MODELOS MATEMATICOS PARA EL CONCEPTO DE CALIDAD DE AGUAS

J.Mª Pacheco e I. Fernández

Facultad de Ciencias del Mar. Universidad de Las Palmas.
Las Palmas de Gran Canaria. España.

RESUMEN.
En este trabajo se pasa revista a los modelos en uso para el diagnóstico, predicción y control de la calidad de aguas desde el punto de vista matemático. Se propone un serie de modelos basados en el análisis de procesos estocásticos y se presentan ciertos resultados al respecto.

ABSTRACT.
A survey of methods for the modelling of water quality is presented, reviewing their various features. An approach to the problem is made through the application os stochastic processes, with a proposal to the use of this modelling principle.

1. Introducción.

Una característica del medio marino es su capacidad de actuar como tampón ante la introducción en él de diferentes sustancias. Técnicamente, esa propiedad se expresa mediante el concepto de *calidad de aguas*, concepto que en principio es de naturaleza vaga y necesita una definición rigurosa.

La calidad de un agua se determina midiendo en ella un conjunto de n parámetros P_j cuyos valores pertenecen a ciertos intervalos I_j. Dentro de cada uno de éstos intervalos existe un subintervalo I'_j que corresponde a los valores admisibles de los parametros segun los criterios que se hayan establecido a base de ideas biológicas, químicas, económicas, sociales, etc. Si se supone que los P_j representan propiedades que no interaccionan instantáneamente podemos definir *la calidad de un agua mediante un vector P cuyas componentes son precisamente las P_j*.

Por lo general los P_j representan valores de concentraciones de sustancias, o valores de propiedades físicas del agua; en la práctica n se reduce a valores pequeños, como 2 ó 3, aunque excepcionalmente pueden darse valores de hasta 30 o más.

La definición que se ha dado es estática: No tiene en cuenta la evolucion espacio-temporal de los parámetros ni sus posibles interacciones en ese dominio. Estas interacciones se prohibieron en la definición de la calidad de agua si eran instantáneas, pero a otras escalas son ciertamente responsables de algunas variaciones en la calidad. Con tal objeto supondremos que existe una relación del tipo siguiente:

$$P_j = f_j(x, t; P)$$

donde x es la posición y t el tiempo. En la práctica es más conveniente representar la evolución temporal del parámetro, obteniendo así un sistema de n ecuaciones:

$$\partial P_j / \partial t = E_j(x, t; P; D)$$

donde D representa un conjunto de operadores diferenciales en las variables espaciales. Esta última expresión es la forma más general posible de un modelo de calidad de aguas. Los coeficientes de los operadores D transportan la información acerca de las características ambientales y su determinación es parte esencial de la tarea modelizadora.

2. Modelización y sus clases.

La extremada generalidad del modelo matemático anterior hace que el aparato conceptual que lo sustenta no resulte operativo. En efecto, suponer un modelo a base de ecuaciones diferenciaes implica lo siguiente:

a) Disponer de informaciones acerca del comportamiento de los aspectos físicos, químicos, biológicos, etc. del medio estudiado.

b) Conocer las leyes básicas de esos comportamientos.

c) Poseer las herramientas necesarias para representarlos matemáticamente de diversos modos.

d) Seleccionar un modo concreto de representación.

e) Disponer de las técnicas de análisis y resolución de las ecuaciones formuladas.

Cualquiera de las etapas a)-e) constituye un campo suficiente de investigación. Aquí nos concentraremos en los aspectos matemáticos del problema.

El primer escalón en cualquier intento de modelizar la calidad de unas aguas consiste en el estudio y cálculo de los movimientos en esa masa de agua. Efectivamente, esos movimientos, de diferentes escalas, son responsables de procesos de mezcla y transporte que influyen en la calidad final. Las ecuaciones de la hidrodinámica, básicamente las de conservación de la masa y las de conservación de la cantidad de movimiento, son la formulacion adecuada para este menester. Este conjunto de ecuaciones es tridimensional, aunque en la práctica, por los ajustes de escala, integrando en la variable z se transforma en bidimensional. En muchos casos una ulterior integración en alguna de las otras variables espaciales deja el problema en uno unidimensional.

