sitio que se pretende modelar, estación 4 (E4). X_1 es la distancia de la estación de las condicione iniciales y X_2 es la distancia de la estación en donde se pretende proyectar la modelación, estación 4.

Tabla 7. Datos requeridos por la modelación para evaluar el comportamiento de los modelos matemáticos en la Transversal Inferior.

| Transversal Inferior | | | | | |
|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|----------------------|
| Estación 3 | | Estación 4 | | Estación 5 | |
| Concentración (mg/l) | Concentración (mg/l) | Concentración (mg/l) | Concentración (mg/l) | Concentración (mg/l) | Concentración (mg/l) |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 50 | 50 | 50 | 50 | 50 | 50 |
| 100 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 |
| 150 | 150 | 150 | 150 | 150 | 150 |
| 200 | 200 | 200 | 200 | 200 | 200 |
| 250 | 250 | 250 | 250 | 250 | 250 |
| 300 | 300 | 300 | 300 | 300 | 300 |
| 350 | 350 | 350 | 350 | 350 | 350 |
| 400 | 400 | 400 | 400 | 400 | 400 |
| 450 | 450 | 450 | 450 | 450 | 450 |
| 500 | 500 | 500 | 500 | 500 | 500 |
| 550 | 550 | 550 | 550 | 550 | 550 |
| 600 | 600 | 600 | 600 | 600 | 600 |
| 650 | 650 | 650 | 650 | 650 | 650 |
| 700 | 700 | 700 | 700 | 700 | 700 |
| 750 | 750 | 750 | 750 | 750 | 750 |
| 800 | 800 | 800 | 800 | 800 | 800 |
| 850 | 850 | 850 | 850 | 850 | 850 |
| 900 | 900 | 900 | 900 | 900 | 900 |
| 950 | 950 | 950 | 950 | 950 | 950 |
| 1000 | 1000 | 1000 | 1000 | 1000 | 1000 |

Fuente: Elaboración propia.

En la Tabla 7 se presentan los valores para modelar los diferentes métodos numéricos. Los resultados de la modelación para los coeficientes empíricos, encontrados con los datos en campo, U y $K_{(ensayo)}$, se muestran en la Figura 24 y en la Figura 25 se muestran las modelaciones cambiando el coeficiente de difusión K , buscando ajustar mejor los resultados del modelo a los datos de campo.

Figura 24. Modelación en el tramo Transversal Inferior, con el coeficiente de $0,9401 \text{ m}^2/\text{s}$.

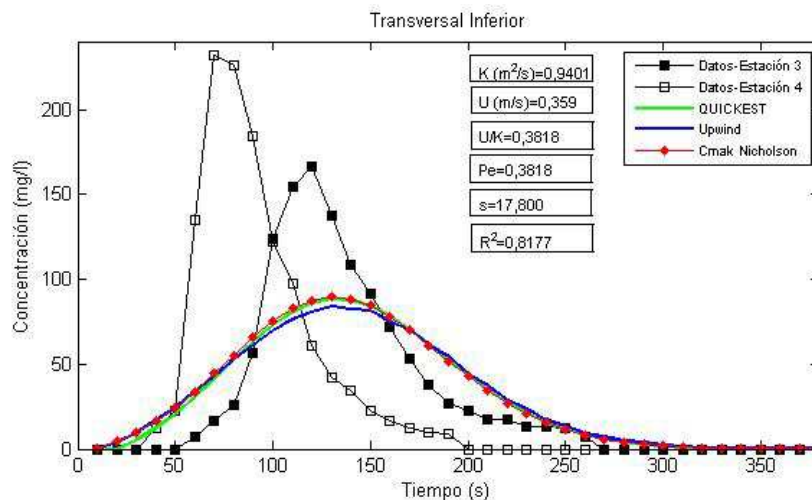
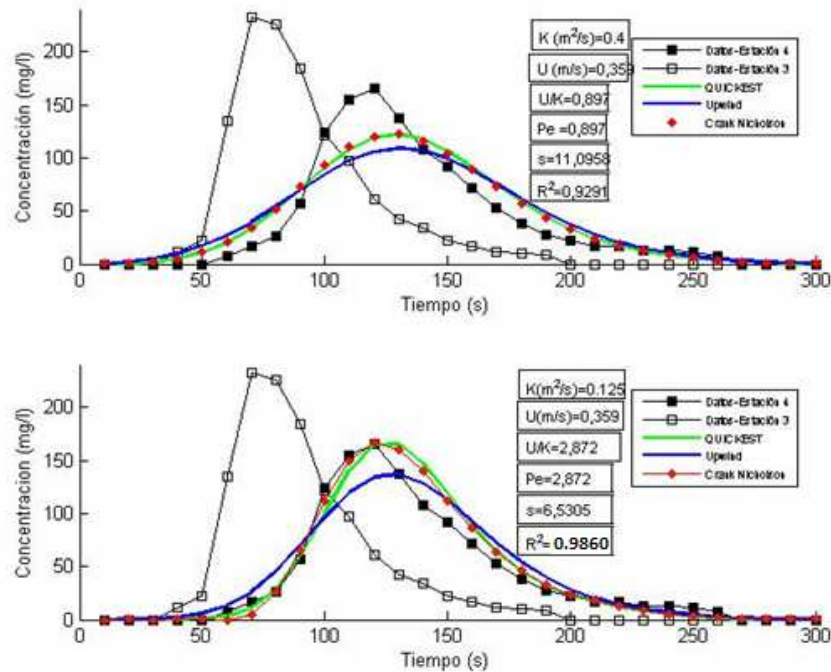


Figura 25. Modelación en el tramo Transversal Inferior, con los dos coeficientes asumidos.
 a) Con $K=0.4 \text{ m}^2/\text{s}$ y b) con $K=0.125 \text{ m}^2/\text{s}$.



Fuente: Elaboración propia.

A diferencia de las modelaciones realizadas para el tramo en la Universidad EAFIT, en este caso la modelación que mejor se ajusta a los datos de campo también coincide con la concentración máxima. El coeficiente de difusión que mejor se ajustó fue de $k(\text{m}^2/\text{s}) = 0.125$, ver Figura 25 en la parte baja. El coeficiente de determinación R^2 es de 0,986, por lo que se aumenta considerablemente el ajuste de la modelación comparado con la modelación hecha con el coeficiente de difusión de campo de: $k(\text{m}^2/\text{s}) = 0.9401$ que tiene el coeficiente de determinación R^2 igual a 0,8177.

En la Tabla 8 se muestra la comparación entre el error R^2 para el coeficiente de difusión hallado en campo K_{ensayo} y el coeficiente de difusión que genera el mejor ajuste K para los dos tramos de análisis de la quebrada La Volcana. Se muestra para los dos tramos el porcentaje que cambió del coeficiente a calibrar.

Tabla 8. Coeficientes de difusión y parámetro del error para analizar las modelaciones en los diferentes tramos.

| | | | | | |
|--------|--------|-------|-------|--------|--------|
| 0,8309 | 0,8866 | 0,818 | 0,957 | 0,8309 | 0,8866 |
| 0,8309 | 0,8866 | 0,818 | 0,957 | 0,8309 | 0,8866 |
| 0,8309 | 0,8866 | 0,818 | 0,957 | 0,8309 | 0,8866 |
| 0,8309 | 0,8866 | 0,818 | 0,957 | 0,8309 | 0,8866 |

Fuente: Elaboración propia.

En el tramo de EAFIT se cambió en un 65% el K para lograr mejorar el R^2 de ajuste de 0,8309 a 0,8866, el cambio de K fue mucho para lo lograr una mejora tan pobre (Tabla 8). Para el caso del tramo de la Inferior se cambió en un 86,7% el K para lograr mejorar el R^2 de ajuste de 0,818 a 0,957, lo que genera una muy buena aproximación, a pesar de que se tuvo que modificar el coeficiente de difusión en un 86,7% (Tabla 8).

Lo descrito en el párrafo anterior, muestra la diferencia de ajuste en la modelación para los dos tramos, de lo cual no se puede concluir por la falta de ensayos, pero con el tramo de análisis del Río Teusacá (sub-capítulo 5.1.2.) se podrán evidenciar nuevas modelaciones, que tampoco serán concluyentes desde el punto de vista físico, pero sí se podrán enunciar nuevas hipótesis.

Así el coeficiente de difusión longitudinal encontrado en campo ($K_{(ensayo)}$) sea modificado entre un 65% y un 86% para ajustar el modelo en los dos tramos de análisis de la Universidad EAFIT y la Transversal Inferior, el $K_{(ensayo)}$ es un buen punto de partida para calibrar la modelación, porque como se mostró en el Sub-capítulo 2.4 (CÁLCULO DE COEFICIENTES DE TRANSPORTE) el rango en que varía el coeficiente de difusión longitudinal (K) varía en órdenes de magnitud mucho mayor.

5.1.2 Tramo Río Teusacá. Uno de los afluentes del Embalse de San Rafael es el Río Teusacá, este embalse pertenece al sistema de suministro de agua potable

para la ciudad de Bogotá, el Río Teusacá se encuentra intervenido por la contaminación urbana del municipio de La Calera y conexiones que depositan directamente el agua a la corriente y no al alcantarillado municipal, ocasionando que el agua tenga una mala calidad (Camacho y Cantor, 2006).

El tramo de estudio se encuentra ubicado aguas abajo del Embalse San Rafael y del municipio de La Calera, el cual está constituido por características típicas de un río de montaña; cantos y bolos, diferentes macrorugosidades y secuencia alternadas de piscinas y rápidos, ver Figura 26.

Figura 26. Río Teusacá desde Sitio 1 hacia aguas arriba.



Fuente: Camacho y Cantor (2006).

Cantor (citado por González, 2008) realizó once experimentos con trazadores bajo diferentes caudales. De los once experimentos en el presente trabajo de investigación sólo se tomaron tres para las modelaciones, como se muestra en la Tabla 9.

