

**RLA/7/019 :Developing Indicators to
Determine the Effect of Pesticides, Heavy
Metals and Emerging Contaminants on
Continental Aquatic Ecosystems Important to
Agriculture and Agroindustry (ARCAL
CXXXIX),**



Primera reunión de coordinación

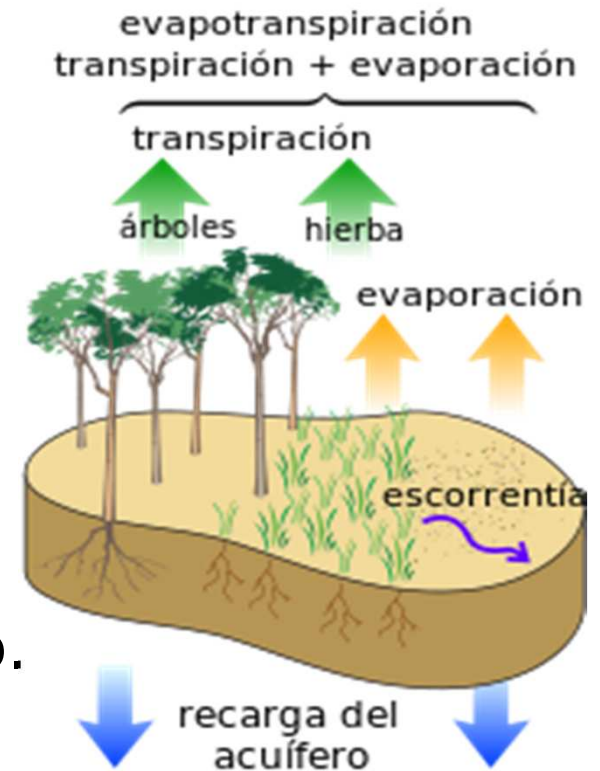
San José, Costa Rica, 24-28 de febrero 2014

Conceptos teóricos básicos sobre modelaje, ejemplos y aplicación en el proyecto RLA/7/019

Ana Cecilia Dufilho

Contenido

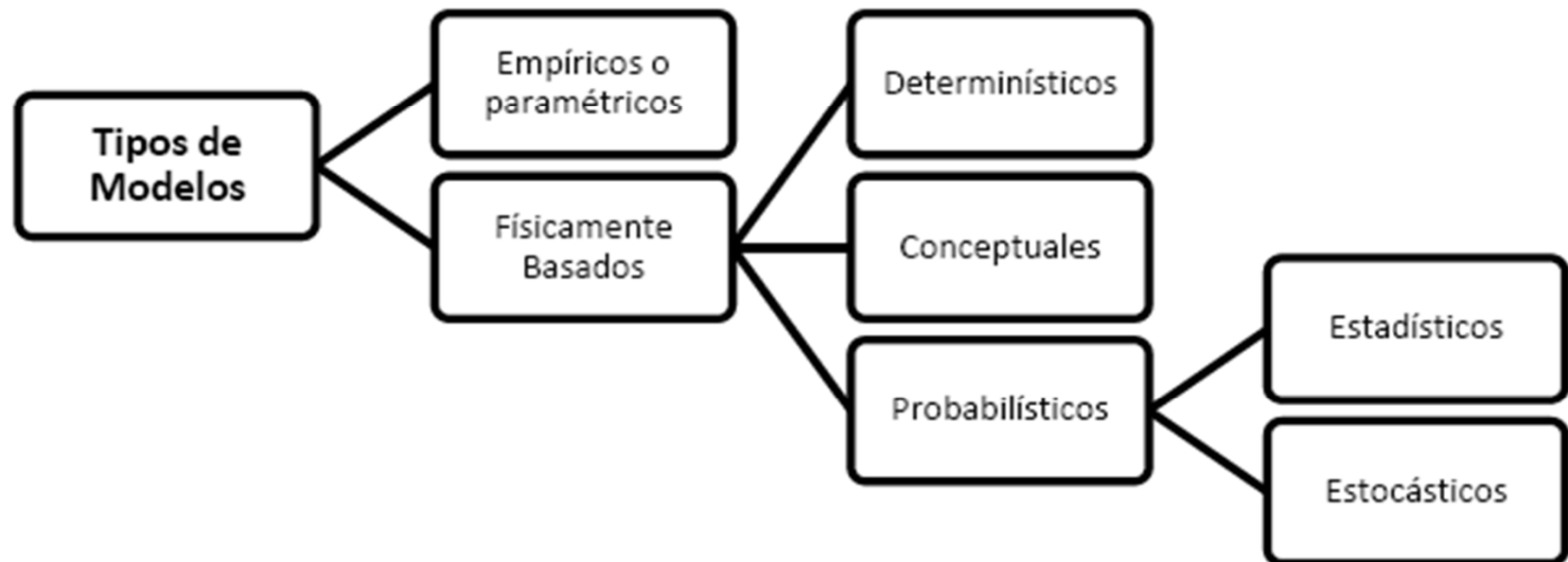
- Introducción
- Modelos
 - Definición, datos, procedimiento.
 - Ecuaciones.
 - Resolución.
- Programas gratuitos (software) para modelar
- Bibliografía básica



Clasificación de modelos

Los modelos se pueden clasificar de acuerdo a sus características distintivas, como son: a) tipo, b) comportamiento en el tiempo, y c) ámbito de aplicación,

Figura 1.16: Tipos de modelos bajo situación climática estacionaria



Adaptada: (Ponce, 1989; Debels & Ecurra, 2010; Xu, 1999; Sharma, 2009)

Empiricos

- Ensayos y mediciones de campo
 - Análisis de regresión
 - Multivariado

Modelación en el estudio del agua y sustancias

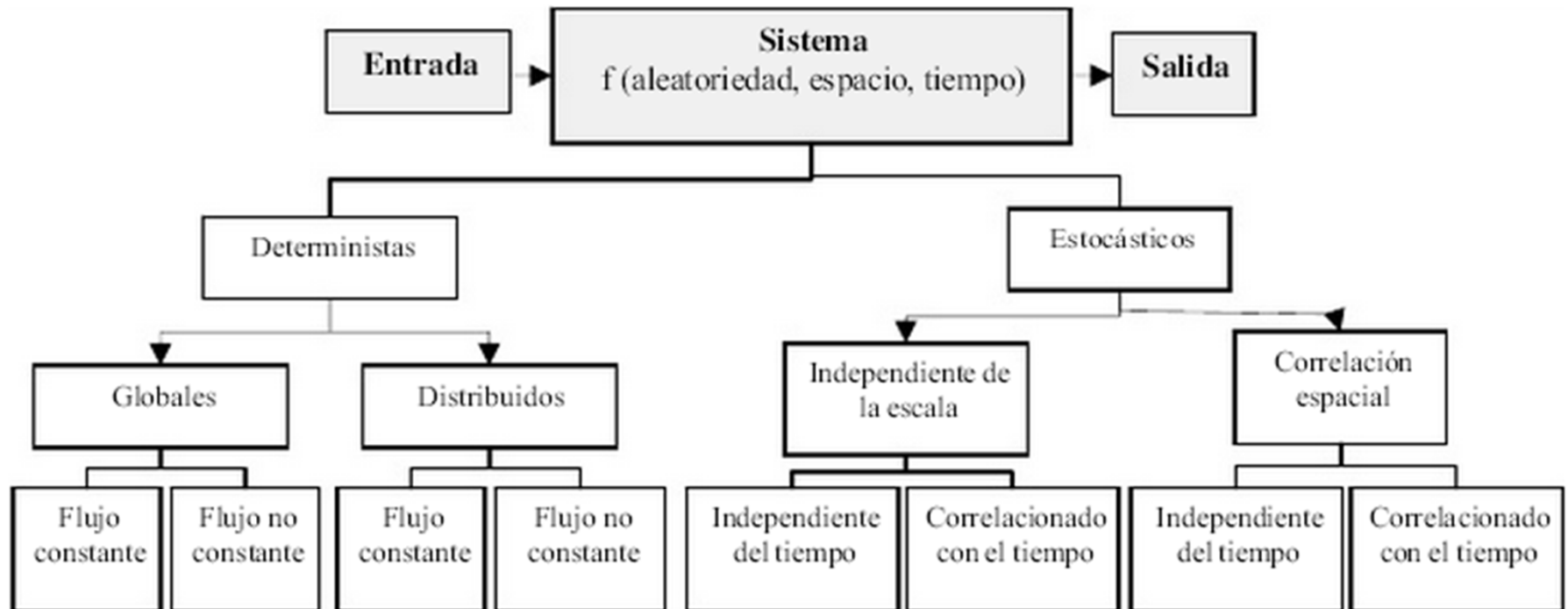


Figura 2. Taxonomía de los modelos hidrológicos

Fuente: Chow *et al.* (1988).