Actualmente se dedica mucho esfuerzo al estudio de los modelos tridimensionales. Mientras que los bidimensionales se hallan muy estudiados y refinados en sus aspectos teóricos y computacionales, en una dimensión más los problemas de escala son tan complejos que han impedido hasta ahora esos estudios. La generación y disipación de fenómenos en vertical, por comparación con los horizontales, tiene lugar a varios órdenes de magnitud menos. Este comportamiento es del tipo de la ecuaciones *stiff*, un tema clásico de ecuaciones diferenciales. Por tanto, los modelos que incorporen ambas características deberán ajustar mucho más los órdenes de magnitud en los errores permitidos. En cierto modo los fenómenos en vertical, si no se consideran como "ruido estadístico" por comparación con los horizontales, sí pueden ser considerados como un ejemplo de comportamiento caótico que se superpone a la pauta horizontal dominante. Esta vía de estudio, en cierto modo similar a la teoría de Burger de la turbulencia, aún no ha sido explotada y puede resultar interesante en el futuro.

Además de la dimensión, otra característica es la linealidad o no de las ecuaciones utilizadas. Desde el origen del cálculo diferencial, su principal aplicación consiste en sustituir fenómenos complejos por sus aproximaciones lineales (desarrollos de Taylor de orden 1). El comportamiento cualitativo de las ecuaciones lineales es relativamente simple y directo, cosa que no ocurre en el caso no lineal, que es más complicado en su análisis tanto teórico como numérico. Esto explica el éxito de las aproximaciones lineales en los desarrollos científicos y técnicos en Oceanografía.

La Hidrodinámica es la base para los modelos de transporte. Para cada parámetro P_j se plantea una ecuación del tipo advección-difusión, que en esencia es no lineal, pero que por parametrización adecuada de los coeficientes de difusión K_k se transforma en lineal:

$$\partial P_j/\partial t = V.\nabla P_j + \sum \partial(K_k \partial P_j/\partial x_k)/\partial x_k$$

donde la V es el campo de velocidades calculado en el modelo hidrodinámico . Al variar j la ecuación anterior representa una familia de ecuaciones que se resuelven independientemente.

Muchas veces, el concepto de calidad de agua termina por definirse al finalizar la aplicación del modelo de transporte. En realidad, *es aquí donde debe comenzar a hablarse de tal concepto.* La interacción entre las P_j es precisamente la esencia de las modificaciones en esa calidad, y estas interacciones, por comodidad y sencillez, es tradicional tratarlas a una escala espacial menor. Un ejemplo típico es un sistema de depuración de aguas. La formulación habitual es un sistema de ecuaciones ordinarias del tipo

$$P_j' = f_j(t, P)$$

siendo muy populares en las aplicaciones los modelos predador-presa del tipo Volterra-Lotka en sus múltiples variantes. Por lo general, la dimensión de estos sistemas no excede de tres, y este límite parece obedecer al hecho de que ésta es la dimensión mínima necesaria para la presencia de atractores extraños que representan situaciones casi-periódicas ajustadas a las situaciones reales. El número de parámetros de control para el sistema es variable, oscila alrededor de 10 á 15, aunque, por sucesivas simplificaciones y relaciones entre ellos, se suele dejar en dos o tres. La identificación de estos parámetros es una tarea delicada y difícil.

Los resultados que provee el último modelo responden realmente al concepto de calidad de aguas, y podrían incorporarse en el marco de una modelización general como la sugerida por el diagrama siguiente:

Para finalizar este apartado, consideremos los diferentes tipos de modelos del diagrama anterior. Los de la parte superior resultan muchísimo más complejos que los de abajo, por tanto su formulación es más laxa: esto se debe a que engloban más fenómenos cuyas leyes de actuación e interacciones no son bien conocidas.

3. Una categoría de modelos sencillos.

En el diagrama expuesto al final del apartado anterior hay diferentes formas de moverse. Una de ellas consiste en la consideración de fenómenos parciales que se modelizan separadamente, dando así ideas acerca de cómo actúan ciertos mecanismos, lo que puede servir de apoyo en la comprensión del fenómeno global. Aquí vamos a exponer unos modelos basados en la aplicación de propiedades de los procesos estocásticos aplicados al concepto de calidad de aguas.