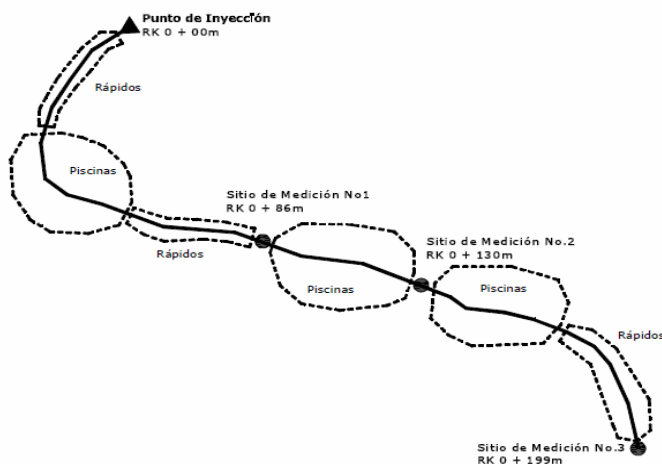
Tabla 9. Características puntuales de los experimentos realizados con trazadores ejecutados en el tramo La Calera en el Río Teusacá.

| Experimento | Masa Inyectada (kg) | Longitud de modelación (m) | Q (lt/s) |
|-------------|---------------------|----------------------------|----------|
| TC2-s1s2 | 5 | 44 | 369,8 |
| TC2-s1s3 | 5 | 112,7 | 369,8 |
| TC2-s2s3 | 5 | 68,7 | 369,8 |

Fuente: Elaboración propia.

Los datos de campo para la modelación en este tramo de estudio fueron suministrados por González (2008). Se escogió este tramo porque representa las características geomorfológicas e hidráulicas de un río de montaña y porque tiene tres estaciones de medida, esto posibilita hacer la modelación desde la estación N_o 1 a la estación N_o 2, de la estación N_o 1 a la estación N_o 3 y de la estación N_o 2 a la estación N_o 3, (Figura 27). En la Figura 27 se muestra cómo desde la estación N_o 1 a la estación N_o 2 hay un tramo de piscinas, en la longitud comprendida entre la estaciones N_o 2 y 3 se encuentra un tramo de rápido y un tramo de piscina, y por último de la estación N_o 1 a la estación N_o 3 dos tramos de piscinas y un tramo de rápido, a través de estos tres tramos de modelación se puede observar cómo cambian los coeficientes empíricos de modelación del transporte de soluto. También se escogieron estos ensayos para contrastarlos con las modelaciones hechas en la quebrada La Volcana.

Figura 26. Esquema de sitios de medición, Río Teusacá.



Fuente: Camacho y Cantor (2006).

5.1.2.1 Modelación desde las condiciones iniciales en el sitio de medición No. 1 hasta el sitio de medición No. 2. Los datos de la Tabla 10 son los valores obtenidos en campo que son necesarios introducirlos en el programa numérico ejecutado en MatLab para realizar la modelación del transporte de soluto en la estación 2 con las condiciones iniciales de la estación 1.

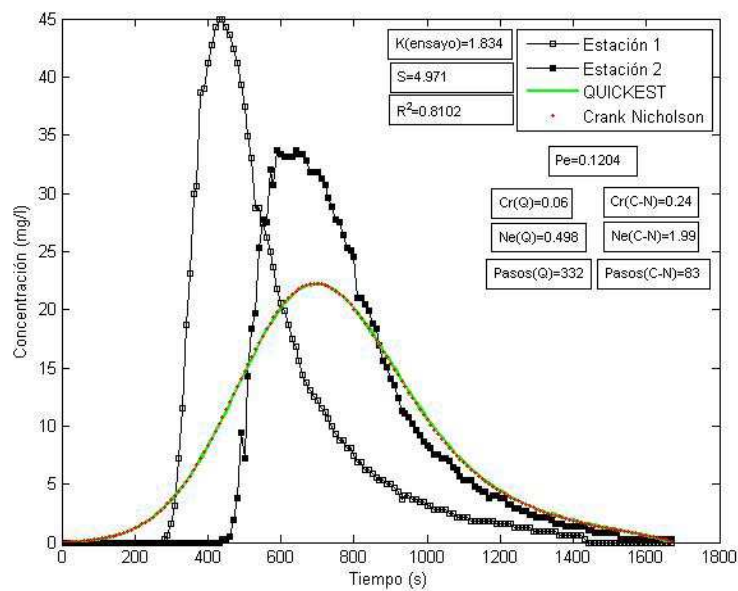
Tabla 10. Datos de entrada obtenidos en campo necesarios para realizar la modelación de transporte de soluto entre la estación 1 y estación 2.

| Río Teusacá entre la estación 1 y la estación 2 | | | | | |
|---|---------|--------------------------------|---------|--------------------------------|---------|
| K (ensayo) | | K (modificación 1) | | K (modificación 2) | |
| X1 (m) | 86 | X1 (m) | 86 | X1 (m) | 86 |
| X2 (m) | 130 | X2 (m) | 130 | X2 (m) | 130 |
| Tc1 (s) | 489,483 | Tc1 (s) | 489,483 | Tc1 (s) | 489,483 |
| Tc2 (s) | 688,697 | Tc2 (s) | 688,697 | Tc2 (s) | 688,697 |
| Tiempo final de toma datos (s) | 1660 | Tiempo final de toma datos (s) | 1660 | Tiempo final de toma datos (s) | 1660 |
| Intervalo de toma de datos (s) | 10 | Intervalo de toma de datos (s) | 10 | Intervalo de toma de datos (s) | 10 |
| U (m/s) | 0,221 | U (m/s) | 0,221 | U (m/s) | 0,221 |
| K (m ² /s) | 1,834 | K (m ² /s) | 0,8 | K (m ² /s) | 0,39 |
| U/K (1/m) | 0,120 | U/K (1/m) | 0,276 | U/K (1/m) | 0,566 |

Fuente: Elaboración propia.

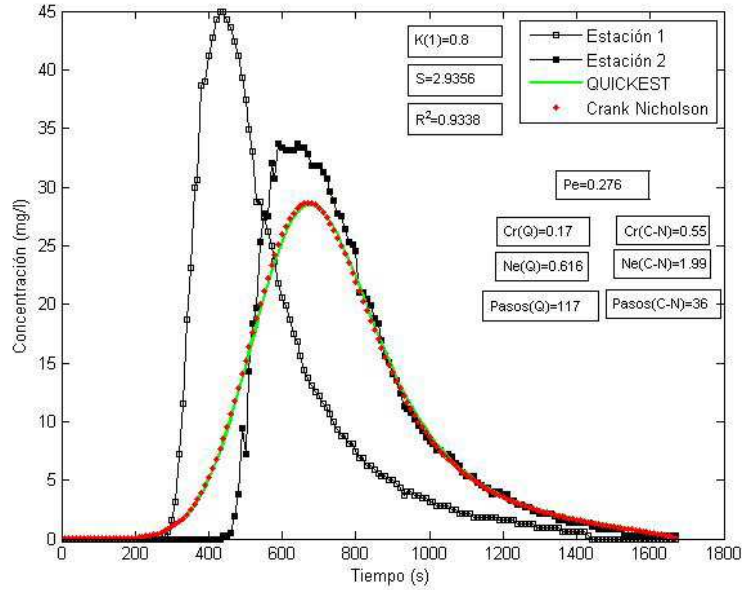
En la Figura 28 se muestra la modelación para el $K_{(ensayo)}$ encontrado con los datos de campo; en la Figura 29 se muestra un K modificando, respecto al original, con la intención de encontrar un mejor ajuste; y para finalizar se muestra la Figura 30 en la cual se identifica un K modificado, con el que se encuentra una modelación que supera un R^2 de 0,95.

Figura 27. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 2, con un coeficiente de difusión de campo $1,834 \text{ m}^2/\text{s}$.



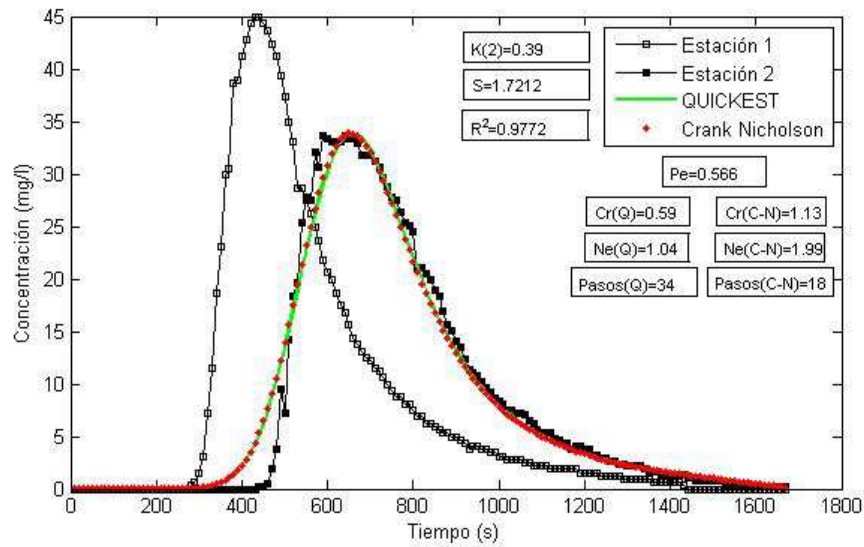
Fuente: Elaboración propia.

Figura 28. Modelación en el tramo del río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 2, con un coeficiente de difusión $0,8 \text{ m}^2/\text{s}$.



Fuente: Elaboración propia.

Figura 29. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 2 con un coeficiente de difusión $0,39 \text{ m}^2/\text{s}$.



Fuente: Elaboración propia.

El mejor ajuste se obtuvo con un K de 0,39 (m²/s) (Figura 30), la diferencia porcentual que se cambió K(ensayo) para ajustar el modelo es de 78,735%, se logró cambiar el coeficiente de determinación R^2 de 0,8102 (Figura 28) a 0,9772 (Figura 30), la cual es buena aproximación del modelo a los datos de campo.

5.1.2.2 Modelación desde las condiciones iniciales en el sitio de medición N_o 2 hasta el sitio de medición N_o 3. En la Tabla 11 se muestran los datos necesarios para cada modelación con los tres coeficientes de dispersión K utilizados. Donde T_{c1} es el tiempo al centroide de la curva concentración-tiempo que se establece en las condiciones iniciales (E2), T_{c2} que es el tiempo al centroíde de la curva concentración-tiempo que se establece en el sitio que se pretende modelar, estación 3 (E3), X_1 que es la distancia de la estación de las condiciones iniciales (E2) y X_2 es la distancia de la estación en donde se pretende proyectar la modelación, estación 3 (E3).