Y tambien:

Según el ámbito Modelos de hidrología urbana vs. modelos de cuencas

Según como resuelven las ecuaciones de flujo Analíticos vs. Numéricos

En evaluación del Riesgo los resultados del modelo (variable en estudio) es Predicted Environmental Concentration (PEC) o Concentración Ambiental Esperada (CAE)

Aproximaciones al estudio de procesos

Ejemplo: proceso de Infiltración

- Mediante la integración numérica de la ecuación de Richards (mayor rigor)
- Formulas empíricas
 - Ecuación de Horton
- Experimentalmente
 - Lisímetros
 - Infiltrómetros, miden la capacidad del suelo para infiltrar.
- Concentración de cloruros, se supone que el acuífero no aporta cloruros, y los que existen proceden de la infiltración del agua de lluvia.

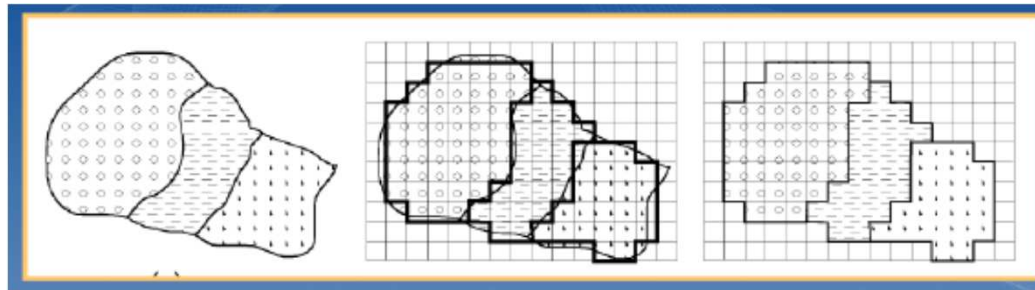
$$C \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right) \right) - \sum S_i$$

$$fp = fc + (fo - fc)e^{-kt}$$

$$I = \frac{[Cl]_p}{[Cl]_{as}}$$

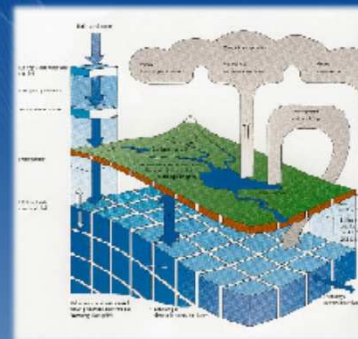
Conceptos

- **Modelo Matemático** Representación simplificada del sistema que simula las relaciones dando las respuestas ante las solicitudes



- Es el procedimiento (matemático) que permite realizar la simulación de su comportamiento.

- Un modelo será más representativo del sistema real cuando sea capaz de reproducir más fielmente su comportamiento:
 - el **estado** del sistema,
 - las **acciones** que se ejercen sobre él
 - y las **leyes** que los relacionan

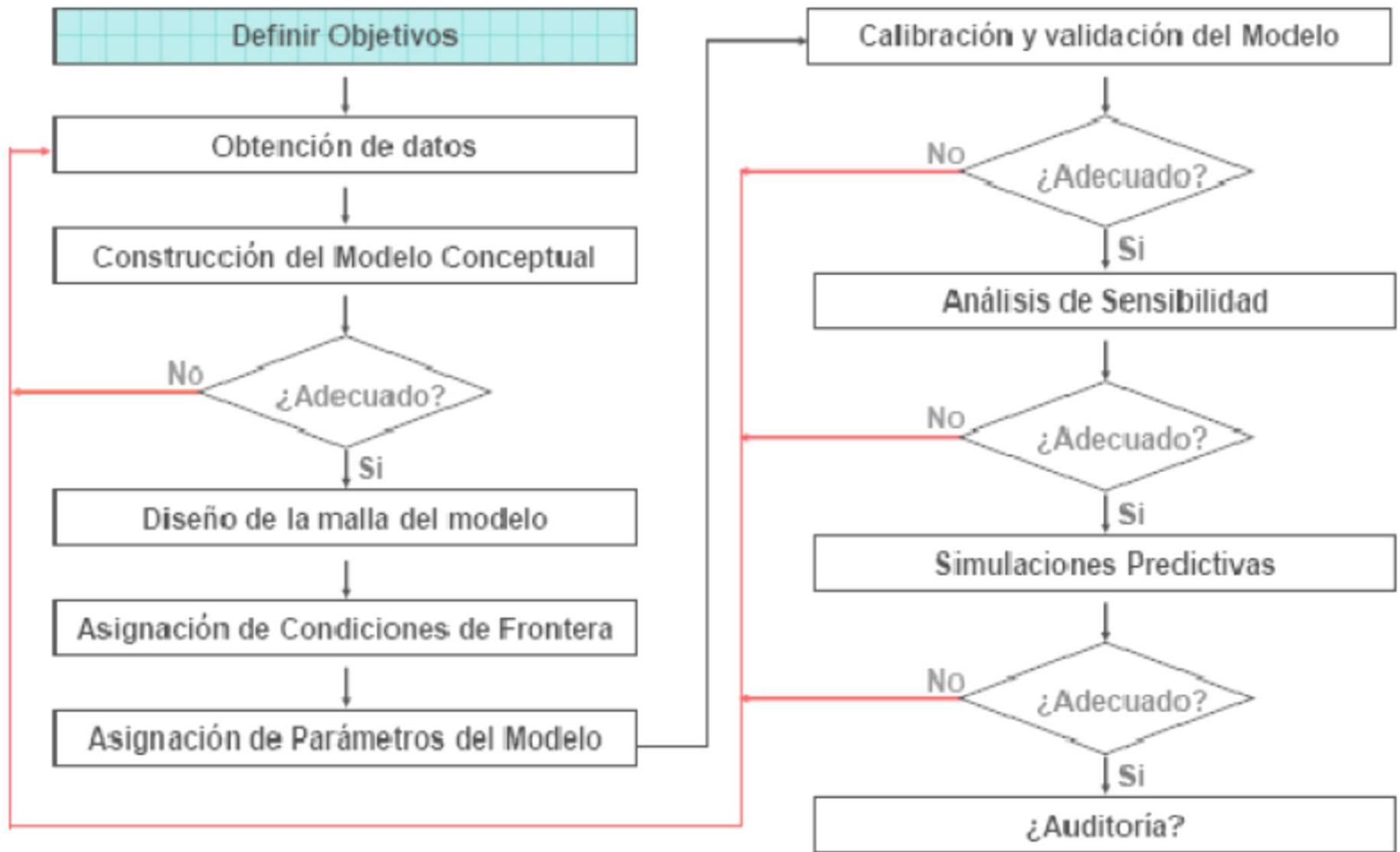


- Los modelos empíricos son aquellos que predicen cómo una variable afecta una respuesta y no por qué la afecta, por lo que no se logra entender la totalidad de un sistema, además de que puede tener menor capacidad predictiva. Se determinan a través de técnicas de regresión y correlación. Modelo de Vollenweider, Curva Número,
- El modelo físico o teórico se basa en una teoría, será correcto siempre y cuando la teoría lo sea y sólo para el ámbito de condiciones para el cual ella sea propuesta.
- Modelo conceptual se puede concebir como una idea, una representación simplificada acerca de cómo funciona un sistema. Estas representaciones pueden materializarse tanto en la forma de formulaciones matemáticas, analogías o en artefactos materiales. Son una representación simplificada de objetos, fenómenos o situaciones reales y no necesitan de una teoría que los expliquen. Se describe con diagramas que muestran los procesos, sistemas mayores y las relaciones cualitativas– cuantitativas entre las entidades.

