

XIV CONGRESO CHILENO DE HIDRÁULICA

Los modelos de los procesos físicos, químicos y biológicos que ocurren en los cuerpos de agua y más importante aún, son la base en el análisis de sistemas de gestión para el mejoramiento de la calidad del agua (Ojeda, 1992). El enfoque clásico para la gestión es derivar y validar un modelo de calidad del agua para el cuerpo de agua de interés tal como lo hizo el modelo de Thomas and Mielke (1987; Chapra, 1996). Una vez calibrado y validado, el modelo es usado para producir la concentración de posibles contaminantes bajo diferentes alternativas de criterios de tratamiento.

SIMULACIONES MONTE CARLO Y ECUACIONES ESTOCÁSTICAS EN LA MODELACIÓN DE LA CALIDAD DE AGUA

ANDRÉS LÓPEZ AVARIA¹

RESUMEN

La comparación de las mediciones de calidad en cuerpos de agua y de las concentraciones predichas con los modelos determinísticos de calidad de agua demuestran la incertidumbre inherente en este tipo de modelación. Esta incertidumbre en los modelos de calidad del agua ha sido enfrentada analizando la sensibilidad de los parámetros de los modelos determinísticos con simulaciones Monte Carlo y definiendo modelos basados en ecuaciones diferenciales estocásticas (EDEs).

El modelo de Streeter-Phelps para una descarga puntual es usado para demostrar el uso de estas representaciones matemáticas. Las simulaciones Monte Carlo entregan estimaciones de la media diferentes a las soluciones del modelo determinístico evaluadas con los valores medios de los parámetros. En cambio, las EDEs entregan resultados para la media iguales a los modelos determinísticos y para la varianza entregan resultados que convergen a cero cuando aumenta el tiempo de viaje.

MODELOS ESTOCÁSTICOS

Las simulaciones Monte Carlo son un método de simulación estocástica que permite evaluar el comportamiento de un sistema de manera aleatoria. Este método es útil para evaluar el comportamiento de un sistema de manera aleatoria. Este método es útil para evaluar el comportamiento de un sistema de manera aleatoria.

¹Ingeniero Civil, Ph.D., Centro EULA-Chile y Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Concepción

Chapra, S.C. (1997). "Introduction to Open Channel Flow". McGraw-Hill, New York, NY. 504 pp.
Ojeda, J. (1992). "Calidad del agua en los ríos de Chile". Ediciones del CIECH, Santiago, Chile. 150 pp.
Thomas, W.G. and Mielke, P.A. (1987). "Water Quality Modeling". McGraw-Hill, New York, NY. 400 pp.
Streeter, H.W. and Phelps, E.W. (1925). "A Simple Method of Computing the Oxygen Deficit in Rivers". Journal of Hydraulics, Vol. 1, No. 1, pp. 1-16.
Phelps, E.W. (1955). "Sedimentation Engineering". McGraw-Hill, New York, NY. 400 pp.
López Avaria, A. (1998). "Modelación de la calidad del agua en ríos de Chile". Tesis de Doctorado, Universidad de Concepción, Chile. 150 pp.
López Avaria, A. (1999). "Modelación de la calidad del agua en ríos de Chile". Tesis de Maestría, Universidad de Concepción, Chile. 100 pp.
López Avaria, A. (2000). "Modelación de la calidad del agua en ríos de Chile". Tesis de Licenciatura, Universidad de Concepción, Chile. 50 pp.

1. INTRODUCCIÓN

Los modelos de calidad del agua son herramientas útiles para entender las relaciones causa-efecto en los procesos físicos, químicos y biológicos que ocurren en los cuerpos de agua y, más importante aún, son la base en el análisis de alternativas de gestión para el mejoramiento de la calidad del agua (Orlob, 1992). El enfoque clásico para la gestión es derivar y calibrar un modelo de calidad del agua para el cuerpo de agua de interés tales como río, lago o estuario (Thomann and Mueller, 1987; Chapra, 1996). Una vez calibrado y validado, el modelo es usado para predecir la concentración de posibles contaminantes bajo distintas alternativas de planes o criterios de tratamiento.

El enfoque determinístico no considera explícitamente las incertidumbres del modelo, de sus parámetros o inputs. Estos modelos determinísticos no pueden determinar la probabilidad de violar estándares de calidad del agua (u otros criterios) que depende de variaciones y errores en los modelos y en los datos. Sin embargo, los modelos determinísticos son ampliamente usados debido a su simplicidad en un complejo proceso decisional y debido a la existencia de métodos analíticos y numéricos para resolver las ecuaciones y métodos de calibración.

Por otra parte, los modelos estocásticos de calidad están basados en el supuesto que el comportamiento de los sistemas naturales es una combinación de procesos determinísticos y de perturbaciones aleatorias. De esta manera, la respuesta del sistema puede ser descrita con distribuciones de probabilidad, después de cuantificar al menos una de las incertidumbres del sistema. El primer enfoque utilizado en esta área fué llevar a cabo análisis de sensibilidad del modelo determinístico, i.e. la distribución de probabilidades de los outputs fueron obtenidas definiendo distribuciones de probabilidad apropiadas para los parámetros, concentraciones iniciales e inputs. El análisis de primer orden (first-order analysis) y las simulaciones Monte Carlo siguen este enfoque. Otro enfoque está basado en la idea de modelar cursos aleatorios (random paths). Cursos aleatorios representan procesos estocásticos debido a cambios en los procesos físicos, químicos y biológicos en el tiempo. Bajo el supuesto de procesos estocásticos (que definen ecuaciones diferenciales estocásticas), Finney et al. (1982) re-definieron el modelo de Streeter-Phelps como un set de ecuaciones diferenciales estocásticas con los parámetros del modelo siguiendo procesos estocásticos para obtener la distribución de probabilidades de la concentración de oxígeno disuelto.