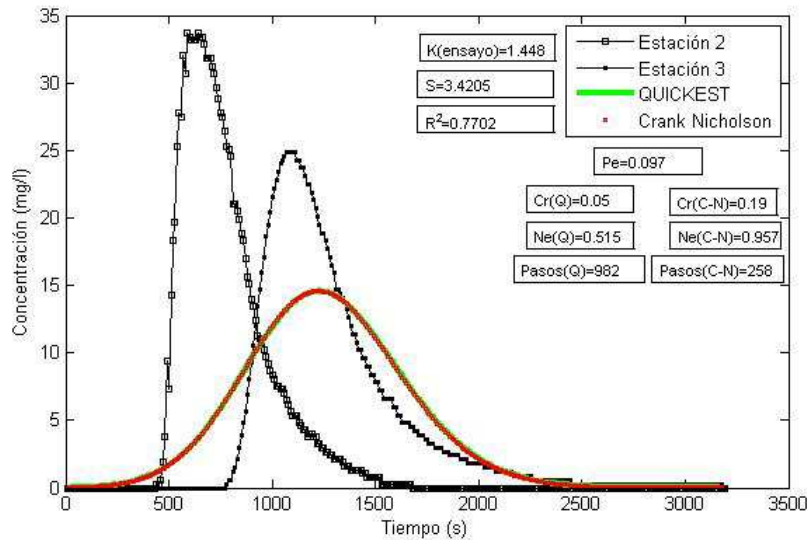
Tabla 11. Datos de entrada obtenidos en campo necesarios para realizar la modelación de transporte de soluto entre la estación 2 y estación 3.

| Río Teusacá entre la estación 2 y la estación 3 | | | | | |
|---|----------|-----------------------------------|----------|-----------------------------------|----------|
| K (ensayo) | | K (modificación 1) | | K (modificación 2) | |
| X1 (m) | 130 | X1 (m) | 130 | X1 (m) | 130 |
| X2 (m) | 199 | X2 (m) | 199 | X2 (m) | 199 |
| Tc1 (s) | 688,697 | Tc1 (s) | 688,697 | Tc1 (s) | 688,697 |
| Tc2 (s) | 1179,699 | Tc2 (s) | 1179,699 | Tc2 (s) | 1179,699 |
| Tiempo final de toma de datos (s) | 3170 | Tiempo final de toma de datos (s) | 3170 | Tiempo final de toma de datos (s) | 3170 |
| Intervalo de toma de datos (s) | 10 | Intervalo de toma de datos (s) | 10 | Intervalo de toma de datos (s) | 10 |
| U (m/s) | 0,141 | U (m/s) | 0,141 | U (m/s) | 0,141 |
| K (m ² /s) | 1,448 | K (m ² /s) | 0,6 | K (m ² /s) | 0,26 |
| U/K (1/m) | 0,0971 | U/K (1/m) | 0,234 | U/K (1/m) | 0,541 |

Fuente: Elaboración propia.

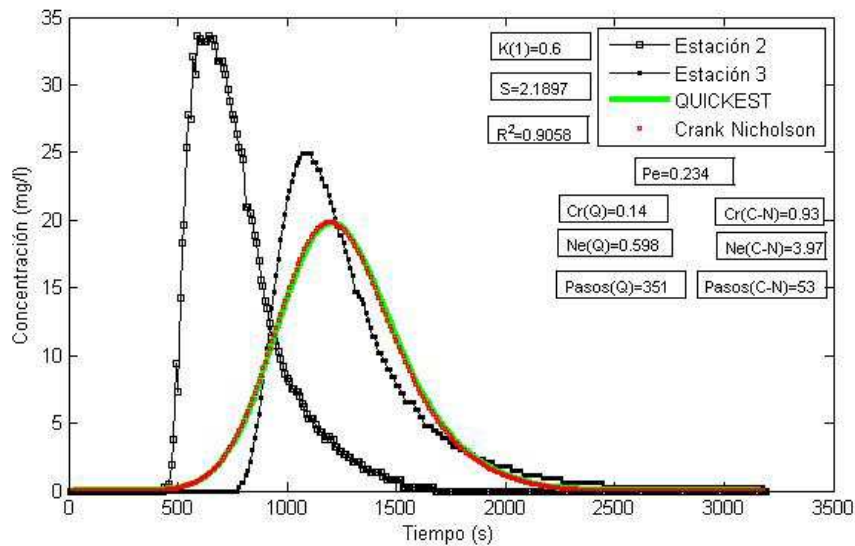
En las Figuras 31, 32 y 33 se presentan los resultados de la simulación para los diferentes valores del coeficiente de difusión K.

Figura 30. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 2 a la estación 3 con un coeficiente de difusión 1,448 m²/s.



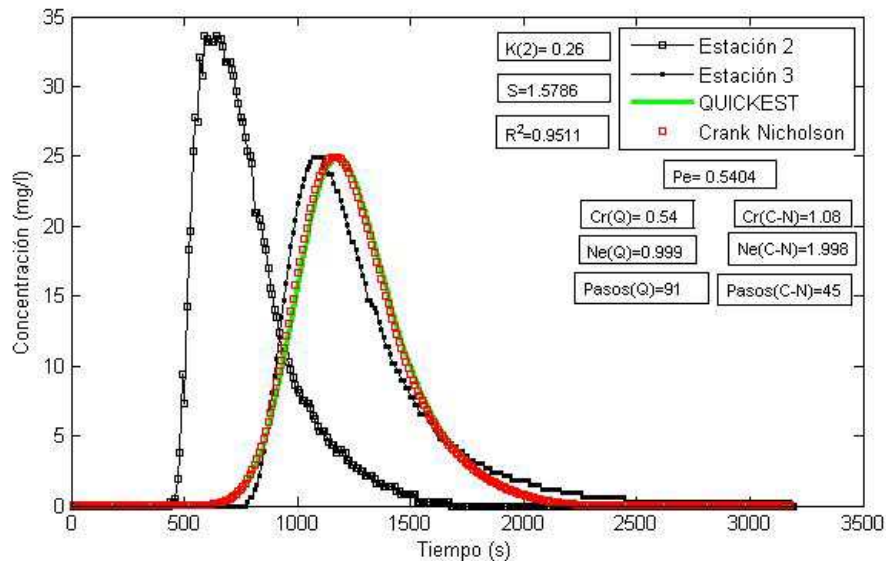
Fuente: Elaboración propia.

Figura 31. Modelación en el tramo del río Teusacá, desde la estación 2 a la estación 3 con un coeficiente de difusión 0,6 m²/s.



Fuente: Elaboración propia.

Figura 32. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 2 a la estación 3 con un coeficiente de difusión 0,26 m²/s.



Fuente: Elaboración propia.

El coeficiente de difusión con que se obtuvo el mejor ajuste es de $K = 0,26$ (m²/s) (Figura 33), la diferencia porcentual que se cambió K para ajustar el modelo es de 82,04%, se logró cambiar el coeficiente de determinación R^2 de 0,77 (Figura 31) a 0,95 (Figura 33) que se considera una buena aproximación del modelo a los datos de campo.

5.1.2.3 Modelación desde las condiciones iniciales en el sitio de medición N_o 1 hasta el sitio de medición N_o 3. En la Tabla 12 se muestran los datos necesarios para la modelación con los tres coeficientes de dispersión (K) utilizados, donde: T_{c1} es el tiempo al centroide de la curva (concentración-tiempo) que se establece en las condiciones iniciales (E1), T_{c2} es el tiempo al centroide de la curva (concentración-tiempo) que se establece en el sitio que se pretende modelar, estación 3 (E3). X_1 es la distancia de la estación de las condiciones iniciales (E1) y X_2 es la distancia de la estación en donde se pretende proyectar la modelación, estación 3 (E3).

Tabla 12. Datos de entrada obtenidos en campo necesarios para realizar la modelación de transporte de soluto entre la estación 1 y estación 3.

| Río Teusacá entre la estación 1 y la estación 3 | | | | | |
|---|----------|--------------------------------|----------|--------------------------------|----------|
| K (ensayo) | | K (modificación 1) | | K (modificación 2) | |
| X1 (m) | 86 | X1 (m) | 86 | X1 (m) | 86 |
| X2 (m) | 199 | X2 (m) | 199 | X2 (m) | 199 |
| Tc1 (s) | 489,483 | Tc1 (s) | 489,483 | Tc1 (s) | 489,483 |
| Tc2 (s) | 1179,699 | Tc2 (s) | 1179,699 | Tc2 (s) | 1179,699 |
| Tiempo final de toma datos (s) | 3170 | Tiempo final de toma datos (s) | 3170 | Tiempo final de toma datos (s) | 3170 |
| Intervalo de toma de datos (s) | 10 | Intervalo de toma de datos (s) | 10 | Intervalo de toma de datos (s) | 10 |
| U (m/s) | 0,164 | U (m/s) | 0,164 | U (m/s) | 0,164 |
| K (m ² /s) | 1,689 | K (m ² /s) | 0,7 | K (m ² /s) | 0,272 |
| U/K (1/m) | 0,097 | U/K (1/m) | 0,234 | U/K (1/m) | 0,602 |

Fuente: Elaboración propia.

En las Figuras 34, 35 y 36 se presentan los resultados de la simulación para los diferentes coeficientes de difusión (K).

Figura 33. Modelación en el tramo Del río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 3 con un coeficiente de difusión 1,689 m²/s.