Modelos determinísticos se les puede definir como aquellos que se aplican a problemas en los que hay un solo estado de la naturaleza, y dónde variables, limitaciones y alternativas son, después de que se aceptan los supuestos, conocidos, definibles, finitos y predecibles con confianza estadística. Algunos modelos, herramientas o técnicas determinísticas son: programación lineal, análisis de Markov,

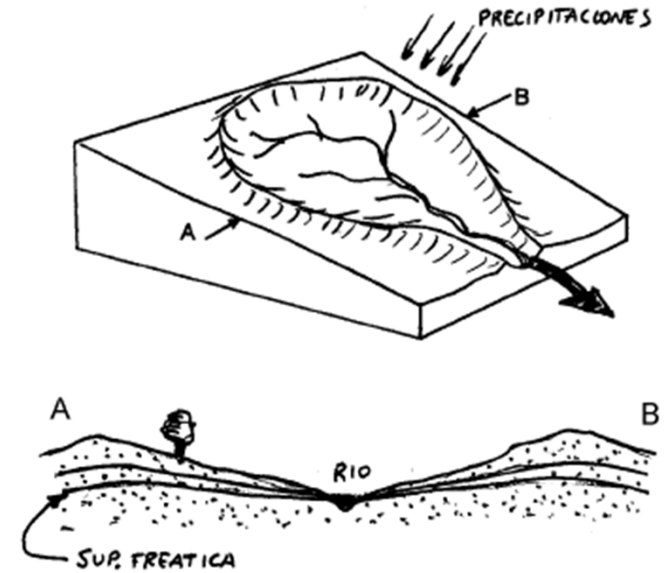
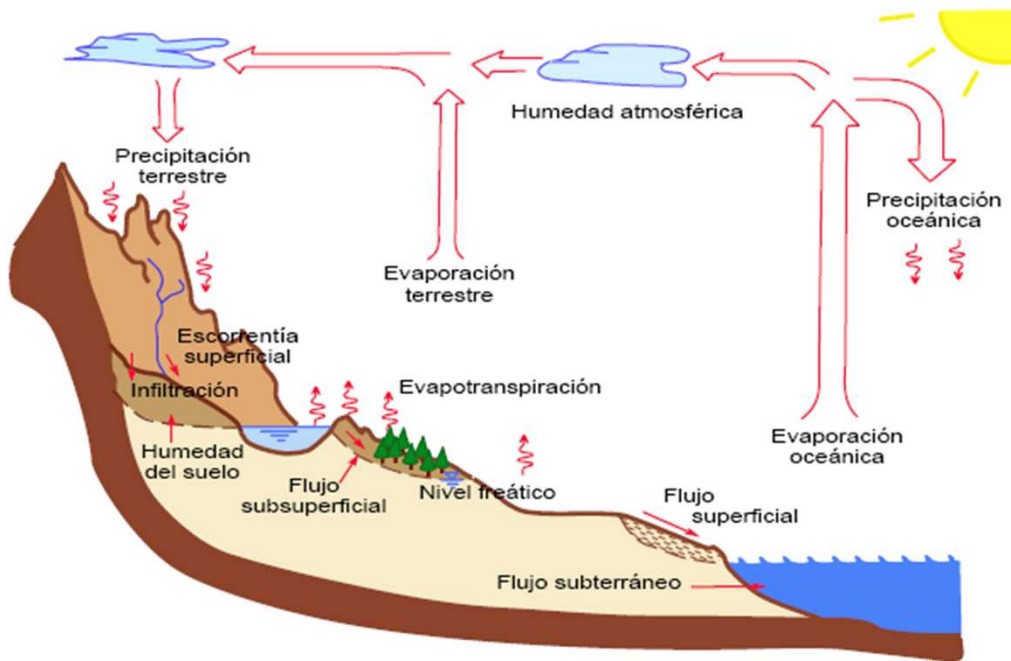
Los modelos estocásticos contienen elementos aleatorios distribuidos dentro del modelo; de tal manera que predicen el valor previsto o una cantidad en términos de probabilidad de ocurrencia; también se les puede definir como aquellos modelos cuantitativos en los que hay más de un estado de la naturaleza y donde cada estado debe estimarse o definirse para permitir el cálculo de los resultados condicionales de cada alternativa de decisión en cada estado; cuando riesgo e incertidumbre están implicados en el problema de decisión, se emplean los modelos probabilísticos cuantitativos (Krone, 1980; López, 2001).

Pasos básicos en la modelación matemática

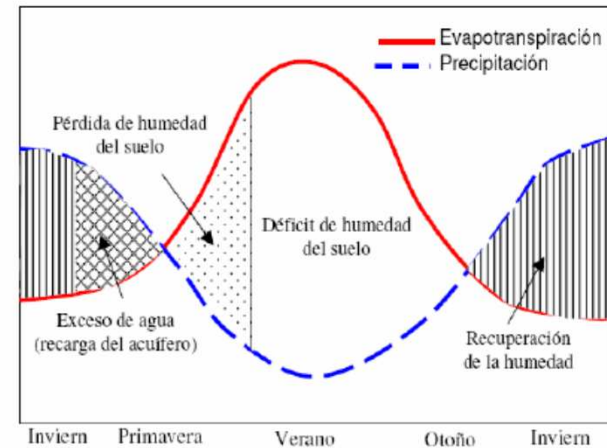


Tomado de Anderson & Woessner (1982)

Objetivos de estudio



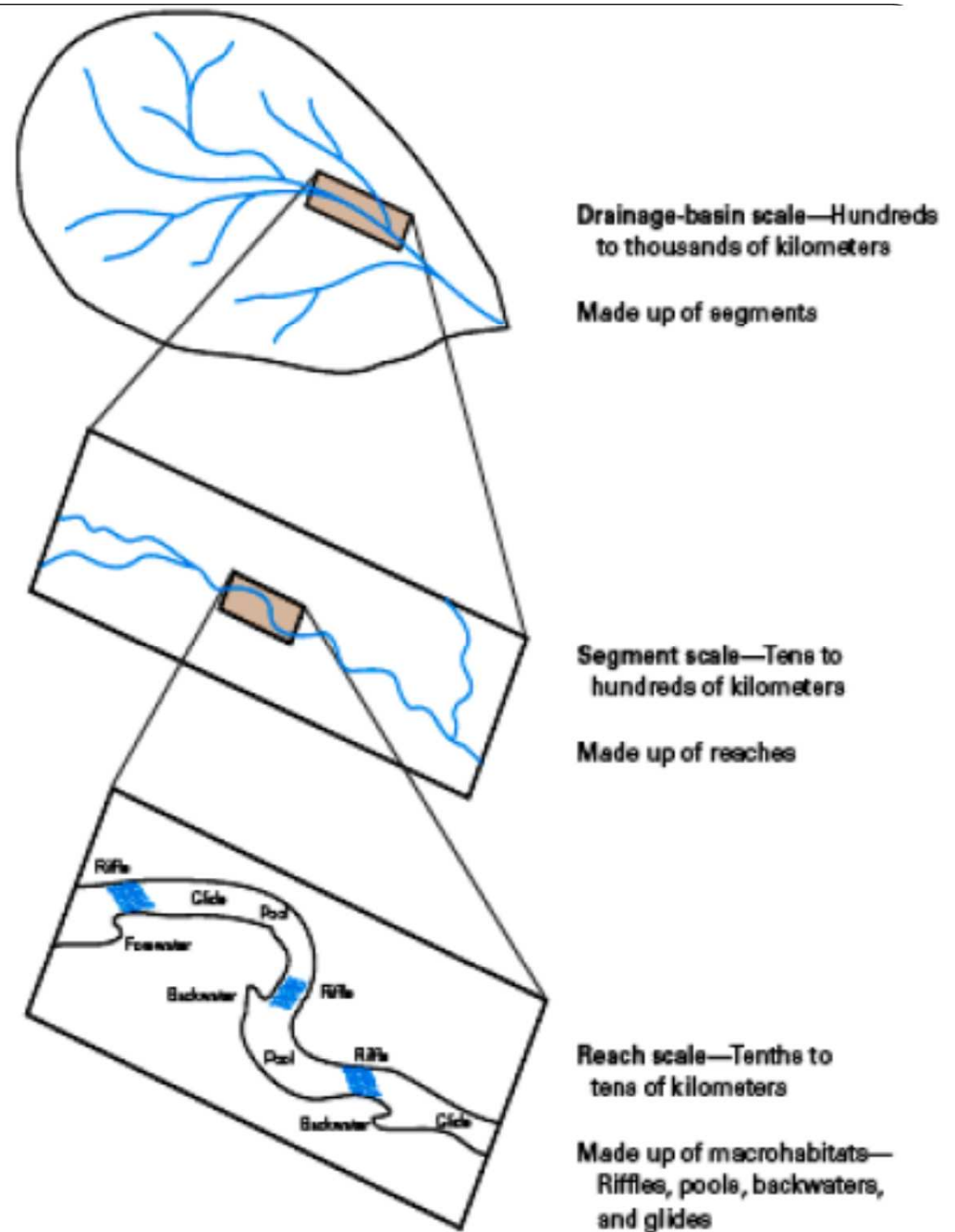
Balance hídrico



ESCALAS Y PROCESOS

Figure 3. Scales of processes that link land use to stream habitat. Land use at the scale of drainage basins determines runoff and sediment transmitted through the drainage network. Segments are parts of the drainage network between substantial tributaries and are characterized by two or more repeating macrohabitats and relatively uniform channel pattern. Macrohabitats are repeating parts of the stream channel within which depth, velocity, and substrate are uniform. Macrohabitats are bounded by sharp gradients of depth, velocity, and substrate in transition to adjacent macrohabitats. Effects of land-use change on habitat are typically measured at the reach scale in terms of changes to macrohabitats.