El objetivo de este artículo es analizar distintas representaciones de incertidumbre en modelos de calidad del agua. Para esto, se han utilizado simulaciones Monte Carlo y ecuaciones diferenciales estocásticas usando como ejemplo el modelo Streeter-Phelps para oxígeno disuelto y con datos simulados de una descarga puntual.

2. MODELOS ESTOCÁSTICOS

Las incertidumbres pueden ser completamente descritas como distribuciones de probabilidad (Mays, 1996; Benjamin y Cornell, 1970). Por ejemplo, para un modelo de decaimiento de primer orden de la demanda bioquímica de oxígeno (DBO) de una descarga puntual, la distribución de probabilidades de la DBO es una función de la distribución de probabilidades de la descarga, de las condiciones aguas arriba y de los parámetros (Figura 1).

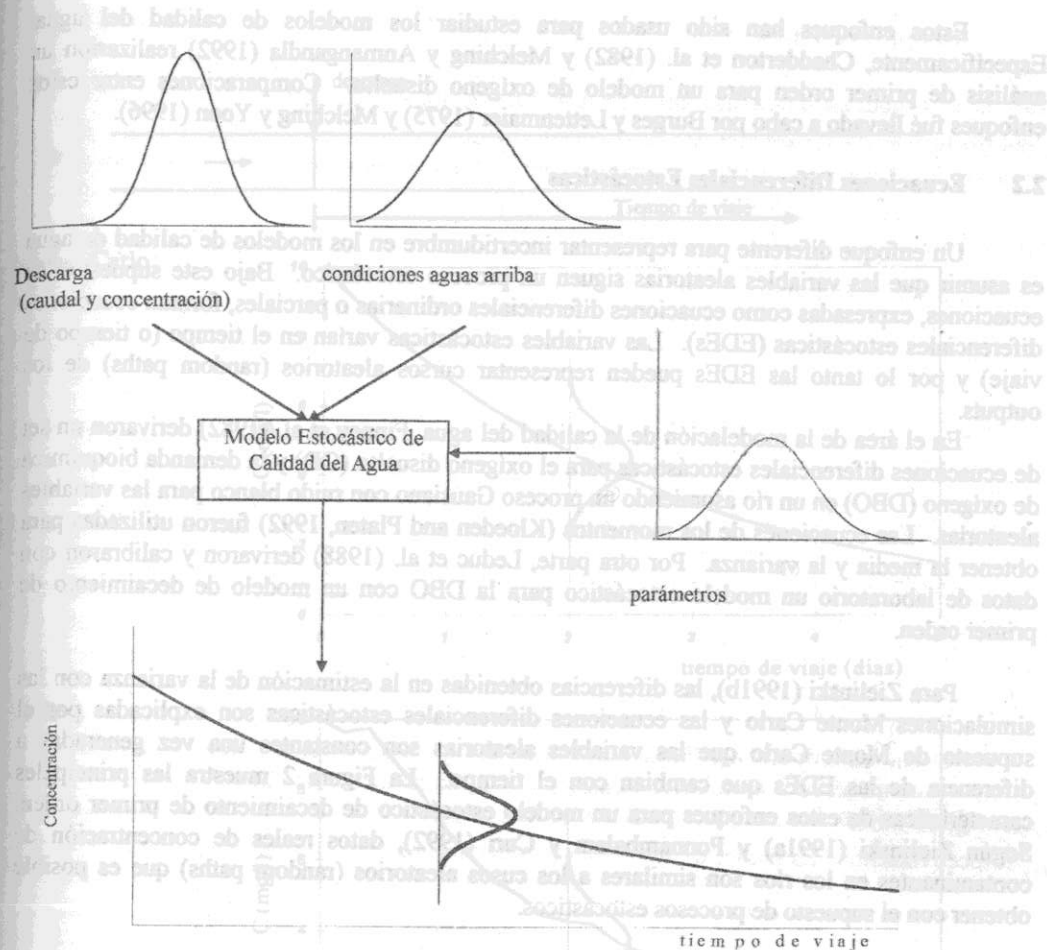


Figura 1 Distribución de probabilidad de los outputs con incertidumbre en la descarga, condiciones aguas arriba y parámetros.

Dependiendo de los supuestos, este análisis puede hacerse con simulaciones Monte Carlo o con ecuaciones diferenciales estocásticas.

2.1 Simulaciones Monte Carlo

El análisis de incertidumbre en modelos determinísticos de calidad de agua asume que los parámetros son inciertos pero constantes. Los métodos comúnmente utilizados son el análisis de primer orden (first-order analysis) y simulaciones Monte Carlo (Mays, 1996). De éstos, las simulaciones Monte Carlo son principalmente utilizadas debido a su flexibilidad, dado que cualquier distribución de probabilidades puede servir para generar los variables aleatorias.

