

ARTICULO DE INVESTIGACIÓN

CALIBRACIÓN CON MATLAB DE UN MODELO NUMÉRICO DE LA DEPURACIÓN NATURAL DE RÍOS

MATLAB CALIBRATION OF A NUMERICAL MODEL OF NATURAL RIVER PURIFICATION

David Ernesto Maron Domínguez ^{a,*} (0000-0003-4198-9962)
Tania Herrera Achón ^a (0000-0003-1483-9221)
Melany del Carmen Morales Castillo ^a (0000-0002-1093-5606)

^a CEMAT, ICB, Universidad Tecnológica de La Habana José Antonio Echeverría, (CUJAE)

^{a,*} tanherreraa@gmail.com

Recibido: 28 de agosto de 2025;

Aceptado: 19 de diciembre de 2025;

RESUMEN

Este trabajo aborda la calidad del agua en ríos mediante la modelación de la Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO) y el Oxígeno Disuelto (OD), indicadores clave para evaluar la presencia de materia orgánica y la capacidad de depuración de ríos y corrientes superficiales. Se parte de dos ecuaciones diferenciales ordinarias en régimen permanente que representan procesos de transporte, descomposición, reaeración y autodepuración natural. De estas ecuaciones se desarrolla un modelo numérico implementado en MATLAB, basado en el Método de los Elementos Finitos (MEF). El modelo integra el clásico modelo de Streeter-Phelps como referencia teórica para la dinámica de DBO y OD. En el marco numérico se consideran varios parámetros cinéticos: K1 y K2, relacionados con la depuración de la DBO y la reaeración del OD; el coeficiente de dispersión longitudinal D y un término W, que representa entradas y/o salidas de materia en el río, permitiendo simular aportes puntuales o difusos. Para calibrar estos parámetros, se emplea el algoritmo de optimización fmincon de MATLAB, estableciendo restricciones de cotas para cada parámetro. Se presentan dos ejemplos: uno teórico, usando Streeter-Phelps con dispersión nula; y otro real, correspondiente a la modelación de un tramo del río Almendares a partir de mediciones de campo. En ambos casos se muestran resultados numéricos y gráficos de la calibración de parámetros. Los resultados identifican áreas críticas de contaminación y permiten simular escenarios futuros, contribuyendo a la gestión sostenible de los recursos hídricos.

Palabras claves: calidad del agua, Demanda Bioquímica de Oxígeno, dispersión, modelo matemático, Oxígeno Disuelto, río.

ABSTRACT

This work addresses water quality in rivers by modeling Biochemical Oxygen Demand (BOD) and Dissolved Oxygen (DO), key indicators for assessing the presence of organic matter and the purification capacity of rivers and surface streams. It is based on two steady-state ordinary differential equations that represent transport, decomposition, reaeration, and natural self-purification processes. From these equations, a numerical model implemented in MATLAB is developed, based on the Finite Element Method (FEM). The model integrates the classic Streeter-Phelps model as a theoretical reference for BOD and DO dynamics. Several kinetic parameters are considered in the numerical framework: K1 and K2, related to BOD purification and DO reaeration; the longitudinal dispersion coefficient D and a term W, which represents inputs and/or outputs of matter into the river, allowing the simulation of point or diffuse inputs. To calibrate these parameters, the MATLAB fmincon optimization algorithm is used, establishing bounding constraints for each parameter. Two examples are presented: a theoretical one, using Streeter-Phelps with zero dispersion; and a real one, corresponding to the modeling of a stretch of the Almendares River based on field measurements. In both cases, numerical and graphical results of the parameter calibration are shown. The results identify critical areas of pollution and allow the simulation of future scenarios, contributing to the sustainable management of water resource.

Keywords: water quality, Biochemical Oxygen Demand, dispersion, mathematical model, Dissolved Oxygen, river.



INTRODUCCIÓN

El agua es un recurso esencial para la vida y el desarrollo sostenible, dependiente de fuentes como ríos, lagos y aguas subterráneas. Aunque estas fuentes concentran solo una pequeña fracción del agua dulce mundial, son fundamentales para el consumo humano y la economía. La calidad del agua y la conservación de los ecosistemas acuáticos son cruciales para mantener servicios ecosistémicos de regulación, aprovisionamiento, soporte y culturales, que sustentan la biodiversidad y el bienestar humano.

Sin embargo, diversas actividades han propiciado su deterioro causando afectaciones a la fauna, la flora y la salud humana, entre otros. Por ello, su conservación se ha vuelto un tema de gran relevancia al momento de realizar procesos productivos en los cuales se debe garantizar que, dentro de un sistema determinado, el agua ingrese con características apropiadas para el uso que se requiera, y que esta regrese a los cauces naturales en condiciones adecuadas, teniendo en cuenta lo estipulado en la normatividad vigente (Guzmán, 2024). Por ello, concebir el agua como eje estructurante de la vida debe conllevar a la justa distribución de estos servicios ecosistémicos y su uso de manera responsable y sostenible asegurando una adecuada calidad (Cadena L, Liévano A., 2020).