**Las escalas dependerán
del objeto del estudio,
del alcance, del tiempo,
del presupuesto.
Los procesos estudiados
dependen de la escala**



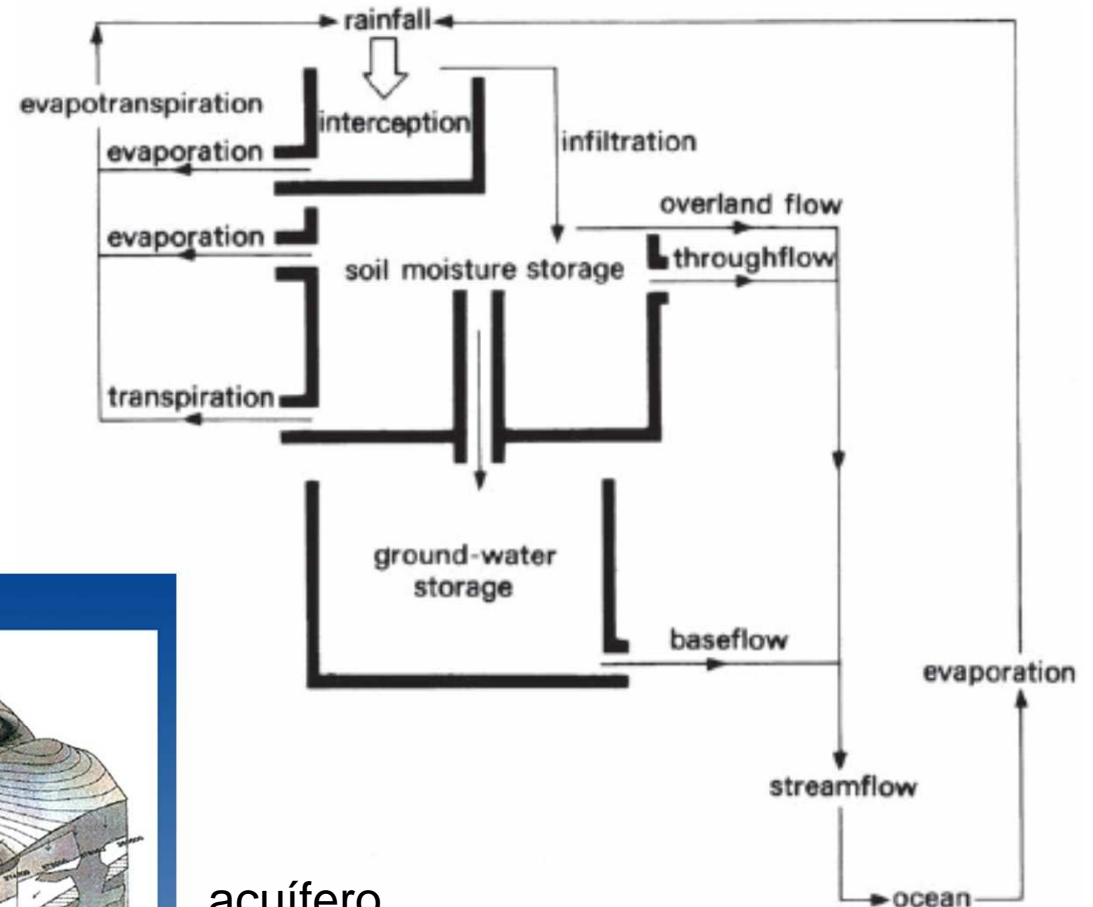
ESCALAS Y PROCESOS

Ejemplo: Procesos implicados en el vertido al mar a través de emisario submarino

Fase	Fenómeno	Escala de longitud (m)	Escala de tiempo (s)
(1)	Mezcla turbulenta inicial (ascenso del chorro desde el difusor en un fluido estratificado).	$< 10^2$	$< 10^3$
(2)	Establecimiento del campo residual o nube, moviéndose con la corriente media; extensión lateral por gravedad.	10^1-10^3	10^2-10^3
(3)	Difusión lateral y/o dispersión.	10^2-10^4	10^3-10^5
(4)	Convección por corrientes	10^3-10^5	10^3-10^6
(5)	Transporte a larga escala (convección integrada sobre numerosos ciclos de marea); sedimentación.	10^4-10^6	10^6-10^8

Desarrollo de modelo conceptual

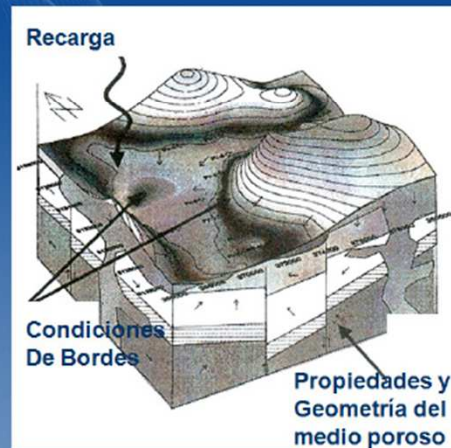
ciclo hidrológico en la
cuenca – esquema de
procesos



acuífero

***Es el paso más importante
en la aplicación de modelos
numéricos***

- Distribución de las capas de interés hidrogeológico
- 1D, 2D, 3D
- Ubicación de los borde
- Tipo de condición de borde
- Valores de los parámetros de entrada
- etc. ...

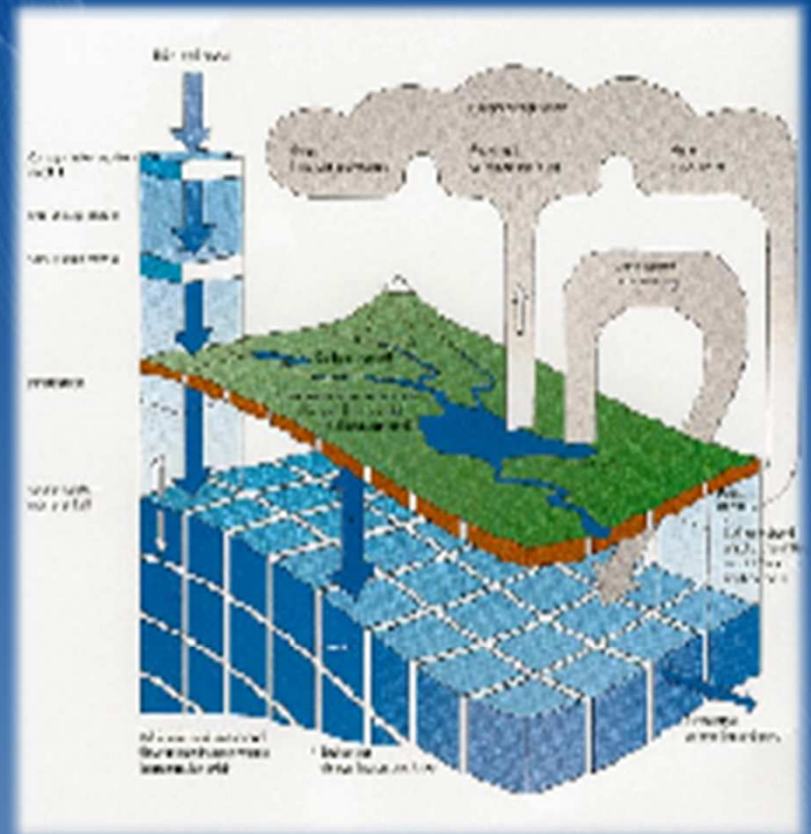


La selección de un modelo apropiado depende de

- El/los **objetivo/s** de la investigación, que condicionará entre otros: la **escala espacial y temporal**; y
- Los **recursos disponibles**: información básica, tiempo, presupuesto, personal especializado, computadoras y programas (códigos o software).