Estos enfoques han sido usados para estudiar los modelos de calidad del agua. Específicamente, Chadderton et al. (1982) y Melching y Anmangandla (1992) realizaron un análisis de primer orden para un modelo de oxígeno disuelto. Comparaciones entre estos enfoques fué llevado a cabo por Burges y Lettenmaier (1975) y Melching y Yoon (1996).

2.2 Ecuaciones Diferenciales Estocásticas

Un enfoque diferente para representar incertidumbre en los modelos de calidad de agua es asumir que las variables aleatorias siguen un proceso estocástico. Bajo este supuesto, las ecuaciones, expresadas como ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales, forman ecuaciones diferenciales estocásticas (EDEs). Las variables estocásticas varían en el tiempo (o tiempo de viaje) y por lo tanto las EDEs pueden representar cursos aleatorios (random paths) de los outputs.

En el área de la modelación de la calidad del agua, Finney et al. (1982) derivaron un set de ecuaciones diferenciales estocásticas para el oxígeno disuelto (OD) y la demanda bioquímica de oxígeno (DBO) en un río asumiendo un proceso Gausiano con ruido blanco para las variables aleatorias. Las ecuaciones de los momentos (Kloeden and Platen, 1992) fueron utilizadas para obtener la media y la varianza. Por otra parte, Leduc et al. (1988) derivaron y calibraron con datos de laboratorio un modelo estocástico para la DBO con un modelo de decaimiento de primer orden.

Para Zielinski (1991b), las diferencias obtenidas en la estimación de la varianza con las simulaciones Monte Carlo y las ecuaciones diferenciales estocásticas son explicadas por el supuesto de Monte Carlo que las variables aleatorias son constantes una vez generadas a diferencia de las EDEs que cambian con el tiempo. La Figura 2 muestra las principales características de estos enfoques para un modelo estocástico de decaimiento de primer orden. Según Zielinski (1991a) y Ponnambalam y Curi (1992), datos reales de concentración de contaminantes en los ríos son similares a los cursos aleatorios (random paths) que es posible obtener con el supuesto de procesos estocásticos.

3. MODELO STREETER-PHELPS

La concentración de oxígeno disuelto (OD) es una medida del estado de los ecosistemas acuáticos (Thomann and Mueller, 1987). Criterios de calidad del agua han sido definidos para OD por la Agencia de Protección Ambiental de los EE.UU. basada en los requerimientos de diferentes especies de peces y estados de vida. Un trabajo seminal presentado por Streeter y Phelps (1925) presenta un modelo para el OD como un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias. Este modelo incluye los procesos de reaeración y el consumo de oxígeno por parte de la DBO (ver por ejemplo Thomann and Mueller (1987), Schnoor (1996), y Chapra (1997)).