El objetivo de la investigación es aplicar un modelo implementado en MATLAB para analizar ejemplos hipotéticos y reales, enfocándose en la sensibilidad de parámetros como K_1 , K_2 , K_y , la dispersión longitudinal D y el termino fuente W y en la determinación de la DBO y el OD de un tramo de un río. Además, MATLAB permite la programación personalizada de ecuaciones y algoritmos, lo que facilita la adaptación del modelo a las características específicas de un río y la inclusión de información detallada sobre las mediciones y las condiciones ambientales. Esto llevó a que los científicos e investigadores, se centraran más en modelos numéricos y matemáticos para reducir el costo computacional (Mirabal, 2024). Todos estos modelos están basados en la regresión lineal ordinaria, cuya varianza es constante y se puede representar con una línea recta con distribuciones gaussianas (The MathWorks, 2019). Esta compañía es la que desarrollo el MATLAB.

Formulación del problema

El problema de la depuración de un río viene modelado matemáticamente por dos ecuaciones diferenciales en derivadas parciales de segundo orden que describen la variación de la concentración de la DBO y del OD en el espacio y en el tiempo, a partir de mediciones en el río o de un vertimiento en dicho río (Romualdo, 2010). El modelo puede ser dinámico (impermanente, dependiente del tiempo) o puede considerarse en estado estacionario (permanente) al eliminar la dependencia temporal. Las ecuaciones correspondientes al régimen permanente son las siguientes:

$$A U \frac{\partial DBO}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(A D \frac{\partial DBO}{\partial x} \right) + A K_1 DBO = R_{dbo}(x) \quad (1)$$

$$A U \frac{\partial OD}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(A D \frac{\partial OD}{\partial x} \right) + A K_2 OD = A (K_2 OD_{sat} - W) + A K_y K_1 DBO + R_{od}(x) \quad (2)$$

Donde:

DBO = DBO(x) es la demanda bioquímica de oxígeno (mg/l),

OD = OD(x) es el oxígeno disuelto (mg/l),

$A = A(x)$ es el área mojada de la sección transversal del río (m^2)

$U = U(x)$ es la velocidad del agua (m/día)

$D = D(x)$ es el coeficiente de dispersión/difusión ($m^2/día$)

K_1 es la constante de degradación de la DBO (1/día)

K_2 es la constante de reaeración del OD (1/día)

K_y es el rendimiento del OD (adimensional)

DO_{sat} es la concentración de OD saturado (mg/l)

$W = W(x)$ es el término fuente y/o sumidero de OD (mg/l día)

$R_{dbo}(x)$, $R_{od}(x)$ son los aportes de vertimientos de DBO y de OD, respectivamente (mg/l)

x es la longitud en la dirección del eje x .

Según se observa que algunas de las variables declaradas anteriormente se les ha indicado la presencia de la dependencia de la posición x .



Los mecanismos de autodepuración de un río están representados por cuatro zonas (Chaparro, 2020), según el nivel de contaminación y la fase de depuración, ver Figura 1: zona de degradación, zona de descomposición activa, zona de la recuperación y zona de aguas limpias. En este sentido, la capacidad de autodepuración de un río se encuentra relacionada con la velocidad de degradación o de biodegradación de los compuestos vertidos al mismo, ya sea por causas naturales como antrópicas (Quiroz, 2017).