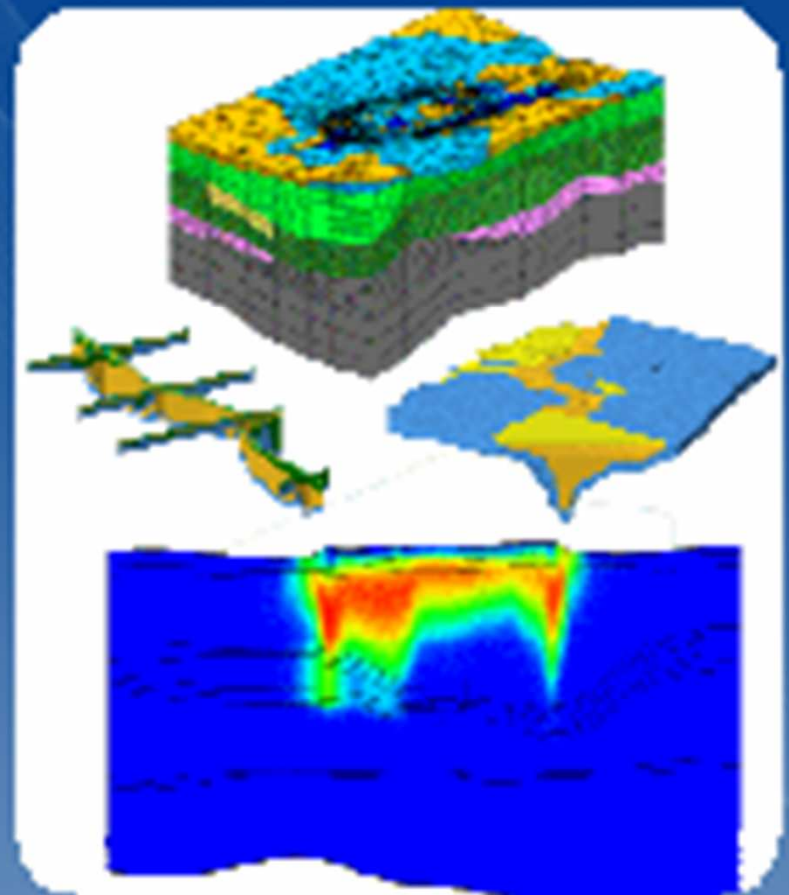


- Un modelo será más representativo del sistema real cuando sea capaz de reproducir más fielmente su comportamiento:
 - el estado del sistema,
 - las acciones que se ejercen sobre él
 - y las leyes que los relacionan



*"Todo intento de modelación
implica un gran esfuerzo en la
conceptualización e integración
de la información disponible ...
... La parte más importante del
procedimiento de modelación
es el completo entendimiento
del sistema, y los procesos que
tienen lugar en él.*

J. Samper, 1994



Procesos de transporte de sustancias y su expresión matemática

ríos

El destino de los contaminantes en los sistemas acuáticos depende de:

1. Tipo y clase de fuente de contaminación
2. Transporte de sustancias a través de los elementos del ciclo hidrológico
3. La transformación química, biológica o bioquímica de las sustancias

Vertido permanente o no, puntual o difuso

Varios tipos de corrientes

→ distinta magnitud procesos de mezcla

Procesos físicos:

advección – dispersión – difusión

Procesos químicos:

reacciones → Sustancias conservativas o



Ecuación general del transporte

$$\frac{dC}{dt} = - \left[v_x \left(\frac{dC}{dx} \right) + v_y \left(\frac{dC}{dy} \right) + v_z \left(\frac{dC}{dz} \right) \right] + \left[D_x \frac{d^2 C}{dx^2} + D_y \frac{d^2 C}{dy^2} + D_z \frac{d^2 C}{dz^2} \right] \pm \sum r_m$$

Transporte advectivo: entrada o salida de contaminante en el volumen de control debido a la velocidad de la corriente.

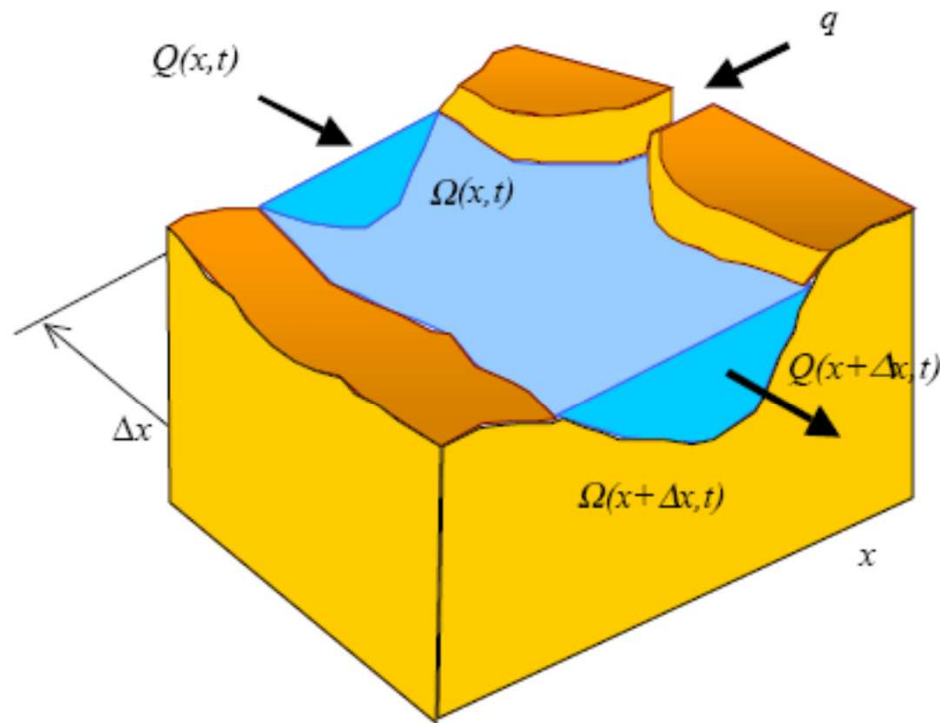
Transporte dispersivo: entradas y salidas debido a difusión y dispersión turbulenta e hidrodinámica en el volumen de control. Ley de Fick

Reacciones: producen variación de masa en el volumen de control

a.- reacciones internas: que producen pérdidas (asimilación biológica) o ganancia (nitrificación)

b.- fuentes externas: aportes (vertidos) o detracciones (sumidero) de sustancias

En una dimensión



$$\frac{dC}{dt} = -v^* \frac{dC}{dx} + \frac{d}{dx} \left(D^* \frac{dC}{dx} \right) + r$$

Figura 3.2.1 Volumen de control para balance de masa unidimensional

Se puede escribir esta ecuación para cada sustancia presente en el tramo y se obtiene un sistema de ecuaciones diferenciales que son el modelo matemático de los procesos actuantes.

Balance de OD en una corriente fluvial

El contenido de **oxígeno disuelto (OD)** es uno de los parámetros relevantes de calidad del agua y de salud del ecosistema .

El balance de masas resulta de los siguientes procesos:

Egresos

- Oxidación bioquímica del material de desecho carbonáceo.

- Oxidación del material de desecho nitrogenado.

- Demanda de oxígeno de sedimentos del curso de agua.

- Uso de oxígeno para la respiración de plantas acuáticas.

Ingresos

- Reaireación desde la atmósfera

- Producción de oxígeno por el proceso de fotosíntesis

- Aporte de tributarios o efluentes

Período más crítico: caudales más bajos y las temperaturas mas elevadas.

Caudales bajos hay menor velocidad y turbulencia y mayor temperatura que disminuye la solubilidad del oxígeno en agua, lo que afecta negativamente a la reaireación.

Mayor temperatura aumenta la tasa de oxidación microbiológica.

En una dimensión

$$\frac{dOD}{dt} = \kappa_a(OD_s - OD) + (\alpha_3\mu - \alpha_4\rho)A - \kappa_d DBO - \kappa_{bt} / A_x - \alpha_5\beta_1 N_1 - \alpha_6\beta_2 N_2$$

- A : concentración de biomasa algal
- α_3 : tasa de producción de oxígeno por unidad de masa de algas (por ejemplo, fotosíntesis)
- α_4 : tasa de captación de oxígeno por unidad de masa algal respirada (por ejemplo, respiración)
- α_5 : tasa de captación de oxígeno por unidad de oxidación de amoníaco
- α_6 : tasa de captación de oxígeno por unidad de oxidación nitrógeno nitrato
- μ : tasa de crecimiento de algas
- ρ : tasa de respiración de algas, dependiente de la temperatura local
- κ_{bt} : tasa de captación béntica
- β_1 : tasa de oxidación biológica de NH_3 a NO_3
- β_2 : tasa de oxidación biológica de NO_2 a NO_3
- N_1, N_2 : concentraciones de amonio y nitrógeno nitrito, respectivamente
- A_x : área de la sección transversal

Soluciones aproximadas a la ecuación general

- Deben realizarse simplificaciones :
 - Cinéticas de tipo lineal
 - Geometrías sencillas (1D)
 - Caudal y nivel constantes
 - Vertidos ideales
- Por ejemplo
 - Ríos unidimensionales
 - Lagos completamente mezclados
 - Déficit de oxígeno para ríos (Streeter Phelps)

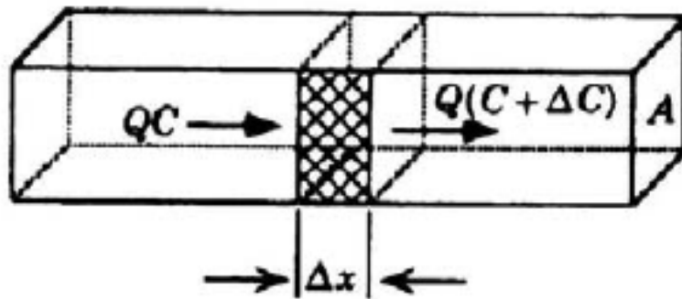
Sistema flujo pistón (PFS piston flow system)

Acumulación = Aportes – Salidas ± Reacciones

$$\frac{d(VC)}{dt} = QC - Q(C + \Delta C) \pm rV$$

Se puede reescribir

$$\frac{dC}{dt} = \frac{QC}{A\Delta x} - \frac{QC}{A\Delta x} - \frac{Q\Delta C}{A\Delta x} \pm r$$



En condiciones estacionarias, las propiedades no varían con el tiempo.