3.1. El problema del primer tiempo de paso.

Una de las cuestiones más interesantes, por lo fácil que es de detectar, es la contaminación estética de las aguas. Cuando se produce un vertido, la mancha que origina es el primer signo de contaminación, independientemente de si ésta es peligrosa o no.

Un modo de tratar este problema, que puede traducirse fácilmente en la redacción de una normativa legal, consiste en utilizar la idea de proceso estocástico, como sigue.

La base del modelo es suponer que en lugar de tratar el vertido en su conjunto, vamos a seguir el destino de una única partícula, incluyendo en los coeficientes del modelo las interacciones inherentes al hecho de que la partícula no se halla aislada. Además, por consideraciones de tipo físico, se supone que una vez alcanzada cierta profundidad (parte superior de la termoclina, p.ej.) la partícula desaparece del sistema oceánico y deja de ser perniciosa. La cantidad que se usa en la modelización es la probabilidad condicional de hallar la partícula en la profundidad s en el tiempo t, habiendo partido de la profundidad x en el tiempo 0, esto es,

$$\mathfrak{P} = prob(s,t/x,0)$$

Esta probabilidad satisface la llamada *ecuación de Fokker-Planck del pasado*,, que es formalmente análoga a una de advección-difusión:

$$\partial\mathfrak{P}/\partial t = (B/2)\partial^2\mathfrak{P}/\partial x^2 + A\partial\mathfrak{P}/\partial x$$

siendo A y B los coeficientes de *deriva* y *difusión*, respectivamente. Esta ecuación se resuelve con una condición inicial:

$$prob(s,0/x,0) = \delta(x-s)$$

y con una condición de contorno *reflectante* en la superficie del agua ($x = 0$) y otra *absorbente* en la profundidad b que se haya seleccionado.

Se aplica la teoría de los procesos estocásticos, suponiendo homogeneidad por consideraciones físicas, y se obtiene que *el tiempo medio de salida de la partícula por el extremo* b *del intervalo* $[0,b]$ *está regido por el siguiente problema de contorno para la variable* t_s:

$$(B/2)t_s'' + At_s = -1$$
$$t_s(b) = 0$$
$$t_s(0) = 0$$

donde A se interpreta como la velocidad vertical de caída (una medida de la interacción geométrica partícula-ambiente) más el gradiente vertical de turbulencia, y B es el coeficiente de difusión turbulenta. Este problema se resuelve sin dificultad por un esquema en diferencias finitas que se acopla bien a las variaciones verticales de las cantidades de interés. Los experimentos numéricos producen resultados como los que se muestran en la gráfica siguiente:

3.2. Extensión a dimensión 2.

El problema anterior tiene una extensión natural a dimensión 2 cuya interpretación es inmediata en el campo de la contamianción marina y los modelos que tratan de representarla. Aquí el trabajo se lleva a cabo en un recinto Ω bidimensionalcuya frontera Γ se descompone en dos partes Γ y Γ', de modo que $\Omega = \Gamma \cup \Gamma'$:

Los problemas que se plantean son los siguientes:

1. Tiempo medio de salida de una partícula por la parte absorbente de la frontera, Γ'.

2. Hallar la probabilidad de que la salida tenga lugar por una parte $\Gamma'' \subseteq \Gamma'$ predeterminada.

3. Determinación de las zonas $\Gamma' \subseteq \Gamma$ adecuadas a la resolución de los problemas anteriores.

Desde el punto de vista de las aplicaciones, los problemas anteriores modelizan cuestiones relacionadas con las que se exponen a continuación:

"Determinar la localización óptima de un vertido en una zona marítima para que:

1. El tiempo medio de salida por la zona Γ' sea mínimo (o máximo, o se mantenga dentro de uno márgenes). Aquí Γ' representará una area costera proxima al lugar del vertido.