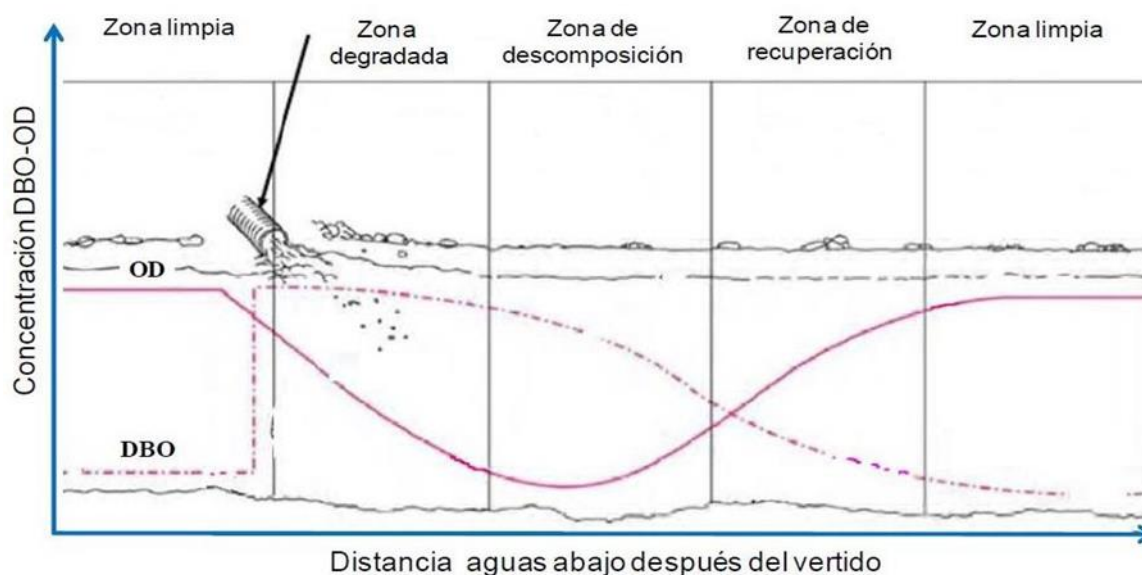


Fig. 1. Zonas de autodepuración de un río (Chaparro, 2020)

METODOLOGÍA

Condiciones iniciales y condiciones de fronteras

El modelo matemático de las ecuaciones (1) y (2) puede ser un problema de frontera o un problema con condiciones iniciales. Si no existe dispersión, es decir, si se considera que el coeficiente D es nulo entonces el problema a resolver representa un problema de Cauchy con una sola condición inicial en $x = 0$, para cada una de las dos funciones incógnitas. Esto ocurre porque ambas ecuaciones serían ecuaciones diferenciales de 1er orden. Pero si la dispersión no se considera nula entonces el problema a resolver representa un problema de frontera con una condición de borde en ambas fronteras de la región para cada una de las dos funciones incógnitas.

Condiciones de continuidad en los puntos interiores.

Como se trabaja con el régimen permanente, entonces en cada uno de los puntos interiores de la región se debe de cumplir la ecuación de continuidad de las concentraciones y del gasto. Si en algún punto interior ocurre un vertimiento entonces en dicho punto ocurre que el gasto que llega a dicho punto se debe de sumar al gasto del vertimiento en dicho punto. Esto ocurre también con la concentración el gasto, si el flujo es unidimensional, la salida de un tramo y la entrada al próximo tramo deben conservar la continuidad del gasto o caudal.

Interpretación del término ODSat



Se muestra en la ecuación (2) la presencia del término OD_{sat} que representa la concentración de saturación de OD en el agua y es clave para modelar la reaeración. Su valor depende principalmente de la temperatura, ya que la solubilidad del oxígeno disminuye con el aumento de temperatura.

Interpretación del término fuente W

También, en la ecuación (2), se muestra el término fuente y/o sumidero, W, el cual agrupa la tasa neta de remoción de OD por procesos distintos a la oxidación bioquímica de DBO. Los procesos principales que restan OD son la oxidación biológica consumidora de oxígeno y la reaeración que aumenta el OD. Luego W representa otros procesos de remoción de OD, abarcando factores que reducen OD fuera de la DBO, y es esencial para obtener modelos más precisos de la dinámica del oxígeno en sistemas acuáticos.

Interpretación del término K_y

Se destaca la importancia de incluir el coeficiente K_y en la ecuación del OD. K_y es un coeficiente adimensional que relaciona el consumo de OD con la cantidad de materia orgánica biodegradable (DBO) presente; indica la cantidad de litros de oxígeno necesarios para degradar un litro de materia orgánica. Este coeficiente refleja la interacción entre la demanda de oxígeno y la materia orgánica en el sistema hídrico.

Interpretación de los términos K_1 Y K_2

Se mencionan los parámetros cinéticos K_1 y K_2 en el modelo. K_1 es la constante de degradación de la DBO, que describe la velocidad a la que la materia orgánica biodegradable se descompone consumiendo oxígeno. Su valor depende de temperatura, composición de la materia orgánica, microbiota y nutrientes. K_2 es la constante de reaeración del OD, que representa la velocidad a la que el oxígeno se disuelve desde la atmósfera al agua, dependiendo de velocidad del agua, turbulencia, temperatura y concentración de OD en la atmósfera. Aunque ambas constantes tienen unidades de (1/tiempo), sus mecanismos y dependencias ambientales son diferentes, por lo que en condiciones reales es poco probable que $K_2 = K_1$.

Modelo de Streeter-Phelps

El llamado modelo de Streeter-Phelps es la solución del sistema de las ecuaciones diferenciales (1) y (2). Estas ecuaciones tienen en cuenta factores como la DBO (consumo de oxígeno), la tasa de descomposición y la capacidad de reoxigenación o reaeración del agua (OD).