Solución

$$C = C_0 \exp(-kx / \bar{u})$$

C_0 : concentración en la fuente

\bar{u} : velocidad

x : distancia

Datos de campo: Grafico x/\bar{u} vs. $\ln(C/C_0) \rightarrow$ obtener k

C/C_0 : concentración relativa

Caso unidimensional estacionario sin reacciones

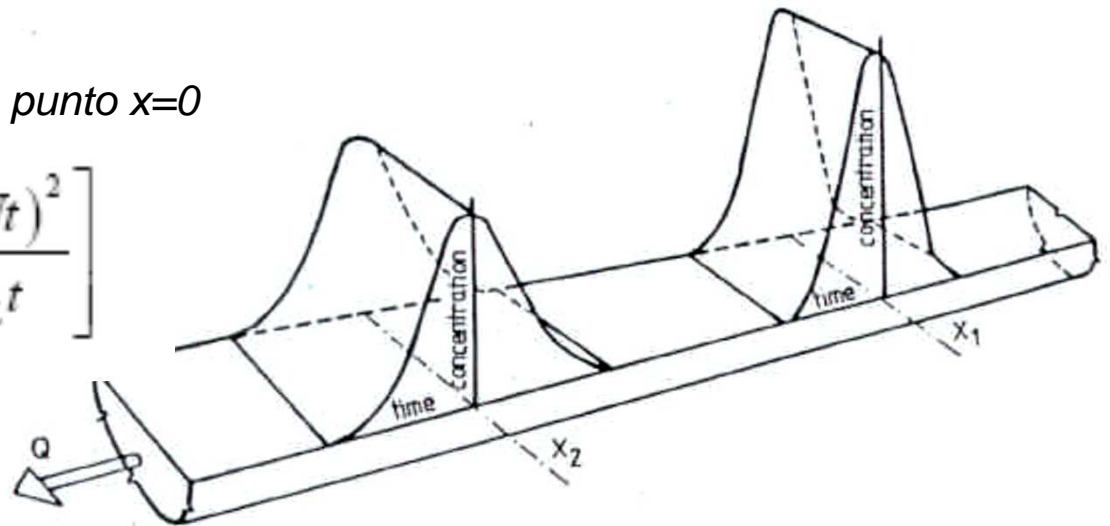
Supuestos:

- Proceso de transporte principal en dirección flujo.
- Se supone mezcla transversal completa en toda la sección.
- Velocidad U promedio de la sección.
- La sustancia es conservativa
- No hay intercambios con el medio
- Flujo uniforme U y DL constantes

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Condición inicial: vertido de Masa M en punto $x=0$

$$C(x,t) = \frac{M}{\Omega \sqrt{4\pi D_L t}} \exp \left[-\frac{(x-Ut)^2}{4D_L t} \right]$$



Propagación de un pulso. La superficie bajo la campana es constante

Concentración máxima a una distancia x de un derrame de masa M realizada en $X=0$

$$C_{\max}(x) = \frac{M}{\Omega \sqrt{4\pi D_L \frac{x}{U}}}$$

Caso unidimensional con reacciones

Mismos supuestos que caso anterior salvo reacciones

Reacciones = $k.C$ (decaimiento de primer orden)

$K [T^{-1}]$: tasa de decaimiento o constante de reacción (inverso de la constante tiempo de reacción).

$$C(x, t) = \frac{M}{\Omega \sqrt{4\pi D_L t}} \exp \left[-\frac{(x - Ut)^2}{4D_L t} - \kappa t \right]$$

- Si el contaminante es la DBO (que, en rigor, es un indicador de contaminación), el decaimiento se debe a descomposición bioquímica, y la constante de reacción $\kappa = \kappa_d$ varía, aproximadamente, en el rango $0,7 < \kappa_d < 1,7$ 1/día (es decir, la constante de tiempo de reacción va de 14 horas a 10 días).
- Cuando el contaminante es el amoníaco (NH_3), el decaimiento se debe al proceso de nitrificación, y la constante de reacción $\kappa = \kappa_n$ varía, aproximadamente, en el rango $0,1 < \kappa_n < 4,0$ 1/día (es decir, la constante de tiempo de reacción va de 6 horas a 4 días).
- Para el caso en que el contaminante son bacterias coliformes, el decaimiento se debe a la degradación bacteriana, y la constante de reacción $\kappa = \kappa_b$ varía, aproximadamente, en el rango $0,02 < \kappa_n < 1,0$ 1/hora (es decir, la constante de tiempo de reacción va de 1 a 50 horas).

Acuíferos

$$\frac{dC}{dt} = - \left[u_x \left(\frac{dC}{dx} \right) + u_y \left(\frac{dC}{dy} \right) + u_z \left(\frac{dC}{dz} \right) \right] + \left[D_x \frac{d^2 C}{dx^2} + D_y \frac{d^2 C}{dy^2} + D_z \frac{d^2 C}{dz^2} \right] - \frac{dS}{dt} \frac{\rho_b}{n} \pm \sum r_m$$

Ecuación del flujo y transporte de solutos

u	velocidad. (se obtiene por Darcy)
D	coeficiente de dispersión (se obtiene con trazadores o empíricamente)
p	densidad volumétrica
n	porosidad específica
r	reacciones químicas y biológicas

Contaminantes conservativos (y también los trazadores) se mueven por advección y dispersión. No sufren reacciones.

Sorción. Los mecanismos de sorción incluyen la adsorción, que es la atracción de un compuesto hacia una superficie sólida, y la absorción, que es la penetración de un contaminante en un sólido.

La sorción de un químico tiene un gran impacto en su degradación y depende de las propiedades del contaminante y del suelo.

Término reactivo: engloba las posibles reacciones en medio acuoso.

En materiales orgánicos: biodegradación, hidrólisis, reacciones Redox, y volatilización.

En metales: principalmente intercambio iónico y reacciones Redox.

Aproximación a la modelación de la degradación de sustancias

Primer orden

- Adsorción y desorción de plaguicidas, degradación biológica, degradación fotolítica, degradación química
- decaimiento radiactivo, degradación DBO son de primer orden

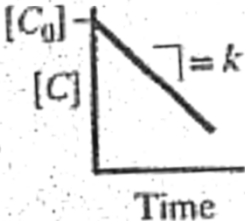
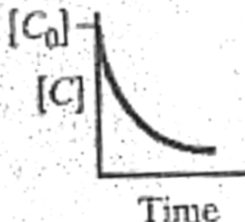
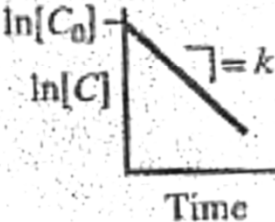
Reaction Order	Rate Law	Integrated Form of Rate Law	Plot of Conc. versus Time	Linearized Plot of Conc. versus Time	Half-Life $t_{1/2}$	Example Units of Rate Constant, k
Zero	$\frac{d[C]}{dt} = -k$	$[C] = [C_0] - kt$		Same as $[C]$ vs. time	$\frac{0.5[C_0]}{k}$	moles/L-s mg/L-s
First	$\frac{d[C]}{dt} = -k[C]$	$[C] = [C_0]e^{-kt}$			$\frac{0.693}{k}$	s ⁻¹ , min ⁻¹ , h ⁻¹ , day ⁻¹

Figure 3-4. Summary of zero and first-order rate expressions. Note the differences between each of these expressions.