2. La probabilidad de salida por la zona Γ' sea la menor posible, y,

3. Establecer las condiciones de contorno adecuadas a cada caso practico que se presente."

No es difícil probar que la ecuación que debe resolverse es, para el tiempo de salida t_s, la analoga a la del caso anterior, que aquí es un problema elíptico bidimensional:

$$\Sigma(A_i \partial t_s/\partial x_i) + 2\Sigma(B_{ij}\partial^2 t_s/\partial x_i \partial x_j) = -1$$
$$t_s = 0 \text{ en } \Gamma'$$
$$\text{otras condiciones en } \Gamma-\Gamma'$$

En el momento presente nos encontramos planteando los experimentos numéricos para este tipo de modelos con diferentes valores de A_i y de B_{ij}. En particular, A_i representa el campo de velocidades junto con el gradiente horizontal de la turbulencia, y puede servir para decidir qué zonas Γ' son las adecuadas. El tensor de difusión B_{ij}, por razones de carácter físico, queda relativamente bien modelizado por

$$B_{ij} = K\delta_{ij}$$

con lo cual la ecuación anterior se simplifica notablemente, dando:

$$A_1(\partial t_s/\partial x_1) + A_2(\partial t_s/\partial x_2) + 2K\nabla^2 t_s = -1$$

Para recintos sencillos Ω se puede plantear un esquema en diferencias finitas, aunque la existencia en la realidad de situaciones complejas parece aconsejar la utilización de elementos finitos como técnica de resolución.

El problema para la probabilidad de salida por una zona concreta $\Gamma''\subseteq\Gamma'$ se resueve teóricamente de igual manera, En este momento nos hallamos estableciendo las condiciones matemáticas para la ecuación de Fokker-Planck correspondiente. A primera vista, este problema es mucho más interesante como punto de partida en la redacción de normativas legales en materia de contaminación del medio marino.

Todos estos modelos proveen aproximaciones a aspectos parciales de problemas globales, quedando aún abierta al estudioso la manera de establecer las conexiones para el desarrollo de modelos generales.

4. Conclusiones.

En el presente trabajo se lleva a cabo una revisión del concepto de calidad de aguas y de las distintas formas de estudiar su evolución mediante modelos matemáticos. Se establece que el problema citado es central en el ámbito de los modelos que intentan reflejar la realidad para su mejor comprensión, predicción y control. También se explican las pautas generales de un proceso de modelización de calidad de aguas, y finalmente, se establece la necesidad de recurrir a la elaboración de modelos simples que estudien aspectos relevantes, aunque parciales, utilizando para ello las técnicas matemáticas que se juzguen oportunas.

En los modelos que se proponen se usa la teoría de los procesos estocásticos para establecer unas ecuaciones, de Fokker-Planck, que son formalmente iguales a las de advección difusión habitualmente empleadas en los modelos de dilución al uso, pero que aquí se emplean para el cálculo de las probabildades de sucesos de interés, como,la aparición de contaminación en una playa en función de las condiciones de un vertido y del ambiente marino. Por tanto, estos modelos, al formular sus resultados en forma probabilística rsultan más flexibles en su interpretación y aplicación para el gestor ambiental, por lo cual se recoiendan en el problema de la calidad de aguas como elemento en la toma de decisiones.

5.Referencias y Bibliografía.

1. Fernández, I. (1988) "Tesis Doctoral", Facultad de Ciencias del Mar, Las Palmas de Gran Canaria.

2. Gardiner, C.W. (1983) "A handbook of stochastic methods", Springer, Berlin.

3. Pacheco, J. y Fernández, I (1988) "Modelling and computing settling times for suspended particles in the ocean", en Schrefler y Zienkiewicz (eds), *Computer modelling in Ocean Engineering*, (369-375), A.A. Balkema, Rotterdam.

4. Rodríguez, C. , Pacheco, J.(1988) "Un modelo matemático para la estimación del tamaño de manchas en el océano" *Jornadas Hispano-Lusas de Matemáticas*, Valladolid (en prensa).

5 Rodríguez,C., Pacheco,J., Padilla, I., Fernández, I. (1989) "Algunas aplicaciones del primer tiempo de paso a problemas marinos". *Jornadas Hispano-Lusas de Matemáticas*, Puerto de la Cruz, Tenerife. (en prensa).

6. Serra et al. (1986) "Physics of complex systems", Pergamon, Oxford.