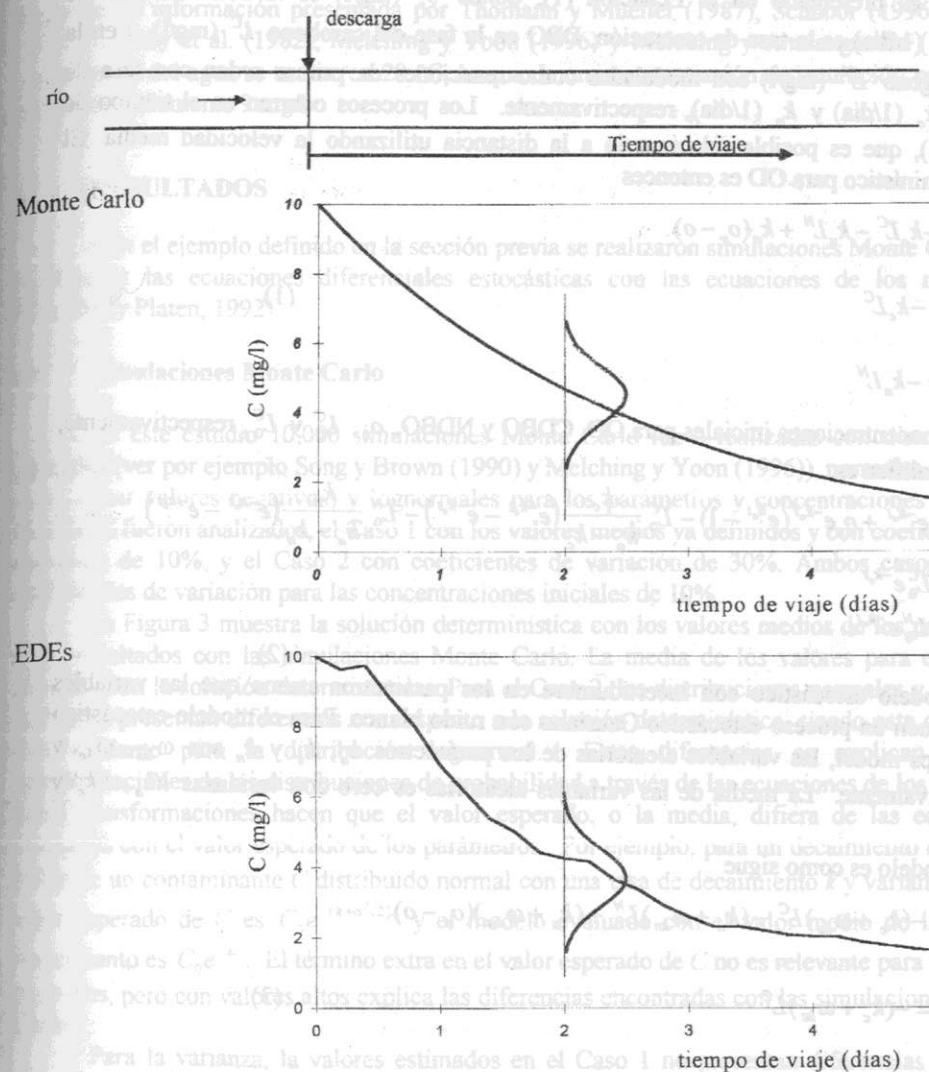


Figura 2 Monte Carlo y ecuaciones diferenciales estocásticas para obtener la distribución de probabilidad del contaminante C.

El consumo de oxígeno puede ser modelado ya sea como una reacción de primer orden para el DBO (expresado separadamente como la demanda de oxígeno en la etapa del carbono y del nitrógeno) o con la inclusión del ciclo del nitrógeno. El posible desfase al no modelar el proceso del nitrógeno no es importante si existe abundancia de bacterias nitrificadoras, un pH alcalino y con concentraciones de OD sobre 1-2 mg/l (Thomann and Mueller, 1987).

El modelo de OD, o (mg/l), seleccionado para ilustrar las representaciones de incertidumbre es presentado en la Ecuación (1), donde o_s (mg/l) es la concentración de saturación, k_a (1/día) es la tasa de reaeración, DBO en la fase del carbono L^C (mg/l), y en la fase del nitrógeno L^N (mg/l) son modeladas como reacciones de primer orden con tasa de decaimiento k_c (1/día) y k_n (1/día), respectivamente. Los procesos ocurren en el tiempo de viaje, t (días), que es posible relacionarlo a la distancia utilizando la velocidad media. El modelo determinístico para OD es entonces

$$\begin{aligned} \frac{do}{dt} &= -k_c L^C - k_n L^N + k_a(o_s - o) \\ \frac{dL^C}{dt} &= -k_c L^C \\ \frac{dL^N}{dt} &= -k_n L^N \end{aligned} \quad (1)$$

Con concentraciones iniciales para OD, CDBO y NDBO, o_0 , L_0^C y L_0^N , respectivamente, la solución analítica es

$$\begin{aligned} o &= o_0 e^{-k_c t} + o_s e^{-k_c t} (e^{k_c t} - 1) - L_0^C \frac{k_c}{k_a - k_c} (e^{-k_c t} - e^{-k_a t}) - L_0^N \frac{k_n}{k_a - k_n} (e^{-k_n t} - e^{-k_a t}) \\ L^C &= L_0^C e^{-k_c t} \\ L^N &= L_0^N e^{-k_n t} \end{aligned} \quad (2)$$

El modelo estocástico con incertidumbre en los parámetros asume que las variables aleatorias siguen un proceso estocástico Gaussiano con ruido blanco. Para el modelo estocástico Streeter-Phelps model, las variables aleatorias de los parámetros k_a , k_c y k_n son ω_{ka} , ω_{kc} y ω_{kn} , respectivamente. La media de las variables aleatorias es cero con varianzas Vk_a , Vk_c y Vk_n .

Es modelo es como sigue

$$\begin{aligned} \frac{do}{dt} &= -(k_c + \omega_{kc})L^C - (k_n + \omega_{kn})L^N + (k_a + \omega_{ka})(o_s - o) \\ \frac{dL^C}{dt} &= -(k_c + \omega_{kc})L^C \\ \frac{dL^N}{dt} &= -(k_n + \omega_{kn})L^N \end{aligned} \quad (3)$$

Un ejemplo de una descarga puntual ha sido usado para la representación estocástica. El río está bajo un escenario de bajo caudal con un 7Q10 (promedio del caudal por siete días con un período de retorno de 10 años) de $10 \text{ m}^3/\text{s}$. Las concentraciones medias aguas arriba de la descarga son 10 mg/l de CDBO, 10 mg/l de NDBO y 7.5 mg/l de OD. El río recibe una descarga de $1 \text{ m}^3/\text{s}$ de una planta de tratamiento de aguas domésticas. La combinación de la concentración aguas arriba y de los caudales dan concentraciones medias de (concentraciones iniciales) 11.8 mg/l de CDBO, 14.5 mg/l de NDBO y 7 mg/l de OD. Los valores medios de los parámetros de

reaeración y decaimiento de la CDBO y NDBO son $k_a=1.5$ 1/día, $k_c=0.5$ 1/día y $k_n=0.25$ 1/día (basados en información presentada por Thomann y Mueller (1987), Schnoor (1996), Chapra (1997), Finney et al. (1982), Melching y Yoon (1996) y Melching y Anmangandla (1992). La temperatura del agua se asume en $20 \text{ }^\circ\text{C}$, lo que da una concentración de saturación para el OD de aproximadamente 9 mg/l .