Aproximación a la modelación del flujo con adsorción

Para procesos de adsorción se define **factor de retardo (R)** (adimensional)

$$R = 1 + K_d \frac{(1-n)\rho_s}{\theta} = 1 + K_d \frac{\rho_b}{n}$$

K_d = coef. de distribución o partición (mL/g)

ρ_b = densidad aparente del medio poroso

θ = contenido de humedad (= n en acuífero)

ρ_s = densidad media del sólido del acuífero
(generalmente 2.65 g/cm³)

n = porosidad

Asunciones: adsorción instantánea y condiciones de equilibrio

Es una medida del transporte atenuado por adsorción comparado con el transporte advectivo-dispersivo

$$R = \frac{V_a}{V_c} = \frac{X_a}{X_c} = \frac{T_a}{T_c}$$

V_a = velocidad del agua

V_c = velocidad contaminante

X = distancia

T = tiempo

R = 1 no hay retardo de las sustancias (cuando $K_d = 0$)

R > 1 hay procesos de retardo

La ecuación de transporte en 1D conservativa puede entonces ser reescrita:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{1}{R} \left[-u_x \frac{dC}{dx} + D_x \frac{d^2C}{dx^2} \right]$$

SOLUCIÓN ANALÍTICA



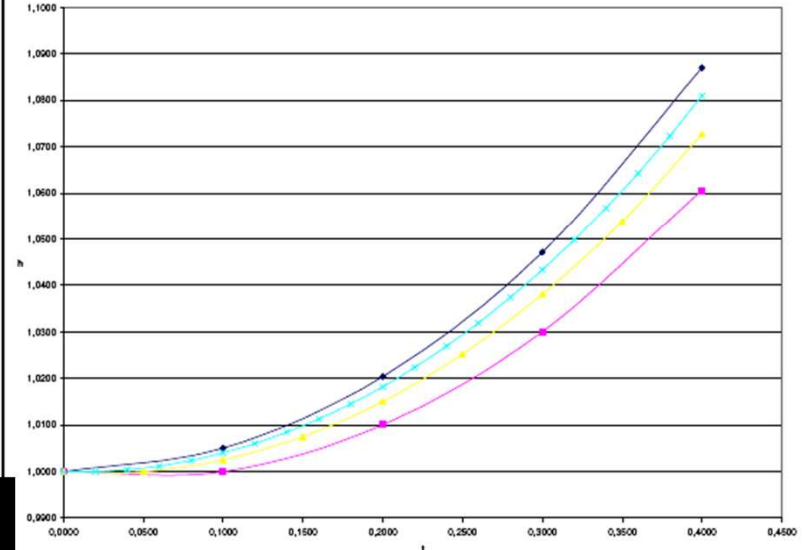
Para encontrar la solución analítica de la ecuación diferencial parcial (EDP) hay que integrarla.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_{xx} * \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_{yy} * \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(T_{zz} * \frac{\partial h}{\partial z} \right) \pm Q(x, y, z) = S * \frac{\partial h}{\partial t}$$

Encontrar la expresión analítica de $h(x, y, z, t)$ con la cual puedan calcularse los valores de h en cada punto del área y para cada tiempo.

Esto requiere definir los límites de integración!!!!

Caso contrario, se obtiene una familia de curvas $h(x, y, z, t)$ de las que cualquiera puede ser solución.



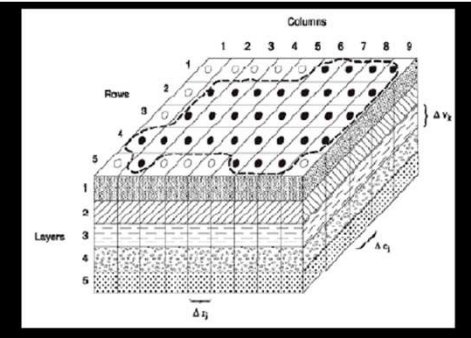
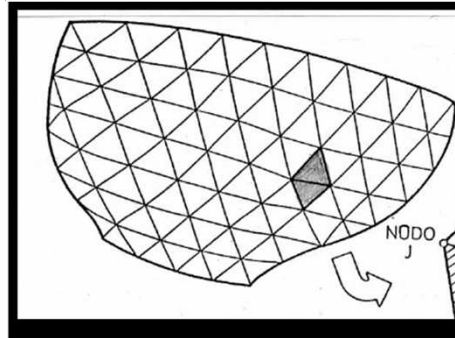
Sólo una de estas curvas será la solución para el dominio considerado y para el estado inicial del sistema.

Para encontrarla es necesario definir matemáticamente:

- los límites del dominio en estudio: **condiciones de contorno o de borde**
- el valor del estado inicial del sistema: **condiciones iniciales**

Modelos numéricos

- Cuando no es posible simplificar el sistema estudiado se recurre a modelación numérica.
- Métodos más utilizados:
 - Diferencias finitas
 - Elementos finitos



■ Condiciones iniciales:

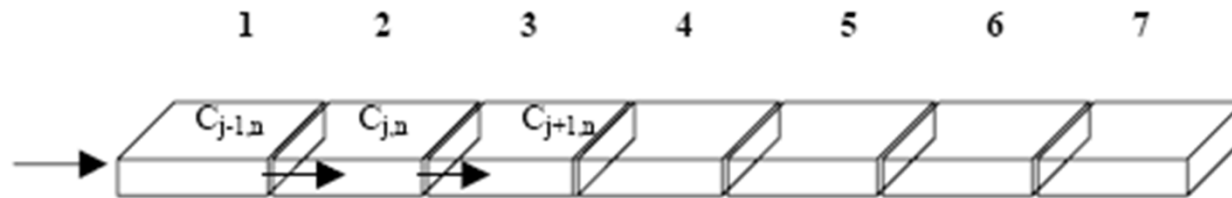
- Describen la distribución de los valores de las variables de estado (h_0 , C_0) para un tiempo inicial (donde comienza el proceso de cálculo, $t = 0$), en todos los puntos del dominio considerado.

■ Condiciones de borde:

- expresan la manera en que el dominio considerado interactúa con su ambiente externo.



Discretización del espacio y del tiempo



Mediante un esquema de cálculo *explícito* se representan las derivadas a partir de valores conocidos mediante alguna de las siguientes aproximaciones:

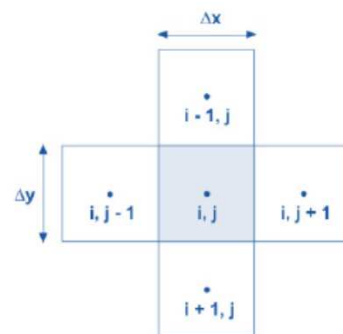
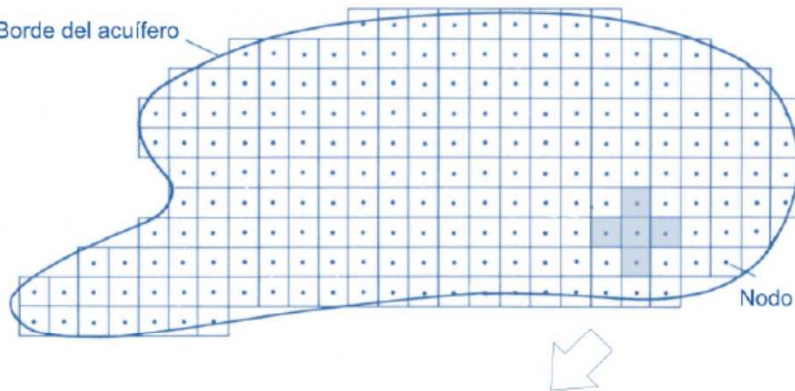
$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{(C_{j,n} - C_{j-1,n})}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{(C_{j+1,n} - C_{j,n})}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{(C_{j+1,n} - C_{j-1,n})}{2 \Delta x}$$

Ec.(227)

Borde del acuífero



Discretización

Ecuación diferencial parcial que describe el movimiento del agua subterránea en un medio poroso saturado heterogéneo y anisótropo.