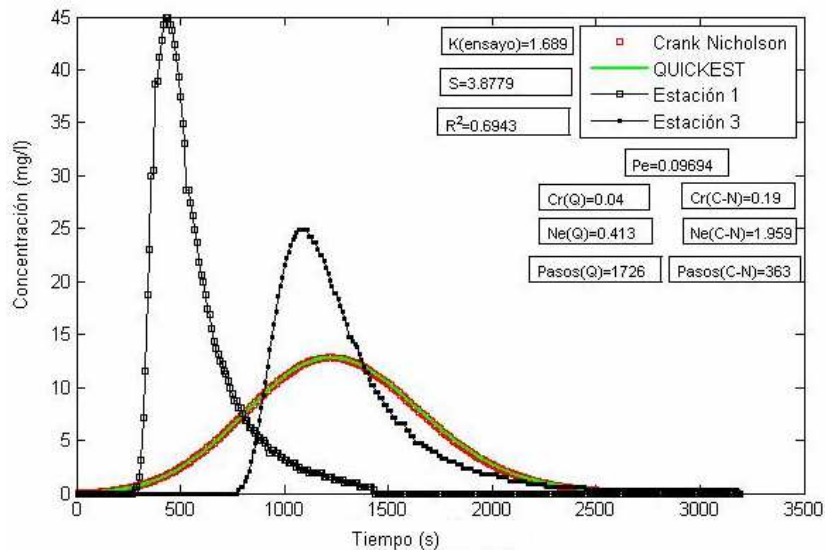
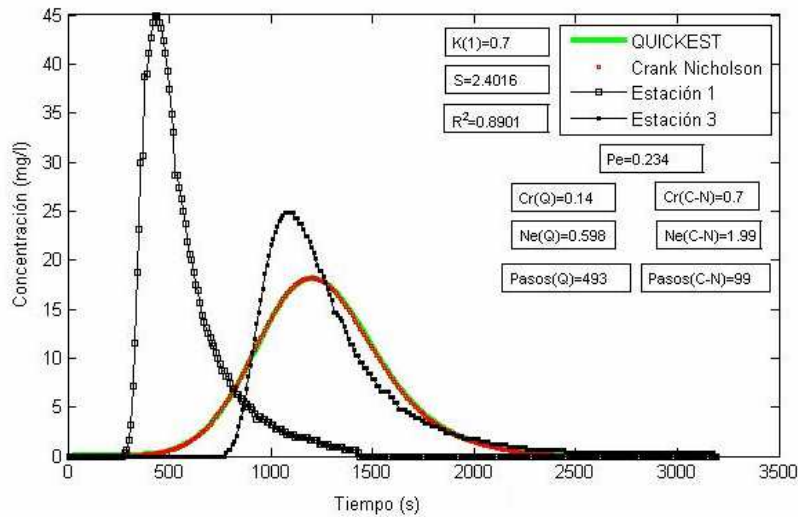
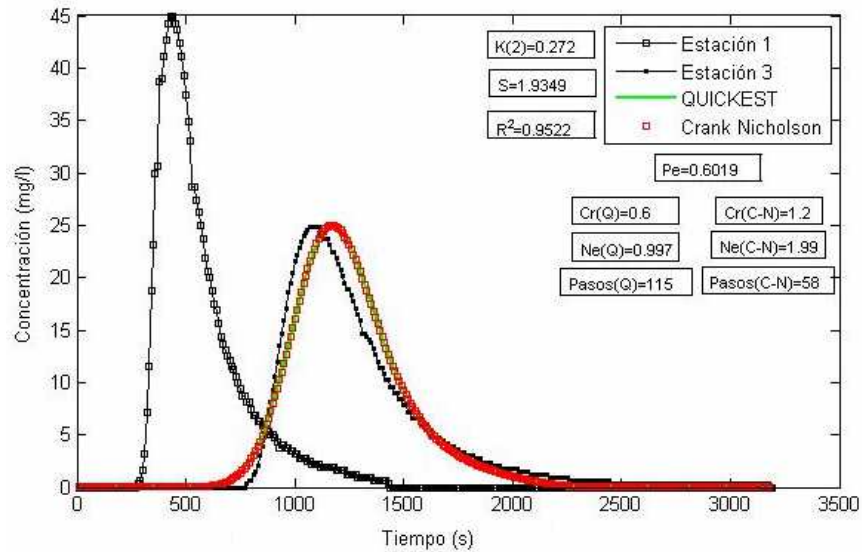


Figura 34. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 3 con un coeficiente de difusión $0,7 \text{ m}^2/\text{s}$



Fuente: Elaboración propia.

Figura 35. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 3 con un coeficiente de difusión $0,272 \text{ m}^2/\text{s}$.



Fuente: Elaboración propia.

En las Figuras 30, 33 y 36 se representa gráficamente la modelación del transporte de soluto más ajustada a los datos de campo (gráficamente y

estadísticamente) en los tres tramos de análisis del Río Teusacá, se observa que el número de pasos computacional para el método numérico de Crank Nicholson (Pasos (C-N)) es menor que para el método numérico QUICKEST Nicholson (Pasos (Q)) en todos los tramos analizados, evidenciando en un caso real de modelación lo que ya se había discutido en el Sub-capítulo 3.3, como el esquema de Crank Nicholson tiene un rango de estabilidad más amplio el número de pasos que se puede lograr al ejecutar la moderación es menor.

El valor de K de mejor ajuste es de 0,272 (m²/s) (Figura 36), la diferencia porcentual que se cambió K para ajustar el modelo es de 83,9%, se logró cambiar el coeficiente de determinación (R^2) de 0,6943 (Figura 34) a 0,9522 (Figura 36) que se puede considerar como una buena aproximación del modelo a los datos de campo.

En la Tabla 13 se muestra un resumen de los análisis hechos para los tres tramos de modelación. Se presentan los diferentes coeficientes de difusión estimados para el ensayo K_{ensayo} y los diferentes coeficientes de difusión para el mejor ajuste y la diferencia porcentual de cambio, acompañado del coeficiente de determinación R^2 para cada caso.

Tabla 13. Coeficientes de difusión, parámetro del error y descripción del tramo para analizar las modelaciones en los diferentes tramos.

| Tramo | K_{ensayo} | K_{ajuste} | Diferencia (%) | R^2 | Descripción del tramo |
|---------|--------------|--------------|----------------|--------|------------------------|
| Tramo 1 | 0,272 | 0,475 | 75,1% | 0,9522 | Tramo superior del río |
| Tramo 2 | 0,272 | 0,475 | 75,1% | 0,9522 | Tramo medio del río |
| Tramo 3 | 0,272 | 0,475 | 75,1% | 0,9522 | Tramo inferior del río |

Fuente: Elaboración propia.

En los tres tramos se observa que para generar una modelación más aproximada; un R^2 que supere el valor del 0,95 (modelación adecuada) hay que disminuir el coeficiente de difusión longitudinal hallado en campo ($K(\text{Ensayo})$) entre un 78% y un 83,9%, como se muestra en la Tabla 13. Se puede tender a pensar que es muy alto el cambio del coeficiente de difusión longitudinal ($K(\text{Ensayo})$), pero se concluye que el $K(\text{Ensayo})$ es un buen valor base, comparado con los coeficientes de difusión longitudinal que se mostraron en el Sub-capítulo 2.4, los cuales tienen un rango de variación mucho más amplio. Entonces de esto se podría establecer una hipótesis: los rangos en que varía el coeficiente de difusión longitudinal hallado en campo ($K(\text{Ensayo})$) para hacer la modelación del transporte de soluto en ríos de montaña con un R^2 que supere el valor del 0,95 está entre un 70% y un 90%, teniendo en cuenta que tan sólo es una hipótesis que tendrá que ser corroborada con una elaboración de un diseño de pruebas de campo que generen los suficientes contrastes.

Una de las causas que sustenta la necesidad de cambio del coeficiente de difusión longitudinal ($K(\text{Ensayo})$), es que en el momento de obtener el coeficiente de difusión K y la velocidad U se asume que el flujo es permanente, lo cual está alejado de la realidad por el alto cambio geomorfológico que se presenta en la sección de estudio, a lo que se le denomina macro rugosidades, todas estas macro rugosidades generan que el transporte del soluto en ríos de montaña tengan un comportamiento muy especial, que aunque se tengan coeficientes encontrados con datos de campo es necesario calibrar el modelo.

En todas las modelaciones hay que disminuir el coeficiente de difusión longitudinal ($K_{(\text{Ensayo})}$), lo que sugiere que las zonas de almacenamiento temporal retrasan el comportamiento difusivo del transporte de soluto en ríos de montaña comparado con la forma en que se obtiene este coeficiente; Sub- capítulo 5.1, ecuación 5.1. Entonces para futuras investigaciones con base en una toma de datos más exhaustiva, tanto entre condiciones geomorfológicas como hidrológicas, se puede

proponer una ecuación más adecuada para ríos de montaña que la ecuación 5.1 que se usó en el presente trabajo de investigación. Que en el fondo lo que se propondría es una discusión con una perspectiva más física del modelo de transporte de soluto en ríos de montaña.

- **Comparación entre las modelaciones echas en la quebrada La Volcana y el Río Teusacá:**

En el único tramo que no se logró obtener un R^2 mayor a 0,95 es el tramo de EAFIT, y además en este tramo, el ajuste de la curva de modelación es muy diferente de los datos ascendentes tomados en campo, de esto no se puede concluir nada, pero sí se puede puntualizar que este tramo es diferente a todos los otros tramos analizados, porque está conformado geomorfológicamente sólo por un rápido, lo que no pasa en los otros tramos que están configurados por secuencia de escalón-pozo. Entonces para poder generar conclusiones desde un punto de vista físico es indispensable hacer más datos de campo.

5.2 CONTRASTE ENTRE EL MODELO ADE Y EL MODELO TS PARA PREDECIR EL TRANSPORTE DE SOLUTO; RÍO TEUSACÁ

En este sub-capítulo para el modelo ADE y TS se utilizará el método de Crank Nicholson. Para este modelo hay dos coeficientes (α y A_s) que no son obtenidos con los datos de campo, sino que se obtiene en el proceso de calibración del modelo.

En este capítulo no se mostrará el proceso de calibración que se realizó para el modelo ADE, por el cual se cambian los coeficientes hasta obtener la mejor modelación, sólo se mostrarán los diferentes coeficientes que generaron la mejor modelación para los tres tramos del Río Teusacá.

En la Tabla 14 se muestran todos los parámetros calibrados y datos para introducir en el programa TS para modelar el transporte de soluto en los tres tramos de análisis en el Río Teusacá.