4. RESULTADOS

Con el ejemplo definido en la sección previa se realizaron simulaciones Monte Carlo y se resolvieron las ecuaciones diferenciales estocásticas con las ecuaciones de los momentos (Kloeden y Platen, 1992).

4.1 Simulaciones Monte Carlo

En este estudio 10,000 simulaciones Monte Carlo fueron realizadas con distribuciones normales (ver por ejemplo Song y Brown (1990) y Melching y Yoon (1996)), normales truncadas (para evitar valores negativos) y lognormales para los parámetros y concentraciones iniciales. Dos casos fueron analizados, el Caso 1 con los valores medios ya definidos y con coeficientes de variación de 10%, y el Caso 2 con coeficientes de variación de 30%. Ambos casos asumen coeficientes de variación para las concentraciones iniciales de 10%.

La Figura 3 muestra la solución determinística con los valores medios de los parámetros y los resultados con las simulaciones Monte Carlo. La media de los valores para el Caso 1 coincide con la solución determinística. Para el Caso 2, las distribuciones normales y normales truncadas presentan diferencias con respecto a la solución determinística, siendo esta diferencia más evidente para la distribución lognormal. Estas diferencias se explican por las transformaciones de las distribuciones de probabilidad a través de las ecuaciones de los modelos. Estas transformaciones hacen que el valor esperado, o la media, difiera de las ecuaciones evaluadas con el valor esperado de los parámetros. Por ejemplo, para un decaimiento de primer orden de un contaminante C distribuido normal con una tasa de decaimiento k y varianza σ^2 , el valor esperado de C es $C_0 e^{-(k+\sigma^2/2)t}$ y el modelo evaluado con el valor medio de la tasa de decaimiento es $C_0 e^{-kt}$. El término extra en el valor esperado de C no es relevante para varianzas pequeñas, pero con valores altos explica las diferencias encontradas con las simulaciones Monte Carlo.

Para la varianza, los valores estimados en el Caso 1 no presentan diferencias entre las diferentes distribuciones de probabilidad. Para el Caso 2, la distribución lognormal entrega valores más bajos de la varianza que las distribuciones normal y normal truncada (ver Figura 4).

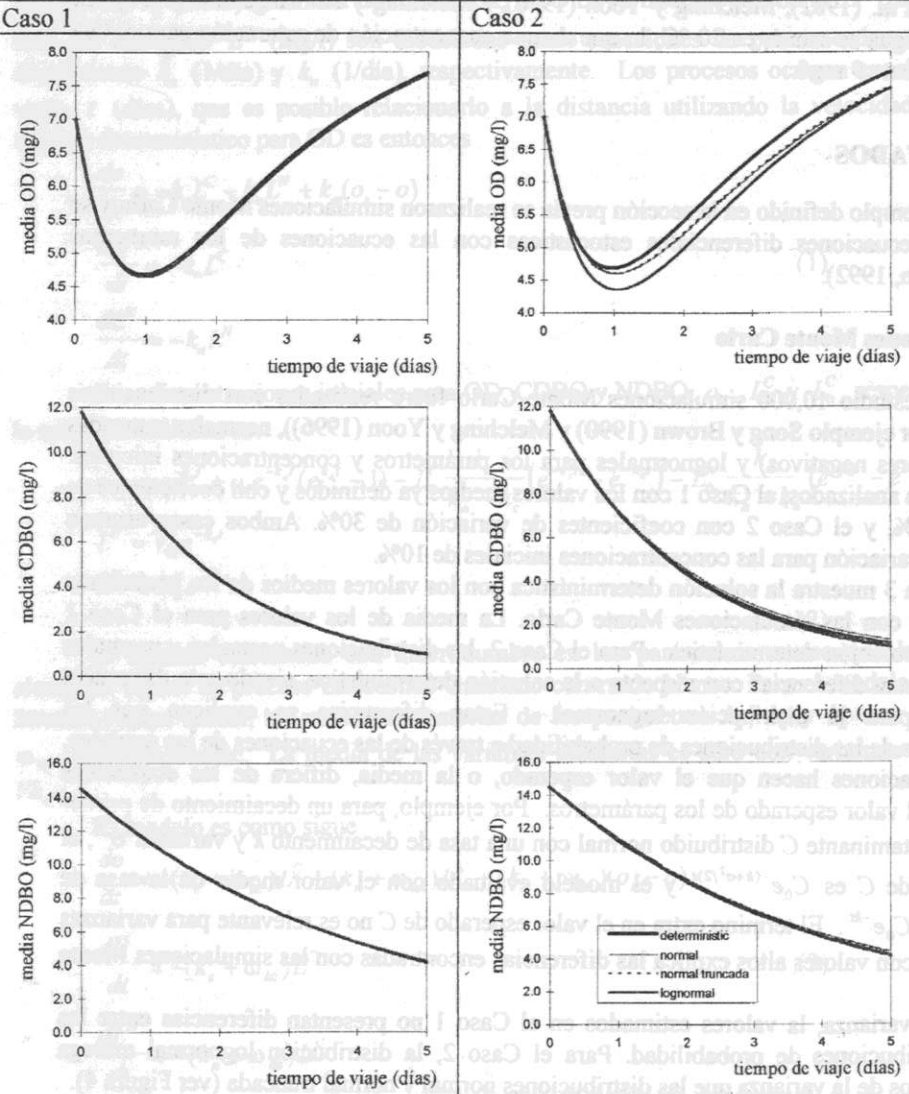


Figura 3 Solución determinística y estimaciones de la media con simulaciones Monte Carlo.