Después de realizar ciertas simplificaciones, como la suposición de un flujo en régimen permanente y considerar el coeficiente de dispersión nulo $D = 0$, el sistema de ecuaciones (1) y (2) se puede resolver analíticamente para obtener la expresión matemática del modelo de Streeter-Phelps. Estas dos soluciones proporcionan la distribución de la concentración de la DBO y la concentración del OD(x) en función de la distancia aguas abajo del punto de vertido, las cuales vienen definidas por las expresiones:

$$\begin{cases} DBO(x) = DBO_o e^{-\frac{K_1 x}{U}} \\ DO(x) = DO_o + \left(\frac{K_y K_1 DBO_o}{K_2 - K_1} \right) \left(e^{-\frac{K_2 x}{U}} - e^{-\frac{K_1 x}{U}} \right) \end{cases} \quad (3)$$

Donde:

OD_o y DBO_o representan los valores iniciales del OD y de la DBO aguas arriba del río.

El modelo de Streeter-Phelps se utiliza principalmente para describir la descomposición de la materia orgánica en cuerpos de agua, como ríos y lagos sin dispersión y en condiciones estacionarias.

Discretización según el MEF

Discretización de la ecuación de la DBO según el MEF

En muchas ocasiones no es posible obtener las soluciones exactas de (1) y (2) ya que se deberían de hacer muchas suposiciones y simplificaciones que no reflejan la realidad. Es por eso que a continuación se muestra el sistema final de ecuaciones lineales al que se llega como resultado de la aplicación del MEF a la ecuación diferencial (1).



El sistema final es un sistema de ecuaciones lineales algebraicas cuyas incógnitas son los valores de la DBO en todos los puntos de la malla confeccionada sobre la longitud total del río:

$$[M_{dbo}]\{DBO\} = \{F_{dbo}\} \quad (4)$$

Donde la matriz $[M_{dbo}]$ y el vector de los términos independientes $\{F_{dbo}\}$ tienen las siguientes expresiones:

$$[M_{dbo}] = \sum_{e=1}^{ne} \left(\frac{A^e D^e}{\Delta x^e} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{A^e U^e}{2} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{A^e K_1 \Delta x^e}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \right)$$

$$\{F_{dbo}\} = \sum_{i=1}^{nv} (0, \dots, 0, DBO_v^i \cdot q_v^i, 0, \dots, 0)$$

Discretización de la ecuación diferencial del OD según el MEF

La aplicación del MEF a la ecuación diferencial (2) conduce a resolver el siguiente sistema de ecuaciones lineales algebraicas cuyas incógnitas son los valores del OD en todos los puntos de la malla del río:

$$[M_{do}]\{DO\} = \{F_{do}\} \quad (5)$$

Donde la matriz $[M_{do}]$ y el vector de los términos independientes $\{F_{do}\}$ tienen las siguientes expresiones:

$$[M_{do}] = \sum_{e=1}^{ne} \left(\frac{A^e D^e}{\Delta x^e} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{A^e U^e}{2} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{A^e K_2 \Delta x^e}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \right)$$

$$\{F_{do}\} = \sum_{e=1}^{ne} \left(-\frac{A^e K_y K_1 \Delta x^e}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \{DBO^e\} - A^e (W^e - K_2 C_s^e) \frac{\Delta x^e}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \right)$$

$$+ \sum_{i=1}^{nv} (0, \dots, 0, DO_v^i \cdot q_v^i, 0, \dots, 0)$$

Donde:

El supra índice (e) denota los valores del parámetro, variable o coeficiente restringido al elemento e,

A_e es el área mojada de la sección transversal del elemento,

D_e es el coeficiente de dispersión del elemento,

U_e es el valor de la velocidad media del agua en el elemento,

Δx^e es la longitud del elemento,

DBO_v^i y OD_v^i son las concentraciones de residuales en los puntos de vertimientos

q_v^i es el caudal o gasto que entra por el punto de vertimiento.

Los restantes parámetros o coeficientes ya fueron definidos anteriormente.

Modelo matemático del problema inverso para la calibración de los parámetros

Para plantear el problema inverso en este tipo de investigación se debe de tener en cuenta tres aspectos esenciales:

Primero: Como de forma general no es posible trabajar con las soluciones exactas de las ecuaciones diferenciales (1) y (2), debido a que habría que hacer varias suposiciones y simplificaciones no recomendables, entonces es mucho más recomendable aplicar un método numérico a las ecuaciones (1) y (2). Como este modelo matemático es unidimensional entonces se puede aplicar el Método de las Diferencias Finitas (MDF) o el Método de los Elementos Finitos (MEF) (Salgado, 2021). Aquí se aplica el MEF, con funciones de interpolación lineales, a las ecuaciones diferenciales (1) y (2) con lo cual se obtiene el llamado modelo directo, ecuaciones (4) y (5). Si se conocen todos los parámetros de las ecuaciones (1) y (2) y se conocen las condiciones de frontera entonces se pueden obtener los valores de la DBO y del OD con la ayuda de este modelo directo.