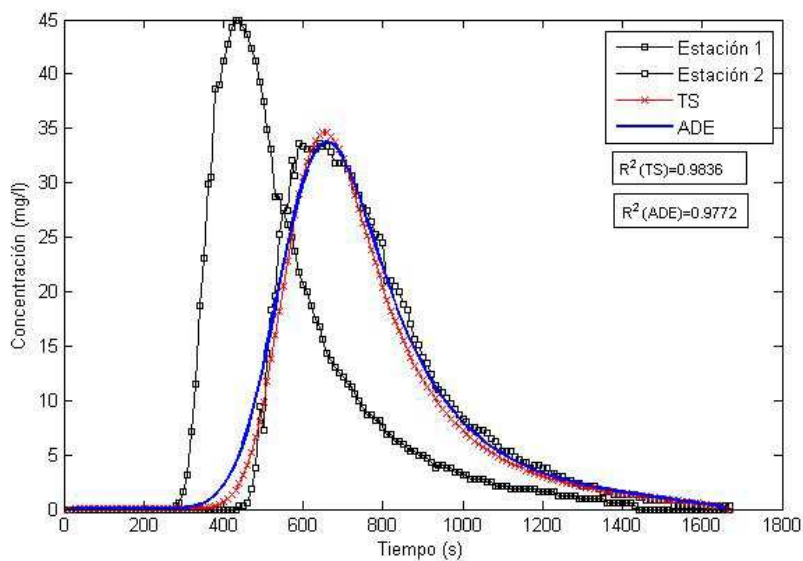
Tabla 14. Datos calibrados para realizar la modelación de transporte de soluto en los diferentes tramos del Río Teusacá. Modelo TS.

| Río Teusacá de los tres tramos de análisis | | | | | |
|--|-------|-----------------------------------|--------|-----------------------------------|--------|
| Entre las estaciones 1 y 2 | | Entre las estaciones 1 y 3 | | Entre las estaciones 2 y 3 | |
| X1 (m) | 86 | X1 (m) | 86 | X1 (m) | 130 |
| X2 (m) | 130 | X2 (m) | 199 | X2 (m) | 199 |
| Tc1 (s) | 489,5 | Tc1 (s) | 489,5 | Tc2 (s) | 688,7 |
| Tc2 (s) | 660 | Tc3 (s) | 1020 | Tc3 (s) | 1060 |
| Tiempo final de toma de datos (s) | 1660 | Tiempo final de toma de datos (s) | 3170 | Tiempo final de toma de datos (s) | 3170 |
| Intervalo de toma datos (s) | 10 | Intervalo de toma datos (s) | 10 | Intervalo de toma datos (s) | 10 |
| U (m/s) | 0,221 | U (m/s) | 0,164 | U (m/s) | 0,1401 |
| K (m ² /s) | 0,29 | K (m ² /s) | 0,28 | K (m ² /s) | 0,21 |
| U/K (1/m) | 0,120 | U/K (1/m) | 0,097 | U/K (1/m) | 0,097 |
| □ | 0,12 | □ | 0,038 | □ | 0,153 |
| A (m) | 1,87 | A (m) | 1,7 | A (m) | 1,7 |
| As (m) | 0,25 | As (m) | 0,0688 | As (m) | 0,4 |

Fuente: Elaboración propia.

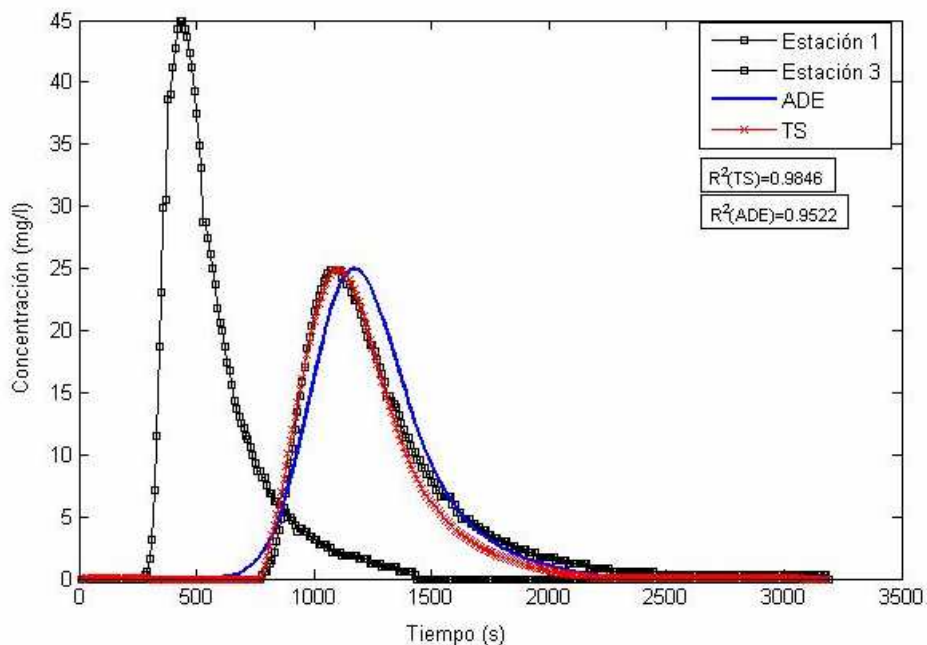
En las Figuras 37, 38 y 39 se presenta la modelación del transporte de soluto entre las tres estaciones de medida en el Río Teusacá, estas modelaciones tienen un carácter comparativo entre el modelo ADE y el modelo TS, y para el proceso de comparación se establece el coeficiente de determinación (R^2).

Figura 36. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 2, modelo TS vs ADE.



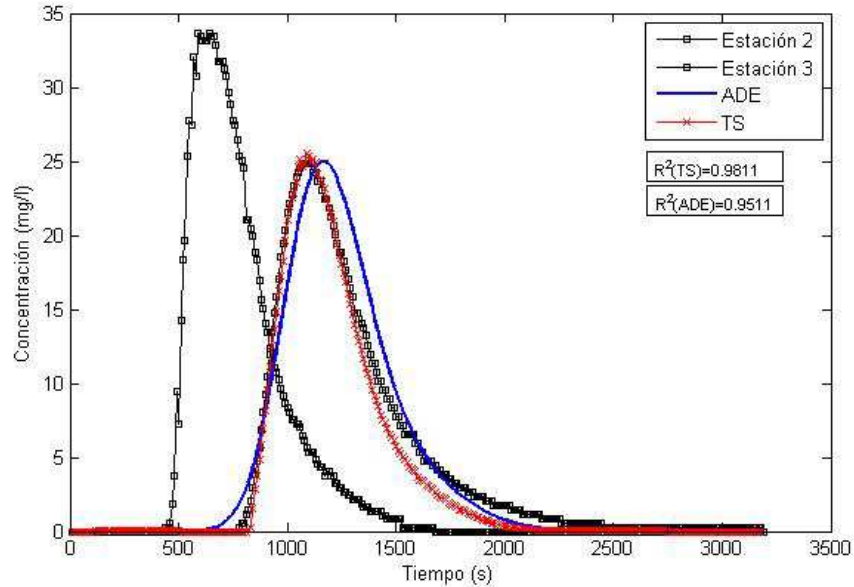
Fuente: Elaboración propia.

Figura 37. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 1 a la estación 3, modelo TS vs ADE.



Fuente: Elaboración propia.

Figura 38. Modelación en el tramo del Río Teusacá, desde la estación 2 a la estación 3, modelo TS vs ADE.



Fuente: Elaboración propia.

En la Tabla 15 se muestran los parámetros estadísticos para analizar y comparar el comportamiento del modelo TS y ADE en los diferentes tramos del Río Teusacá.

Tabla 15. Parámetros estadísticos para comparar los modelos matemáticos TS y ADE en los diferentes tramos del Río Teusacá.

| | | |
|---|---|---|
| ? | ? | ? |
| ? | ? | ? |
| ? | ? | ? |
| ? | ? | ? |

Fuente: Elaboración propia.

El modelo TS tiene, como se muestra en la Tabla 5.8, dos coeficiente extras (\square , A_s), comparado con el modelo ADE, estos parámetros no se obtienen en campo, sino que son encontrados en la acción de ajustar computacionalmente el modelo a

los datos experimentales. La obtención de los coeficientes (K , α , A_s) se logró manualmente para el ajuste del modelo TS a los datos de campo, en este proceso se puede establecer una infinidad de combinaciones, entonces el ajuste obtenido es un buen ajuste, pero se puede obtener un mejor ajuste a través de herramientas matemáticas, MatLab ofrece esta herramienta de ajuste. Es importante dejar claro que en el presente trabajo de investigación no es pertinente que a los parámetros de ajuste (K , α , A_s) del modelo TS se le dé una interpretación física, porque son necesarios muchos más ensayos de campo.

El tiempo que se utilizó para modelar los dos tramos de análisis que van de la estación 1 a la estación 3 (E1 a E3) y de la estación 2 a la estación 3 (E2 a E3) es el tiempo comprendido entre las concentraciones máximas en la curva concentración-tiempo de campo en las condiciones iniciales y las concentraciones máximas en la curva concentración-tiempo que se pretende modelar, esto generó una predicción del transporte advectivo mejor que para las predicciones realizados con el modelo ADE, si se observan las Figuras 38 y 39 se ve cómo el modelo ADE tiene un desfase en el transporte advectivo.

Se observa que el modelo TS mejora considerablemente el ajuste a los datos de campo en los tres tramos de análisis, comparado con el modelo ADE, esto se observa en las Figuras 37, 38 y 39 y se muestra cómo mejora el R^2 que para el caso del modelo TS no se establece valor menor a 0,98 (Tabla 15) para los tres tramos de análisis.

Para calibrar el modelo ADE se tuvo que modificar el coeficiente de difusión encontrado con los datos de campo K_{ensayo} , hasta que se obtuvo un coeficiente de difusión K que genera una modelación muy aproximada (todos los R^2 mayores a 0,95, Tabla 13). Para calibrar el modelo TS, además de cambiar el coeficiente de difusión K , hay que modificar dos coeficientes (α y A_s). En el proceso de calibración se presentan muchas combinaciones posibles de los coeficientes (K , α ,

As) para alcanzar una correcta modelación, esto lo que se evidencia en el proceso de calibración del modelo TS en comparación con el modelo ADE es que en el momento de la identificación paramétrica de los parámetros con las características geomorfológicas e hidráulicas puede ser más complicado.