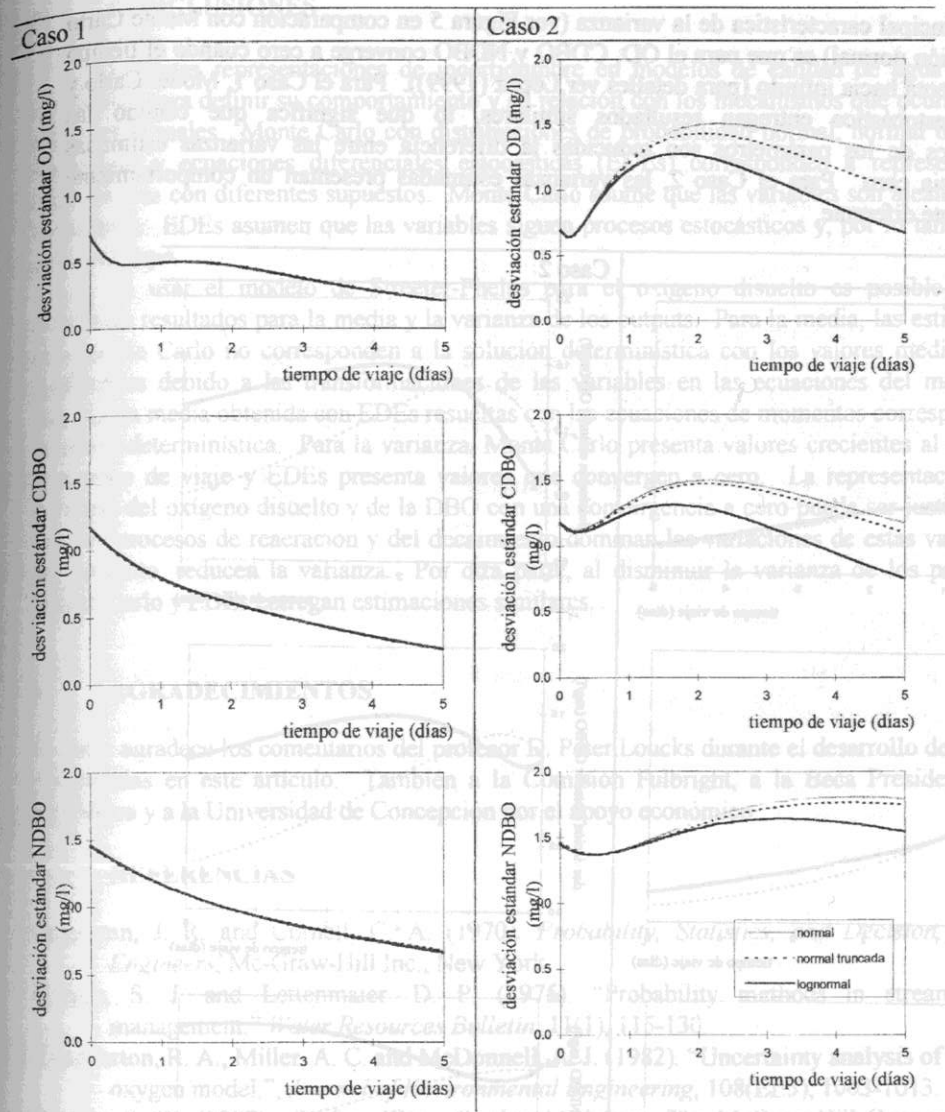


Figura 4 Estimaciones de la varianza con simulaciones Monte Carlo.

4.2 Ecuaciones Diferenciales Estocásticas

Los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias derivadas con las ecuaciones de momentos para el modelo Streeter-Phelps con incertidumbre en los parámetros muestra que el momento de primer orden (media) coincide con el modelo determinístico evaluado con los valores medios de los parámetros. Este resultado implica que los modelos estocásticos pueden ser considerados una extensión de los modelos determinísticos.

La principal característica de la varianza (ver Figura 5 en comparación con Monte Carlo con distribución normal) es que para el OD, CDBO y NDBO converge a cero cuando el tiempo de viaje aumenta hacia infinito (para detalles ver López (1999)). Para el Caso 1, Monte Carlo y el modelo estocástico entregan resultados similares, lo que significa que cuando las incertidumbres de los parámetros son reducidas la diferencia entre las varianzas estimadas converge hacia cero. Para el Caso 2, las varianzas estimadas presentan un comportamiento completamente diferente.