Segundo: El modelo directo obtenido en el paso anterior se implementa computacionalmente en algún asistente matemático. Aquí se utilizó el asistente matemático MATLAB el cual tiene grandes ventajas y se presta muy bien para realizar la tarea final. Se construye y se implementa también en MATLAB una función objetivo cuyas variables de entrada son los parámetros a calibrar y como salida el valor del Error Mínimo Cuadrático, el cual calcula las diferencias entre los valores observados y los valores calculados. Esta función objetivo se acopla a un algoritmo de optimización, que busca el punto de mínimo de esta función para un conjunto de restricciones de cotas de los parámetros. Aquí se utiliza el algoritmo determinístico fmincon.

Tercero: Se menciona en el punto anterior los valores observados y los valores calculados. Para calibrar los parámetros del modelo en un problema real hay que tener obligatoriamente mediciones de campo tanto de la DBO como del OD en varios puntos del tramo del río en estudio. Por otro lado, el algoritmo de optimización se encarga de buscar los valores de los parámetros que se encuentran dentro de las restricciones de cotas de forma tal que cuando se evalúan en el modelo directo se obtienen los llamados valores calculados (Escobar, 2021).

Función Objetivo

Una forma aproximada de representar la función objetivo puede ser la siguiente

$$FO_{bj} = f(K_1, K_2, K_y, D, W, \dots, DBO_{obs}, OD_{obs}, \dots) \quad (6)$$

Error Medio Cuadrático.

El Error medio Cuadrático viene dado por la expresión

$$EMC = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N_{obs}} (DO_{cat}^i - DO_{obs}^i)^2}{N_{obs}}} \quad (7)$$

Todo lo anterior conforma la formulación del problema inverso que requiere completamente de la ayuda de la computación que le fue encargada al asistente matemático MATLAB lo cual fue mencionado anteriormente.

RESULTADOS

Comprobación de los algoritmos de cálculo

Ejemplo: río de un solo tramo con dispersión nula (Modelo de Streeter-Phelps)

En este ejemplo no real se aplica el modelo conformado por las ecuaciones diferenciales (1) y (2) con dispersión nula, en el cual se cumplen las condiciones de flujo permanente. El río se considera que está formado por un solo tramo, es decir, que ha ocurrido un vertimiento de residuales solamente en el punto inicial $x = 0$, el cual se toma como aguas arriba. Se quiere mostrar cuál es la distribución espacial de las variables DBO(x) y OD(x) a lo largo del río en función de la distancia y se determina si ocurre cierto grado de depuración natural del río aguas abajo del mismo, en $x = L$. A continuación, se muestran los datos necesarios para la simulación.

Datos de la malla de la región

Se supone que el río tiene $L = 6$ km de longitud y se divide en $N = 100$ subintervalos lo que genera 101 nodos en total en toda la región con una malla de 60 m de longitud de cada subintervalo.

Datos del flujo y de la geometría del río

Se toma un río poco caudaloso con un gasto o caudal de $q_r = 5 \text{ m}^3/\text{s}$. La sección transversal del mismo se elige de forma rectangular con un ancho de fondo de $b = 5$ m, talud $m = 0$, coeficiente de Manning $n = 0,001$ y pendiente del fondo $S_o = 0,0001$. Se utiliza la ecuación de Manning con la que se obtiene un tirante normal $H = 0,26$ m, un área mojada de la sección transversal de $A = 1,3 \text{ m}^2$ y una velocidad de $U = 3,8462 \text{ m/s}$.

Datos del vertimiento

El río recibe un vertimiento de residuales aguas arriba, en $x = 0$. Este vertimiento lo forman tres datos; una DBOv, un ODv y un gasto o caudal de vertimiento (q_v). Se toman los siguientes valores: para la DBOv = 20 mg/l y para el ODv = 5 mg/l. En el q_v se asume el 10% del q_r suponiendo que el gasto de vertimiento (q_v) es



mucho menor que el gasto que circula por el río (q_r) y no afecta considerablemente las condiciones del flujo permanente. Se ilustra en la figura siguiente un esquema de simulación de la región:



Fig. 2. Esquema de la región de simulación.

Datos de la temperatura

Se supone una temperatura constante de 26 oC y para este valor se corresponde con un valor de la concentración de $OD_{sat} = 8,1337 \text{ mg/l}$.