?

6. CONCLUSIONES

- El modelo ADE predice correctamente el transporte de soluto en ríos de montaña para los tramos analizados, esto lo sustenta el parámetro estadístico R^2 , que para todas las modelaciones sobrepasaron un R^2 de 0,95. Pero para generar un modelo calibrado de un río de montaña, es necesario establecer la variación de los coeficientes de difusión turbulenta a lo largo del cauce con un diseño experimental que contenga las diferentes condiciones geomorfológicas e hidráulicas que se establecen en el río.
- La excepción en todas las modelaciones es la del tramo de la Universidad EAFIT, en el cual se obtuvo un R^2 de 0,88. Este tramo está configurado geomorfológicamente por un rápido, lo cual difiere de todos los otros tramos, que están configurados con partes de escalón-pozo. Esta evidencia no es concluyente, pero es un punto de partida para estudiar en futuras investigaciones el factor diferenciador que se establece en el transporte de soluto en diferentes condiciones geomorfológicas.
- El modelo TS mejora significativamente la precisión del modelo ADE para todos los tramos de análisis, como lo evidencia el coeficiente de determinación (R^2 , Tabla 15) el cual es mejorado para todas las modelaciones del Río Teusacá.
- Como se observa en las Figuras 37 y 38 el modelo TS se ajusta muy bien (desde el punto de vista cualitativo) a los datos de campo (curva concentración-tiempo) en la parte ascendente pero no se ajusta tan bien en la parte descendente, esto por que en el presente proyecto de investigación los parámetros de ajuste para el modelo TS (K, U, α y A_s), se obtuvieron de forma manual, hay herramientas matemáticas que optimiza la obtención de este

parámetro para ajustar la curva modelada del modelo TS a la curva obtenida en campo en la parte descendente.

- En el presente trabajo de grado se utilizaron dos métodos explícitos y un método implícito, el método numérico implícito de Crank Nicholson es el método con el rango de estabilidad más amplio, por lo que genera el menor número de pasos para realizar la modelación.

7. RECOMENDACIONES

- En el presente trabajo de grado se desarrolló la plataforma preliminar de dos modelos de transporte de soluto en ríos de montaña (el modelo ADE y el modelo TS), con lo cual se identificó que es necesario hacer un estudio mucho más amplio de la física que se presenta. Para este propósito se recomienda realizar una toma de datos más exhaustiva, de modo que se puedan generar los contrastes suficientes para calibrar el transporte de soluto en un río de montaña, ya sea en la quebrada La Volcana u otras quebradas. El modelo calibrado en un río de montaña es una experiencia que puede ser extendida a otros ríos de montaña, para generar un modelo lo suficientemente robusto para obtener el tiempo de arribo, el tiempo promedio de viaje y el tiempo de pasaje de contaminantes para ser aplicado en operación oportuna de bocatomas y estructuras hidráulicas, en sistemas de distribución de agua, modelos de alerta o alarma y planes de contingencia ante eventos de contaminación.
- Se recalco que para la calibración el modelo del transporte de un soluto conservativo un río de montaña es indispensable hacer las pruebas de campo en las diferentes condiciones geomorfológicas he hidráulicas que se establecen, pero también es importante vincular los parámetros empíricos encontrados en campo (K y U) con los para los parámetros fundamentales para describir la geomorfología (la pendiente longitudinal, forma de fondo del cauce, y el tamaño de los sedimentos) para diferentes caudales; Desde esta perspectiva, se recomienda para futuras investigaciones comparar cual de los dos modelos de transporte de soluto (ADE y TS) tiene mas identificabilidad paramétrica. En este proyecto de grado se establece la siguiente hipótesis: El modelo ADE tiene mas identificabilidad paramétrica por que tiene menos coeficientes de ajuste.

- Para futuras investigaciones se recomienda el uso de herramientas matemáticas para la obtención del conjunto óptimo de parámetros que ajustan el modelo TS, MatLab tiene en su estructura esta herramienta.
- Se recomienda para futuras modelación computacionales tanto el método explícito QUICKEST como el método de Crank Nicholson, los dos métodos tienen precisiones semejantes, pero se recomienda el uso del método numérico de Crank Nicholson si se quiere hacer las modelaciones en menor número de pasos.
- En el momento de realizar las campañas de campo se evidencia que es necesario tener más de dos estaciones de medida, esto debido a que con esta decisión se puede observar cómo varía el transporte de soluto dependiendo de la longitud y la conformación geomorfológica, y además si en la primera estación no se establece mezcla uniforme en la sección transversal, lo que generaría el rechazo de las mediciones.

BIBLIOGRAFÍA

Abboott, M.B., Y Basco, D.R. (1989). *Computational Fluid Dynamics: An Introduction for Engineers*. New York: Longman/Wiley.

Bengala, K. E., y Walters, R. A. (1983). "Simulation of solute transport in a mountain pooland-riffle stream: A transient storage model". *Water Resources Research*. Vol. 19. Núm. 3, pp. 718-724.

Cadavid Restrepo, J. H. (2009). *Mecánica del Medio Continuo: una iniciación*. Medellín, Colombia: Fondo Editorial Universidad EAFIT.

Camacho, L. A. (2006). "Calibración y comparación de modelos de transporte de solutos en ríos de montaña". XXII Congreso Latinoamericano de Hidráulica. Ciudad Guayana, Venezuela.

Chanson, H. (2004). *Environmental Hydraulics of open channel flows*. Gran Bretaña: ELSEVIER.

Chatwin, P. y Allen C. (1985). "Mathematical models of dispersion in rivers and Estuaries". *Annual Review of Fluid Mechanics*. Vol. 17, pp. 119-149.

Fischer, H. B. (1967). "The mechanics of dispersion in natural streams". *Journal of the Hydraulics Division, American Society of Civil Engineers*. Vol. 93, pp. 187-216.

Fischer, H. B. (1973). "Longitudinal Dispersion and Turbulent Mixing in Open-Channel Flow". *Annual Review of Fluid Mechanics*. Vol. 5, pp. 59-78.

González, R. A. (2008). "Determinación del comportamiento de la fracción dispersiva en ríos característicos de montaña" [trabajo de grado presentado para optar al título de Magíster en Ingeniería, Recursos Hidráulicos, Universidad Nacional de Colombia, Facultad De Ingeniería], Bogotá.

Kilpatrick, F.A., y Wilson, J.F. (1982). *Measurement of time travel in streams by dye*. Chapter A9 Techniques of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey (USGS).

Kilpatrick, F.A., y Cobb, E.D. (1985). Measurement of discharge using tracer. chapter A16 Techniques of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey (USGS).

Kilpatrick, F. A. (1993). "Simulation of soluble waste transport and buildup in surface waters using tracers. U.S. Geological Survey Techniques of Water-Resources investigations", Book 3, Chapter A20.

- Kolmogorov, A.N. (1999). The local structure of turbulence in incompressible viscous fluids at very large Reynolds numbers. "*Proceedings of the Royal Society of London*", Series A. pp. 9-13.
- López, R. (2005). "Resistencia al flujo en ríos de montaña" [tesis doctoral en Ingeniería, Universidad de Lleida], España.
- Merz, J., y Doppmann, G. (2006). *Measuring Mountain Stream Discharge Using the Salt Dilution Method*. Kathmandu, Nepal: International Centre for Integrated Mountain Development.
- Potter, M. C., Wiggert, D.C. (2002). *Mecánica de fluidos*. México: Thomson.
- Runkel, R. L. (1998). One-dimensional transport with inflow and storage (OTIS): a solute transport model for streams and rivers. U.S. *Geological Survey Water Resources Investigations*. Report, 98-4018.
- Rutherford, J. C. (1994). *River mixing*. Chichester: John Wiley & Sons.
- Streeter, V.L. (1999). *Mecánica de fluidos*. Michigan: Mc Graw Hill, Universidad de Michigan.
- Taylor, G.I. (1953) "Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube". *Proceedings of the London Mathematical Society, Series A*. pp. 186-203.
- Taylor, G.I. (1954) "The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe". *Proceedings of the London Mathematical Society, Series A*. pp. 446-463.
- Taylor, G.I. (1991) "Diffusion by continuous movements". *Proceedings of the London Mathematical Society, Series A*. pp. 196-211.
- Zhi-Qiang D. y P. Singh Vijay (2001). *Longitudinal dispersion coefficient in straight river*. Baton Rouge: Louisiana State University.

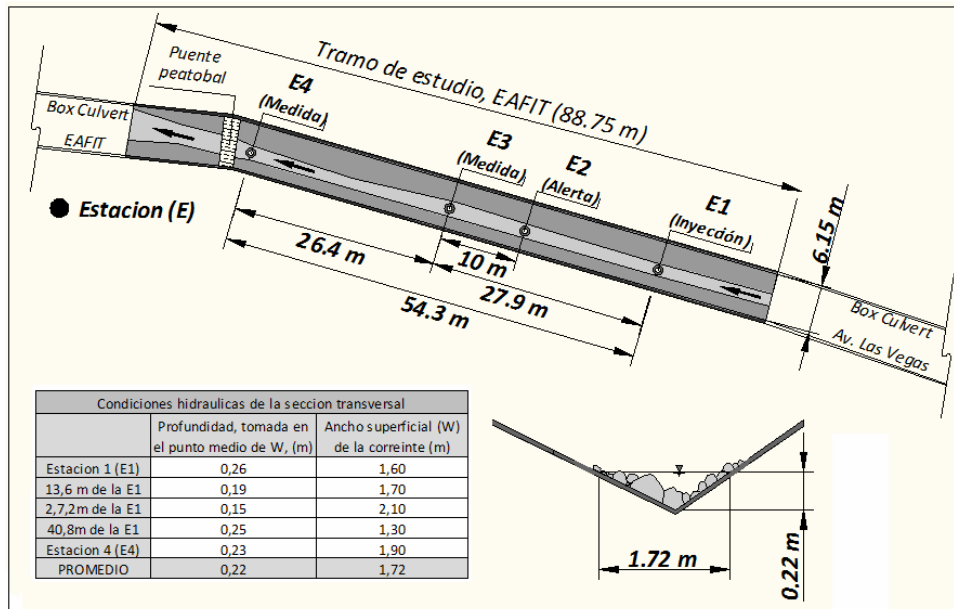
APÉNDICE A

- **Metodología de la salida de campo en los dos tramos seleccionados en la quebrada La Volcana:**

En la salida de campo se derivaron tres fases: Preparación del tramo de estudio, inyección y acción de la sustancia trazadora y registro. Éstas se describirán por medio de una documentación cualitativa y fotografías.