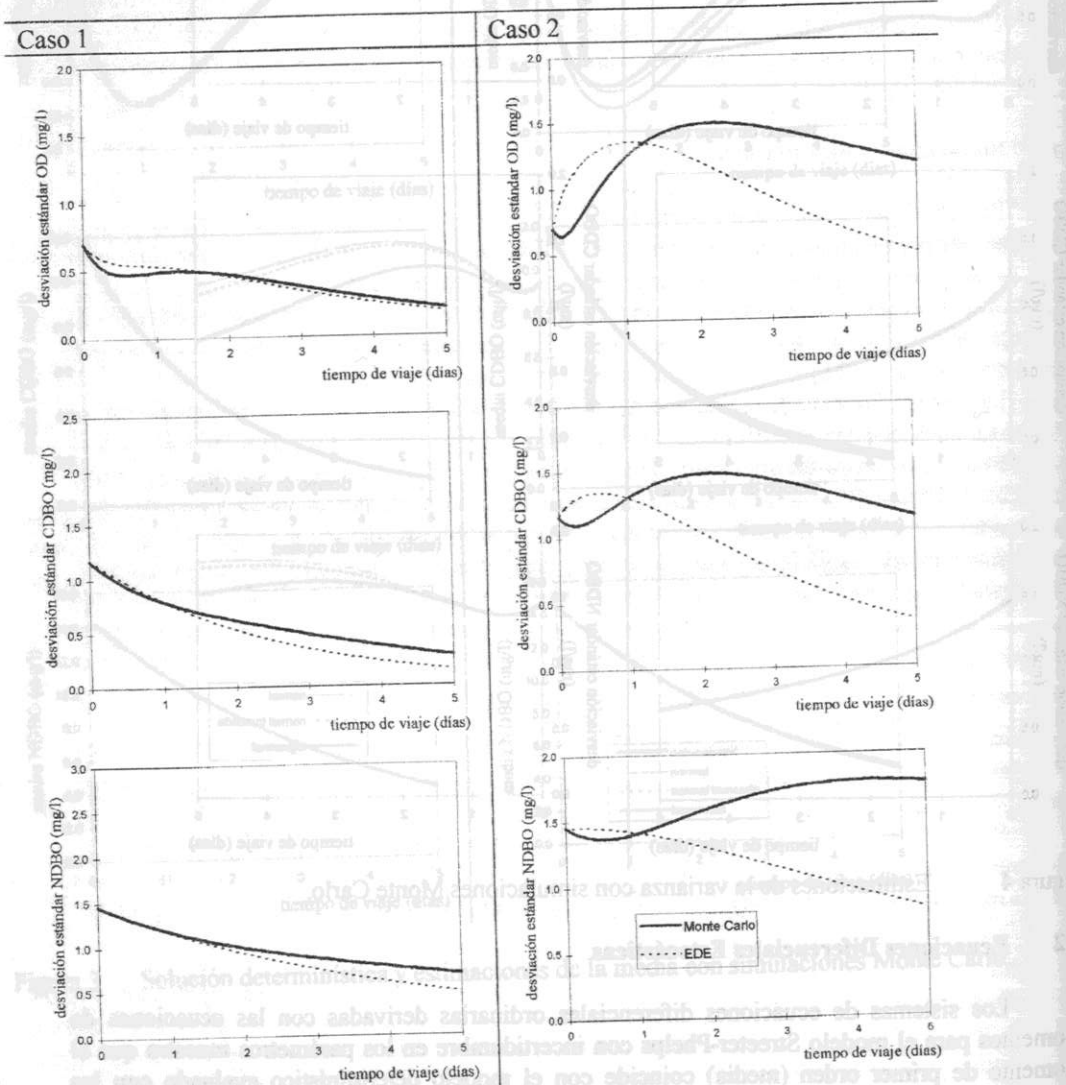


Figura 5 Estimaciones de la varianza con ecuaciones diferenciales estocásticas y simulaciones Monte Carlo (distribución normal).

5. CONCLUSIONES

Distintas representaciones de incertidumbre en modelos de calidad de agua han sido estudiadas para definir su comportamiento y su relación con los mecanismos que ocurren en las situaciones reales. Monte Carlo con distribuciones de probabilidad normal, normal truncada y lognormal y ecuaciones diferenciales estocásticas (EDEs) corresponden a representaciones matemáticas con diferentes supuestos. Monte Carlo asume que las variables son aleatorias pero constantes. EDEs asumen que las variables siguen procesos estocásticos y, por lo tanto, varían con el tiempo.

Al usar el modelo de Streeter-Phelps para el oxígeno disuelto es posible observar diferentes resultados para la media y la varianza de los outputs. Para la media, las estimaciones con Monte Carlo no corresponden a la solución determinística con los valores medios de los parámetros debido a las transformaciones de las variables en las ecuaciones del modelo; en cambio, la media obtenida con EDEs resueltas con las ecuaciones de momentos corresponde a la solución determinística. Para la varianza, Monte Carlo presenta valores crecientes al aumentar el tiempo de viaje y EDEs presenta valores que convergen a cero. La representación de la varianza del oxígeno disuelto y de la DBO con una convergencia a cero puede ser justificada ya que los procesos de reaeración y del decaimiento dominan las variaciones de estas variables y, por lo tanto, reducen la varianza. Por otra parte, al disminuir la varianza de los parámetros Monte Carlo y EDEs entregan estimaciones similares.

6. AGRADECIMIENTOS

El autor agradece los comentarios del profesor D. Peter Loucks durante el desarrollo de las ideas presentadas en este artículo. También a la Comisión Fulbright, a la Beca Presidente de la República y a la Universidad de Concepción por el apoyo económico.