Datos de los parámetros a calibrar

Como uno de los objetivos de este ejemplo es mostrar el resultado de la calibración y como además en este ejemplo no real no se disponen de mediciones reales en un río, se han supuesto que $D = 0$ y que $W = 0$ en las ecuaciones (1) y (2). Entonces se han tomado como conocidos los valores prefijados de los parámetros a calibrar que se muestran en la segunda columna de la tabla siguiente.

Tabla 1. Parámetros prefijados y parámetros calibrados

Parámetros	Valores prefijados	Valores calibrados
K1 (1/seg)	0,0015	0,0015033
K2 (1/seg)	0,0075	0,0075553
Ky (adim)	1,5	1,5096

Con los valores prefijados de los parámetros se evalúan las dos soluciones del modelo permanente con D nula en la ecuación (3), en 21 nodos del río simulando los puntos de mediciones del total de los 101 nodos de la malla y se toman estas evaluaciones como los valores observados para evaluar la función objetivo.

En la tercera columna de la tabla anterior se muestran los resultados de los valores de los parámetros calibrados.

Con este ejemplo no real puede observarse que tanto la gráfica de la DBO como la gráfica del OD tienen la forma similar a la que se muestran en cualquier literatura internacional. En la literatura se dice que la gráfica del OD tiene forma de una cuchara.

Aunque es lógico no esperar que los valores de los parámetros calibrados coincidan al 100% con los valores prefijados, también es bueno señalar que el algoritmo de optimización cumplido su objetivo y demostró que pudo reproducir dichos parámetros.

A continuación, se muestran las gráficas de las distribuciones de la $DBO(x)$ y del $OD(x)$, los valores calculados se representan con (*) y los observados con (o) de ambas variables correspondientes a este ejemplo.

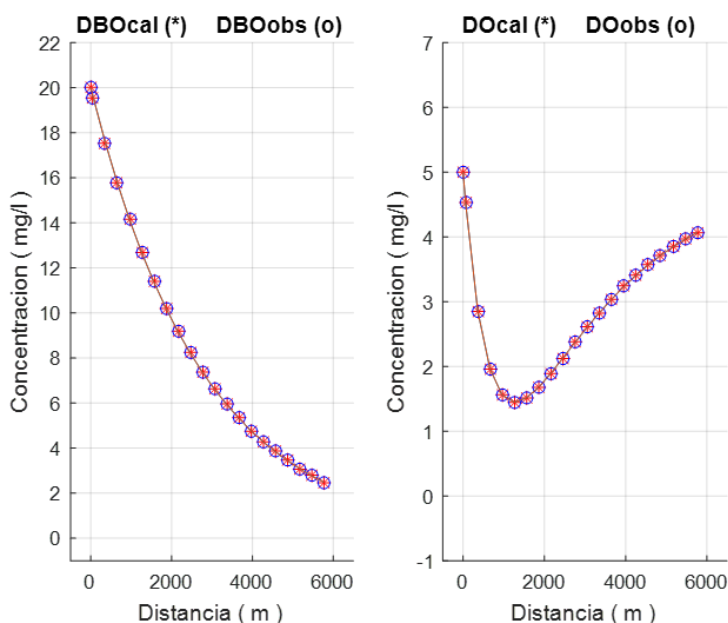


Fig. 3. Gráficas de la DBO(x) y del OD(x).

También se obtuvo de la ecuación (3) el punto crítico en la gráfica del OD(x), siendo este el punto a partir del cual se comienza a recuperar el OD en el río. Este representa el punto de mínimo de la gráfica del OD(x) y se calcula derivando la función del OD(x), igualando a cero dichas derivadas y despejando el valor de la variable x. En este ejemplo el valor del punto de mínimo es $X_{min} = 1280,9$ m y observando que en este punto la DBO tiene un valor aproximado de 6 mg/l. Es decir, que a partir de esta distancia se empieza a recuperar el OD en el río para este ejemplo.

También se calculó el Máximo Error Absoluto entre los valores calculados y los valores observados para la DBO(x) y para el OD(x) en los 21 nodos de la malla, del total de 101 nodos, que se utilizaron para la calibración de los que se obtuvo: $MaxErrAbsDBO = 0.00042423$ $MaxErrAbsOD = 0.000046429$.

Ejemplo – Modelación en un tramo del Río Almendares

En función de las características hidráulicas y morfológicas; los procesos físicos, químicos y biológicos que ocurren en el río Almendares y a la cantidad y calidad de la información disponible se pudo adaptar el modelo genérico propuesto. El tramo del río Almendares que se estudia comprende entre el punto de la estación de depuración de residuales (EDAR) “María del Carmen” que vierte al Almendares (km 14,45 desde la desembocadura) y el Puente del Bosque de la Habana (km 3,05) (Pestana, 2016).