Preparación del tramo de estudio (EAFIT): el personal que se disponía en este día estaba comprendido por cuatro personas. En la Figura 40 se identifica el dimensionamiento del tramo y la ubicación de las estaciones de medida, las cuales se divide en cuatro puntos que se enumeran en orden descendente (desde aguas arriba a aguas abajo). La estación uno se ubica en el sitio de inyección, este sitio se muestra en la Figura 41.a., exactamente donde está el balde. Después se ubica la otra persona (Estación 2), la cual se encarga de tomar en el cauce el cambio de conductividad. Luego en la estación tres se encuentra una persona encargada de llenar los recipientes que están enumerados (Figura 41.b) para saber el orden en que transcurre la nube trazadora, y por último, en la estación 4, se ubica una persona con las mismas funciones que en la estación tres. Entonces la preparación del tramo de estudio en términos generales se resume en la ubicación del personal en las estaciones de medida y que cada persona tenga los instrumentos requeridos. Específicamente los instrumentos en cada estación son: en la estación uno (E1) la solución de sal disuelta, en la estación dos (E2) conductímetro y un cronómetro, en la estación tres (E3) recipientes (Figura 41.b) y cronómetro y por último, en la estación cuatro (E4), recipientes y cronómetro.

Figura 39. Descripción del tramo de estudio, Universidad EAFIT.



Fuente: Elaboración propia.

Figura 40. Preparación del tramo de estudio para las medidas metodología de la Inyección y desarrollo de la sustancia trazadora.



Fuente: Elaboración propia.

Como se muestra en la Figura 42, cuando la sustancia trazadora se inyecta en la estación E1 aguas abajo en la estación 2 (E2), esta otra persona que se encarga

de dar alerta cuando el cambio de conductividad ocurre en el cauce por causa de la sustancia trazadora inyectada, cuando detecta este cambio le avisa a la persona que se encuentra en la estación 3 (E3) y ésta inmediatamente empieza a sacar muestras a intervalos de 4 segundos con los recipientes mostrados en la Figura 41. La persona que alerta a la E3 inmediatamente corre aguas abajo y se ubica a 10 m de la estación 4 (E4) para dar aviso a la persona que se encuentra en esta estación. Cuando se da aviso, la persona ubicada en la estación E4 empieza a realizar la misma actividad que en la estación E3.

Figura 41. Inyección y desarrollo de la nube trazadora.



Fuente: Elaboración propia.

- **Registros:** En cada estación se registraron tanto las medidas de la conductividad de cada recipiente independiente (Figura 43.a y Figura 44.a) en el transcurrir del tiempo, como la medida de conductividad media de todos los recipientes puestas en un balde (Figura 43.b y 44.b) para tener parámetros de comparación.

Figura 42. Mediciones de conductividad en la estación 3 (E3): a) medición individual de muestra, b) medición de la muestra promedio.



Fuente: Elaboración propia.

Figura 43. Mediciones de conductividad en la estación 4 (E4): a) medición individual de muestra, b) medición de la muestra promedio.



Fuente: Elaboración propia.

- **Metodología, tramo de estudio dos, aguas arriba transversal inferior:** La metodología de medición se realizó de la misma forma como se estableció para el tramo de estudio uno (Universidad EAFIT). En la Tabla 16 se describen las condiciones geométricas generales del tramo de estudio, pendiente y ancho

superficial promedio a lo largo del cauce y también se describen las longitudes de los tramos de medición; como se muestra de una manera general en la Fuente: Elaboración propia.

- Figura 44y se describe en las fotografías que se muestran en la Figura 45 y 47 de los párrafos siguientes.

Tabla 16. Ubicación de las estaciones de medida, pendiente y ancho superficial del tramo de estudio dos.

| Recorrido longitudinal (m) | Altura lamina de agua (m) | Pendiente de cada tramo (m/m) | Pendiente promedio (%) | Ancho superficial (m) | Ancho superficial Promedio (m) |
|----------------------------------|---------------------------|-------------------------------|------------------------|-----------------------|--------------------------------|
| Estacion 1 (E1), Refecia inicial | 0.000 | 0.000 | 3.785 | 0.900 | 0.980 |
| Punto a 4,8 m de la E1 | -0.060 | -0.013 | | 1.100 | |
| Punto a 9,6 m de la E1 | -0.730 | -0.140 | | 0.700 | |
| Punto a 14,4 m de la E1 | -0.680 | 0.010 | | 0.800 | |
| Punto a 19,2 de la E1 | -0.770 | -0.019 | | 1.300 | |
| Punto E2 a 26,4 m de la E1 | -1.060 | -0.040 | | 1.200 | |
| Punto E3 a 32,4 m de la E1 | -1.350 | -0.048 | | 0.700 | |
| Punto a 38,4 m de la E1 | -1.730 | -0.063 | | 1.000 | |
| Punto a 43,2 m de la E1 | -1.730 | 0.000 | | 1.100 | |
| Punto E4 a 49,2m de la E1 | -1.900 | -0.028 | | 1.000 | |

Fuente: Elaboración propia.

Figura 44. Ubicación tramo de estudio dos.



Fuente: google.earth.com.

Figura 45. Ubicación del personal en la estación 2, 3 y 4 a lo largo del río.



Fuente: Elaboración propia.

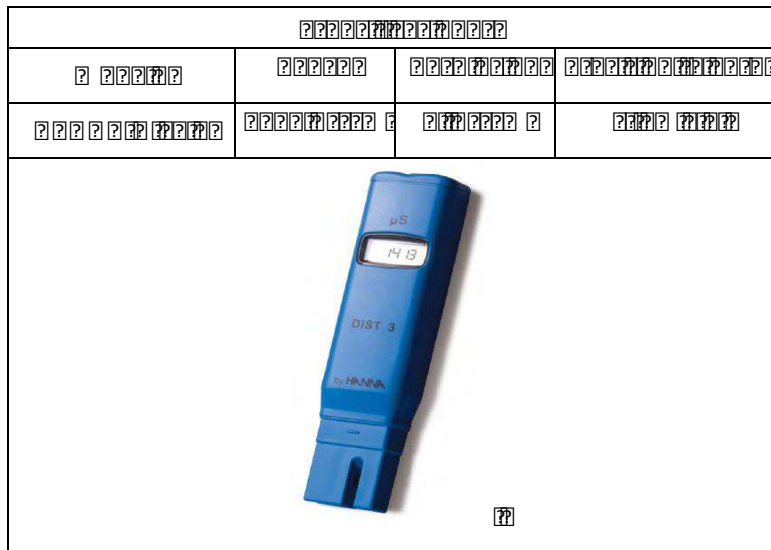
Figura 46. a) Medición de la conductividad en la estación (E3) y b) Medición de la conductividad en la estación 4 (E4).



Fuente: Elaboración propia.

Nota: en cada prueba se diluyeron 600 g de sal común marca Refisal en 4 litros de agua.

Tabla 17. Características del conductímetro.



?

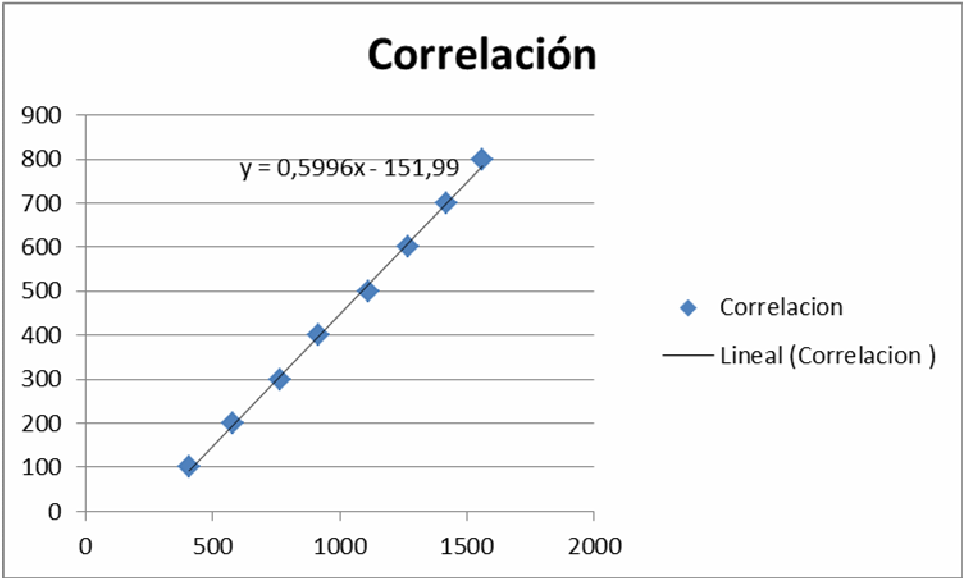
Fuente: Elaboración propia.

Tabla 18. Coeficiente de correlación.

| Variable dependiente | Variable independiente | Coeficiente de correlación | Significación |
|----------------------|------------------------|----------------------------|---------------|
| Conductividad | Temperatura | 0.98 | 0.0001 |
| Conductividad | pH | 0.02 | 0.98 |
| Conductividad | Disolución | 0.95 | 0.001 |
| Conductividad | Alcalinidad | 0.92 | 0.005 |
| Conductividad | Cloruros | 0.88 | 0.01 |
| Conductividad | Sulfatos | 0.85 | 0.02 |
| Conductividad | Nitratos | 0.82 | 0.03 |
| Conductividad | Nitritos | 0.78 | 0.05 |

Fuente: Elaboración propia. Adaptada del Manual hecho por Merz y Doppmann (2006, p. 15).

Figura 47. Gráfica del coeficiente de correlación. El coeficiente de correlación se redondea a 0,6.