7. REFERENCIAS

- Benjamin, J. R. and Cornell, C. A. (1970). *Probability, Statistics, and Decision for Civil Engineers*, Mc-Graw-Hill Inc., New York.
- Burges, S. J. and Lettenmaier, D. P. (1975). "Probability methods in stream quality management." *Water Resources Bulletin*, 11(1), 115-130.
- Chadderton, R. A., Miller, A. C. and McDonnell, A. J. (1982). "Uncertainty analysis of dissolved oxygen model." *Journal of Environmental Engineering*, 108(E5), 1003-1013.
- Chapra, S. C. (1997). *Surface Water-Quality Modeling*. The McGraw-Hill Companies, Inc., New York.
- Finney, B. A., Bowles, D. S. and Windham, M. P. (1982). "Random differential equations in river quality modeling." *Water Resources Research*, 18(1), 122-134.
- Kloeden, P. E. and Platen, E. (1992). *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*, Springer-Verlag, Berlin-New York.
- Leduc, R., Unny, T. E. and McBean, E. A. (1988). "Stochastic models for first-order kinetics of biochemical oxygen demand with random initial conditions, inputs, and coefficients." *Applied Mathematical Modelling*, 12, 565-572.

- López, A. (1999). *Stochastic Water Quality Models: Solution, Calibration and Application*. Ph. D. Thesis, Cornell University.
- Mays, L. W. (1996). *Water Resources Handbook*. McGraw-Hill, New York.
- Melching, C. S. and Anmangandla, S. (1992). "Improved first-order uncertainty method for water-quality models." *Journal of Environmental Engineering*, 118(5), 791-804.
- Melching, C. S. and Yoon, C. G. (1996). "Key sources of uncertainty in QUAL2E model of Passaic river." *Journal of Water Resources Planning and Management*, 122(2), 105-113.
- Orlob, G. T. (1992). "Water-quality modeling for decision making." *Journal of Water Resources Planning and Management*, 118(3), 295-307.
- Ponnambalam, K. and Curi, W. F. (1992). "Comment on: On the meaning of randomness in stochastic environmental models." *Water Resources Research*, 28(4), 1187-1189.
- Schnoor, J. L. (1996). *Environmental modeling, fate and transport of pollutants in water, air and soil*. John Wiley and Sons, New York.
- Song, Q. and Brown, L. C. (1990). "DO model uncertainty with correlated inputs." *Journal of Environmental Engineering*, 116(6), 1164-1180.
- Streeter, H. W. and Phelps, E. B. (1925). *A Study of the Pollution and Natural Purification of the Ohio River, III. Factors Concerned in the Phenomena of Oxidation and Reaeration*. Public Health Bulletin No. 146, U.S. Public Health Service, Washington, D.C.
- Thomann, R. V. and Mueller, J. A. (1987). *Principles of Surface Water Quality Modeling And Control*. Harper and Row, Publishers, New York.
- Zielinski, P. A. (1991a). "Comment on: An analytical technique for stochastic analysis in environmental models, by M.A. Tumeo and G.T Orlob." *Water Resources Research*, 27(4), 649-650.
- Zielinski, P. A. (1991b). "On the meaning of randomness in stochastic environmental models." *Water Resources Research*, 27(7), 1607-1611.

SOCIEDAD CHILENA DE INGENIERIA HIDRAULICA

XIV CONGRESO CHILENO DE HIDRAULICA

MODELACION DE LA INTRUSION SALINA EN ESTUARIOS BIEN MEZCLADOS

YARKO NIÑO¹

RESUMEN

Se presentan resultados de una modelación unidimensional del fenómeno de intrusión salina en estuarios bien mezclados. Las ecuaciones de Navier Stokes se aplican para el flujo impermanente en canales, promediándolas en la sección de escurrimiento, haciendo uso, además, de la aproximación de Boussinesq. Se obtienen ecuaciones semejantes a las de Saint Venant pero modificadas por el efecto de la presencia de salinidad. La ecuación de conservación de salinidad también se promedia en la sección, obteniéndose una ecuación de dispersión longitudinal de la salinidad media. Las ecuaciones son analizadas para tres casos. El primero corresponde al de un flujo permanente a caudal constante, el segundo a un flujo con una variación periódica de la velocidad en el tiempo, como un modelo simple del efecto de marea en el estuario, y el tercero al del flujo impermanente generado por la presencia de mareas con caudal afluente constante. En el caso de flujo uniforme se encuentra una solución analítica para la variación longitudinal de salinidad y se propone un modelo para estimar la longitud de la intrusión salina en estuarios. Esta solución y el modelo propuesto se validan a partir de datos de terreno disponibles para el río Lebu. En el caso de variación periódica de velocidad se encuentra que la respuesta de la distribución de salinidad en el estuario es también periódica pero desfasada con respecto a la onda de velocidad. En el caso del flujo impermanente generado por mareas se analizan los resultados de una simulación numérica de las ecuaciones obtenidas, que permite una comparación aproximada con datos disponibles para el río Lebu, la cual muestra que el modelo propuesto reproduce bien los procesos físicos observados en estuarios reales. Finalmente, se concluye que la advección asociada a caudales negativos durante la llenante tiene mucho mayor capacidad de introducir salinidad al estuario que los procesos puramente dispersivos que ocurren durante la vaciante o bien en condiciones de llenantes poco intensas, con caudales sólo positivos o levemente negativos.

¹ Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Chile