Datos de la malla de la región

Este ejemplo tiene 10 subintervalos y 11 nodos. Un esquema de la región de simulación de este ejemplo se muestra en la figura siguiente:

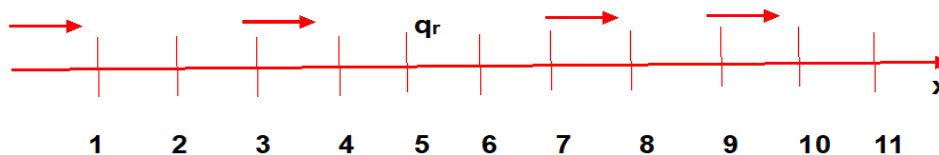


Fig. 4. Esquema de la región de simulación.

Datos del vertimiento

En el tramo que se estudia en esta simulación el río no tiene puntos de vertimientos.

Datos de los parámetros a calibrar

En este ejemplo real se calibran los 3 parámetros cinéticos (K_1 , K_2 y K_y), el coeficiente de dispersión D y del término fuente W que aparece en la ecuación (2). Por tanto, se espera de la calibración que se obtengan los valores aproximados de estos parámetros.

Datos del OD_{sat}

En la Tabla 1 se dan los valores de las concentraciones de la DBO, del OD y del OD_{sat} para cada sección del tramo del río.

A continuación, se muestran dos tablas con los datos reales medidos en el tramo del río seleccionado.

Tabla 2. Datos de la DBO, del OD y del OD_{sat} : [10].

Sección	DBO (mg/l)	OD (mg/l)	OD_{sat} (mg/l)
1	58,63	5,80	8,218
2	60,42	4,10	8,260
3	67,93	2,56	8,363
4	50,53	2,38	8,335
5	54,34	4,10	8,387
6	42,90	3,50	8,387
7	50,05	3,35	8,309
8	32,18	3,40	8,294
9	22,88	1,8	8,340
10	58,63	4,12	8,371
11	48,62	3,1	8,387

Tabla 3. Datos del flujo y de la geometría del río: [10].

Sección	x (km)	U (m/s)	A (m ²)	q _r (m ³ /s)	H (m)
1	0,00	0,17	8,20	1,39	0,58
2	0,05	0,17	10,40	1,77	0,58
3	2,34	0,20	6,80	1,36	0,72
4	4,20	0,34	9,00	3,06	0,66
5	27	0,34	9,90	3,37	0,66
6	6,32	0,25	16,90	4,23	1,42
7	8,82	0,19	18,90	3,59	0,75
8	9,21	0,19	18,90	3,59	0,75
9	9,50	0,19	24,00	4,56	0,82
10	10,51	0,19	24,00	4,56	0,83
11	10,95	0,19	25,00	4,75	0,74

A continuación, se muestra una figura con las dos gráficas que se obtuvieron de la calibración

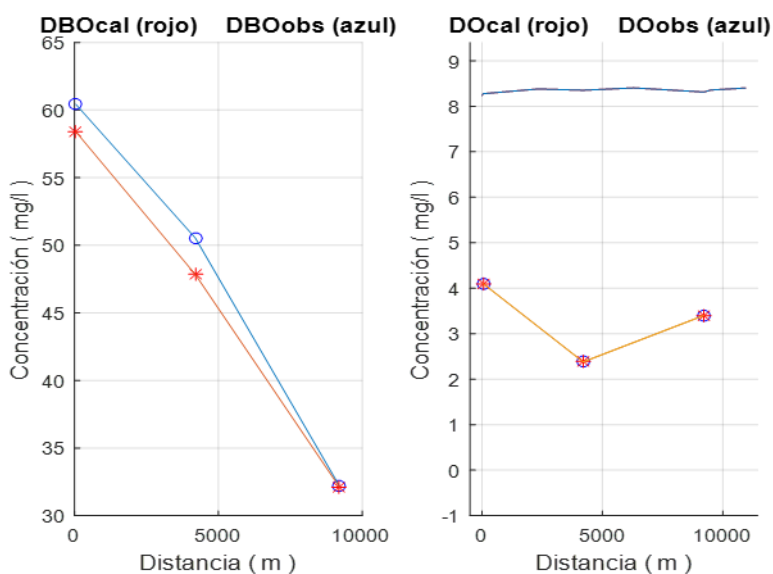


Fig. 5. Resultados gráficos de la calibración del modelo.

En la figura anterior se observa que se ha obtenido un buen ajuste para el OD valores observados (o en azul) y valores calculados (* en rojo) y un ajuste aceptable para la DBO. Es bueno señalar que se utilizaron solamente 3 nodos para la calibración en este ejemplo real. Es por eso que la figura anterior solo muestra lo que sucede en esos 3 nodos, del total de 11 que tiene la malla.

Resultados numéricos de la calibración

Los resultados de la calibración de los coeficientes cinéticos aparecen en la tabla siguiente.