Fuente: Elaboración propia.

APÉNDICE B

Código esquema explícito Upwind para el modelo ADE:

%1) Datos de entrada

```
K=.26;% Coeficiente de dispersión
u=0.14052907; %velocidad sección transversal
Re=u/K;% Relación entre advección y difusión
TF4=1660;% Tiempo en que finalizó la toma de datos
Td=10;% Intervalo de tiempo en que se tomaron los datos
Lc3=86;% Longitud estación inicial
Lc4=130;% Longitud de la estación de modelación
LcG=(Lc4-Lc3);% Distancia entre estaciones
Tc3=489.4827586;% Tiempo a el centroide estación inicial
Tc4=688.6971831% Tiempo a el centroide estación de modelación
TcG=(Tc4-Tc3);% Tiempo entre los centroides
Cr=1 %Courant ideal; porque es el que menos pasos me da.
```

% 2) Cálculo del Ne y Cr permitidos por los esquemas numéricos.

```
Ne=Cr/Re;% Newman con referencia a la relación u/k
while (Ne>0.4);
    Cr=Cr-0.01;
    Ne=Cr/Re;
end;
```

%3) Cálculos previos y definición de contadores

```
Dx=(K*Cr)/(u*Ne);
Dt=(K*Cr^2)/(Ne*u^2);
Pe=Cr/Ne;
j=round(((TF4)/Td))+1;% Número de intervalos en t
n=(round((1/(Td*Cr))*TcG))+1;% Número de pasos para alcanzar la estación de
modelación
```

%Matriz inicial de ceros

```
C=zeros(j,n);
```

%4) Condiciones iniciales

```
TC2s1s2=xlsread('TC2s1s2','B1:B167')
C(:,1)=TC2s1s2;
```

%5) Molécula computacional

```
for b=2:n-1
    for c=2:j-3
        C(c,b)=(Cr+Ne)*C(c-1,b-1)+(1-Cr-(2*Ne))*C(c,b-1)+Ne*C(c+1,b-1);
    end
end
```

%6) Gráfica de la estación modelada

```
plot(C(:,(n-1)), 'b'), hold on;
```

Código esquema explícito QUICKEST para el modelo ADE:

%1) Datos de entrada

```
K=.26;% Coeficiente de dispersión
u=0.14052907; % Velocidad sección transversal
Re=u/K;% Relación entre advección y difusión
TF4=3170;% Tiempo en que finalizó la toma de datos
Td=10;% Intervalo de tiempo en que se tomaron los datos
Lc3=130;% Longitud estación iniciales
Lc4=199;% Longitud de la estación de modelación
LcG=(Lc4-Lc3);% Distancia entre estaciones
Tc3=688.6971831% Tiempo a el centroide estación inicial
Tc4=1179.698795% Tiempo a el centroide estación modelada
TcG=(Tc4-Tc3);% Tiempo entre los centroides
CrQ=1.5% Courant ideal; porque es el que menos pasos me da.
```

%2) Cálculo del Ne y Cr permitidos por los esquemas numéricos

```
NeQ=CrQ/Re;% Newman con referencia a la relación u/k
while (NeQ>1);
    CrQ=CrQ-0.01;
    NeQ=CrQ/Re;
end;
```

%3) Cálculos previos y definición de contadores

```
Dx=(K*CrQ)/(u*NeQ);
Dt=(K*CrQ^2)/(NeQ*u^2);
Pe=CrQ/NeQ;
j=round(((TF4)/Td))+1;% Número de intervalos en t
n=(round((1/(Td*CrQ))*TcG))+1;% Número de pasos para alcanzar la estación modelación.
```

%Matriz inicial de ceros

```
CQ=zeros(j,n);
```

%4) Condiciones iniciales

```
TC2s2s3=xlsread('TC2s2s3','B1:B318')
CQ(:,1)=TC2s2s3;
```

%5) molécula computational

```
for b=1:n-1
    for c=3:j-2
        CQ(c,b+1)=CQ(c,b)+(NeQ*(1-CrQ)-(CrQ/6)*(CrQ^2-3*CrQ+2))*CQ(c+1,b)-(NeQ*(2-3*CrQ)-(CrQ/2)*(CrQ^2-2*CrQ-1))*CQ(c,b)+(NeQ*(1-3*CrQ)-(CrQ/2)*(CrQ^2-CrQ-2))*CQ(c-1,b)+(NeQ*CrQ+(CrQ/6)*(CrQ^2-1))*CQ(c-2,b);
    end
end
```

%6) Gráfica, ecuación modelada

```
plot(CQ(:,(n-1)),'b'),hold on;
```

Código esquema implícito Crank Nicholson para el modelo ADE:

%1) Datos de entrada

```
K=.26;% Coeficiente de dispersión
u=0.14052907; % Velocidad sección transversal
Re=u/K;% Relación entre advección y difusión
TF4=3170;% Tiempo en que finalizó la toma de datos
```

```

Td=10;% Intervalo de tiempo en que se tomaron los datos
Lc3=130;% Longitud estación inicial
Lc4=199;% Longitud de la estación de modelación
LcG=(Lc4-Lc3);% Distancia entre estaciones
Tc3=688.6971831% Tiempo a el centroide estación inicial
Tc4=1179.698795% Tiempo a el centroide estación de modelación
TcG=(Tc4-Tc3);% Tiempo entre los centroides
Cr=10%Courant ideal; porque es el que menos pasos me da.
%2) Calculo del Ne y Cr permitidos por los esquemas numéricos
Ne=Cr/Re;% Newman con referencia a la relación u/k
while (Ne>2);
    Cr=Cr-0.01;
    Ne=Cr/Re;
end;

%2) Cálculos previos y definición de contadores

Dx=(K*Cr)/(u*Ne);
Dt=(K*Cr^2)/(Ne*u^2);
Pe=Cr/Ne;
j=round(((TF4)/Td))+1;% Número de intervalos en t
n=(round((1/(Td*Cr))*TcG))+1;% Número de pasos, alcanzar la estación de modelación

% Matriz inicial de ceros
Cg=zeros(j,n);

% 3) Condiciones iniciales

TC2s2s3=xlsread('TC2s2s3','B1:B318')
Cg(:,1)=TC2s2s3;

%4) Creando la matriz del método implícito (A)

EI=diag(ones(1,j-1),-1);
e=-(Cr/2+Ne);
E=e.*EI;
FI=eye(j,j);
f=2*(1+Ne);
F=f.*FI;

```

```

GI=diag(ones(1,j-1),1);
g=Cr/2-Ne;
G=g.*GI;
A=E+F+G;
Ainv=inv(A);

```

% 5) Modelación de la Concentración en el tiempo

```

ECG=-(Cr/2-Ne)
FCG=2*(1-Ne)
GCG=Cr/2+Ne
V=zeros(j,1);
for b=2:n-1
    for c=2:j-1
        V(c,1)=Cg(c-1,b-1)*GCG+Cg(c,b-1)*FCG+Cg(c+1,b-1)*ECG;
    end
    CC=Ainv*V;
    Cg(:,b)=CC;
end

```

%6 Gráfica de la estación modelada

```

plot(Cg(:,(n-1)), 'r'), hold on,

```

Código esquema explícito QUICKEST para el modelo TS:

% Rutina para la solución de la ecuación transporte (QUICKEST, modelo TS)

%1) Datos de entrada

```

K=.26;% Coeficiente de dispersión
u=0.14052907; %velocidad sección transversal
Re=u/K;% Relación entre advección y difusión
TF4=3170;% Tiempo en que finalizó la toma de datos
Td=10;% Intervalo de tiempo en que se tomaron los datos
Lc3=130;% Longitud estación 3
Lc4=199;% Longitud de la estación 4
LcG=(Lc4-Lc3);% Distancia entre estaciones
Tc3=688.6971831% Tiempo a el centroide estación inicial

```

```

Tc4=1179.698795% Tiempo a el centroide estación modelada
TcG=(Tc4-Tc3);% Tiempo entre los centroides
CrQ=1.5% Courant ideal; porque es el que menos pasos me da.
%2) Cálculo del Ne y Cr permitidos por los esquemas numéricos
NeQ=CrQ/Re;% Newman con referencia a la relación u/k
while (NeQ>1);
    CrQ=CrQ-0.01;
    NeQ=CrQ/Re;
end;

```

%3) Cálculos previos y definición de contadores

```

Dx=(K*CrQ)/(u*NeQ);
Dt=(K*CrQ^2)/(NeQ*u^2);
Pe=CrQ/NeQ;
j=round(((TF4)/Td))+1;% Número de intervalos en t
n=(round((1/(Td*CrQ))*TcG))+1;% Número de pasos para alcanzar la estación
modelación.

```

% 4) Cálculo de los parámetros de TS

```

Alfa=.1532 % Coeficiente; razón de cambio, zonas del modelo
A=1.7; % Área representativa sección transversal
As=.4; % Área virtual zona de almacenamiento
Gamma=(Alfa*Dt*A)/As; % Coeficiente desacoplado modelo TS
RE=Alfa/Gamma;

```

```

C=zeros(2*j,n);

```

%5) Condiciones Iniciales

```

Inferior=xlswread('TC2s2s3','B1:B636')
C(:,1)=Inferior;
%6) Desarrollo de la molécula
for b=2:n-1
    for c=3:j-2
        C(c+j-1,b)=(1-Gamma)*C(c+j-1,b-1)+Gamma*C(c-1,b-1);
    end
end

```



```

    C(c,b)=C(c,b-1)*(1-Alfa)+(Ne*(1-Cr)-(Cr/6)*(Cr^2-3*Cr+2))*C(c+1,b-1)-(Ne*(2-
3*Cr)-(Cr/2)*(Cr^2-2*Cr-1))*C(c,b-1)+(Ne*(1-3*Cr)-(Cr/2)*(Cr^2-Cr-2))*C(c-1,b-
1)+(Ne*Cr+(Cr/6)*(Cr^2-1))*C(c-2,b-1)+Alfa*C(j+c-1,b-1);
    if C(c,n-2)<0;
        C(c,n-2)=0;
    end
end
end
end
% 7) Gráfica de la estación modelada
plot(C(1:j,(n-2)), 'g'),hold on,

```