Tabla 4. Valores calibrados de los coeficientes cinéticos

K₁ (1/día)	557,40
K₂ (1/día)	3487,3
K_y (adim)	9,7876

En la Tabla 5 se muestran los resultados de la calibración del coeficiente de dispersión D y del término fuente W. Los valores de la dispersión D obtenidos de la calibración pueden parecer grandes, pero es bueno decir que en la literatura internacional se pueden encontrar diversas fórmulas del coeficiente de dispersión con valores muy pequeños o muy grandes. Dichas fórmulas dependen de la geometría de la sección transversal del río y de los datos del flujo que circula por el río. Pero como este ejemplo es real fue imposible obtener toda esa información y solo fue posible disponer de la información de las Tablas 2 y Tabla 3.

Tabla 5. Valores calibrados de D y de W en cada subintervalo.

Subintervalo	D (m²/día)	W (mg/l seg)
1	50164	-0.97243
2	50224	0.3212
3	49809	0.069454
4	49955	-1
5	50000	0
6	50000	0
7	44833	-0.457
8	55023	-0.44074
9	50000	0
10	50000	0

Los resultados obtenidos del coeficiente W indican que en los subintervalos 1, 4, 7 y 8 hay entrada del oxígeno ($W < 0$) al río mientras que en los subintervalos 5, 6 9 y 10 no hay entrada o salida del oxígeno ($W = 0$). Solamente en los subintervalos 2 y 3 hay salidas del oxígeno ($W > 0$). También se pudo calcular el valor de la función objetivo que tiene en cuenta el Error Medio Cuadrático y cuyo valor es $F_{Obj} = 0.00027922$ lo cual demuestra que el ajuste obtenido de la calibración es bastante aceptable.

CONCLUSIONES

La implementación en MATLAB de los algoritmos de cálculo del MEF acoplados con el algoritmo de optimización significó una gran herramienta para el desarrollo de este trabajo y por supuesto para futuras aplicaciones en ejemplos teóricos y/o reales. Se destaca la posibilidad del algoritmo numérico de poder calibrar el coeficiente de dispersión y el termino fuente W.

La simulación evidenció que factores como la temperatura del agua, la tasa de degradación de la DBO, la reaeración del OD, la dispersión y las entradas y/o salidas de vertimientos contaminantes pueden influir significativamente en los niveles de la DBO y del OD. Se destaca la importancia de la necesidad de monitorear todas las variables que intervienen en este tipo de modelación para gestionar la salud del ecosistema acuático.



REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Cadena, L., & Liévano, A. (2020). Valores y principios bioéticos que identifican las comunidades en los servicios ecosistémicos que prestan los ríos y quebradas. *Revista Colombiana de Bioética*, 15,
- Escobar, M. (2021). Calibration of Predictive Models: A Unified Framework. *Journal of Statistical Theory and Practice*, 2021
- Guzmán, D. G. (2024). Implementación de un modelo matemático para representar variaciones de la calidad del agua del río Chinchina por potenciales de descarga de sedimentos provenientes del embalse Camagiadua de la Central Hidroeléctrica de Caldas (CHEC) [Tesis de maestría]. [Universidad Nacional de Colombia], [Ciudad Manizales]
- Mirabal, M. (2024). Calibración de ecuaciones analíticas para uso en vertedores tipo laberinto a través de modelación numérica (Tesis de diploma, Ingeniero Hidráulico). [Universidad Tecnológica “José Antonio Echeverría, Cujae], [La Habana]
- Pestana, A. (2016). Propuesta del análisis de un modelo matemático para la determinación de la calidad del agua de aguas superficiales. Universidad Central “Marta Abreu de las Villas”, Santa Clara, Cuba. [Tesis de pregrado]
- Quiroz, L. (2017). Metodología para la evaluación de la contaminación en ríos: Caso de estudio, río Portoviejo, Ecuador (Tesis doctoral en Ciencias Técnicas). [Universidad de Cuenca], [Ecuador]
- Romualdo, S. (2010). Numerical modeling in open channel hydraulics. New York, NY: Springer. (Water Science and Technology Library)
- Salgado, V. H. (2021). Ecuaciones diferenciales parciales del tipo parabólico. [Libro año 2021]
- The MathWorks. (2019). Ajuste de datos con MATLAB. Sitio web. <https://es.mathworks.com/discovery/ajuste-datos.html> (Accedido 15 de febrero de 2019)

CONTRIBUCIÓN AUTORAL

David Ernesto Marón Domínguez: investigación, análisis de los resultados, interpretación de los datos.

Tania Herrera Achón: revisión y redacción del artículo.

Melany del Carmen Morales Castillo: revisión, interpretación de datos, investigación.

En este artículo no existen conflicto de interes entre los autores.