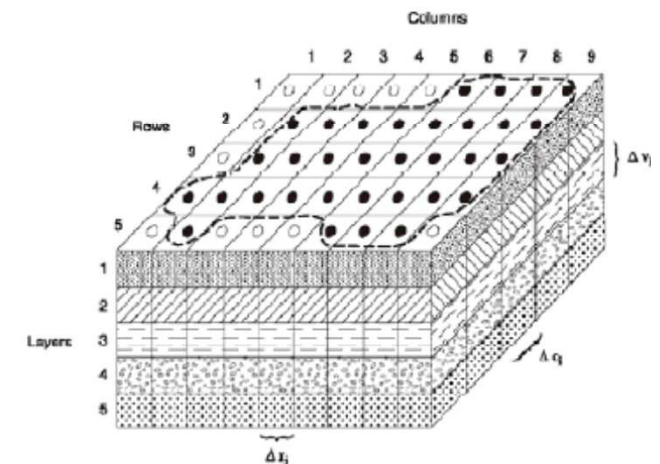
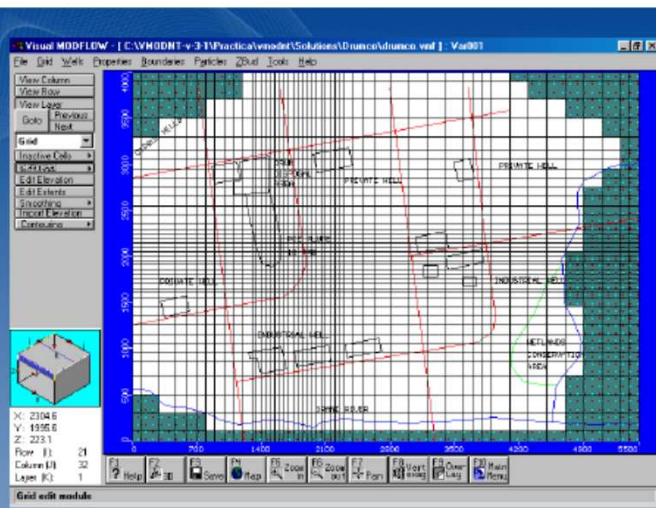
$$\frac{\partial}{\partial x} \left(T_{xx} * \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T_{yy} * \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(T_{zz} * \frac{\partial h}{\partial z} \right) \pm Q(x, y, z) = S * \frac{\partial h}{\partial t}$$

$Q(x, y, z, t)$

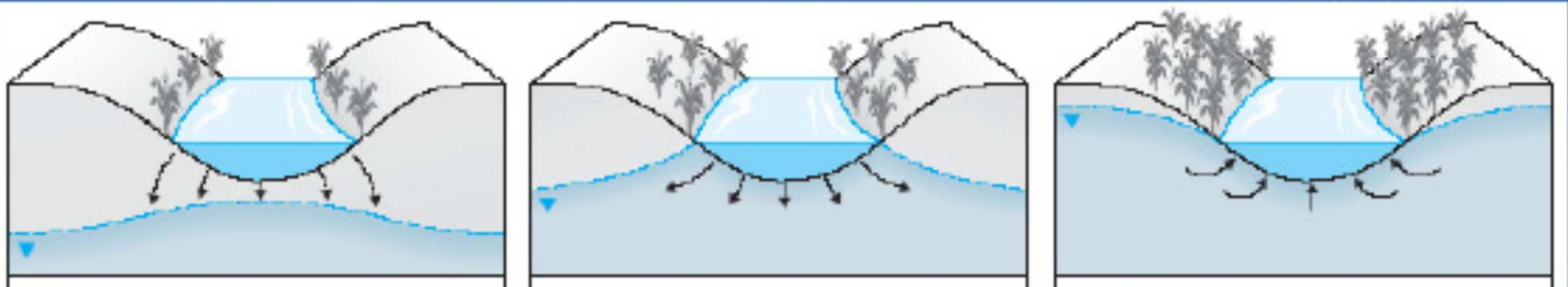
$T_{xx}, T_{yy}, T_{zz}, S$

$h(x, y, z, t)$

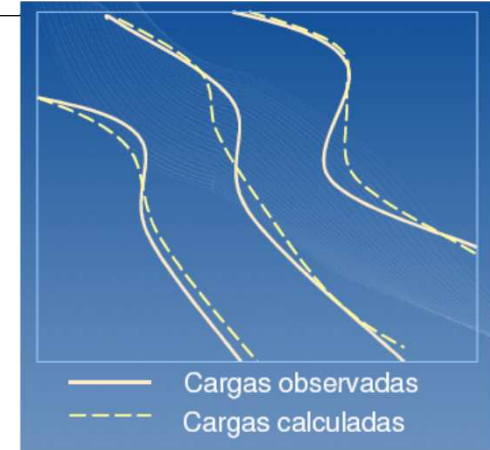
▪ Diseño de la malla del modelo



Condiciones de borde



Calibración



- Ajuste de los parámetros que intervienen en las ecuaciones de los procesos.
- Ajuste de las constantes cinéticas que intervienen en los procesos químicos y biológicos.
- Se requieren datos de campo y muestreos
 - Período de muestreo condiciones más desfavorables: por ej. Estiaje para descarga en ríos.
- Ajustar los resultados del modelos con los datos de campo durante un período de tiempo.
 - Etapas:
 - Selección de las funciones matemáticas y obtener los parámetros
 - Realizar el **análisis de sensibilidad**: influencia de todos los parámetros en el resultado final de la simulación
 - Determinación de parámetros con datos de campo para más sensibles
 - Asignación de bibliografía para parámetros menos sensibles
 - Diseñar el proceso de calibración: realizar simulaciones por parámetros significativos que afectan a una o pocas variables. Modificar el valor de un parámetro por vez. Iniciar

Análisis de sensibilidad

- **Antes de la calibración para:**
 - analizar cuales son los parámetros más influyentes en la solución y de esa manera centrarse en estos.
 - Cuales influyen en todas las variables de estado y cuales solo en algunas. Empezar la calibración por las generales.
- **Métodos:**
 - Analizar el resultado de la variable para una disminución del 50% del parámetro
 - Índice de sensibilidad relativa S_x de Hopkins (1983). X variable de estado

$$S_x = \frac{\frac{\Delta x}{x}}{\frac{\Delta param}{param}}$$

- **Análisis de incertidumbre:** debido a que los parámetros se conocen en un rango de variación. Se determina que parámetros aportan más incertidumbre a las variables de estado para poner más esfuerzo.
 - Simulaciones de Montecarlo para resultados

validación

- Comprobar el buen funcionamiento del modelo para otra serie de datos.

Balance

- *La ley de conservación de la materia establece que la masa ni se produce ni se destruye*

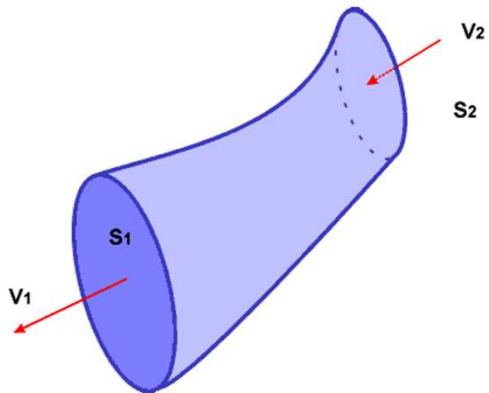
La cantidad de agua total permanece constante en el tiempo, varía la forma en que se encuentra

$$\text{Entradas} = \text{Salidas}$$

$$\text{Entradas} - \text{Salidas} = \text{Variación del Almacenamiento}$$

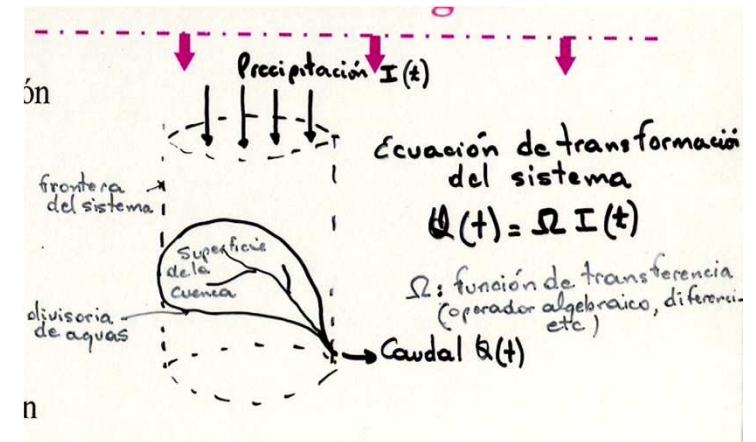
Para el agua que circula a través de dos secciones (sean éstas S1 y S2) de un conducto (poros, canales, ríos), la masa que entra es igual a la masa que sale.

La ecuación de continuidad se escribe: $v_1 S_1 = v_2 S_2$



Ecuación de continuidad expresa una ley de conservación de masa de forma matemática

Balance hidrológico



Precipitación = Detención en superficie (evaporación) +
Escorrentía superficial + Infiltración + variación almacenamiento

O con más detalle:

$$P + Q_{sup_i} + Q_{sub_i} = Q_{sup_o} + Q_{sub_o} + Ev + \Delta S$$

Las mediciones deberán ser al menos de un año. Más datos menos error de cierre.

Aplicación balance definir:

- *Unidad hidrológica de análisis (en general: volumen de control)*
- *Período de tiempo:*

Evitar

- Tratar de representar todo de una vez
- Ignorar datos que contradicen el modelo
- Heterogéneo, anisótropo, transitorio ...

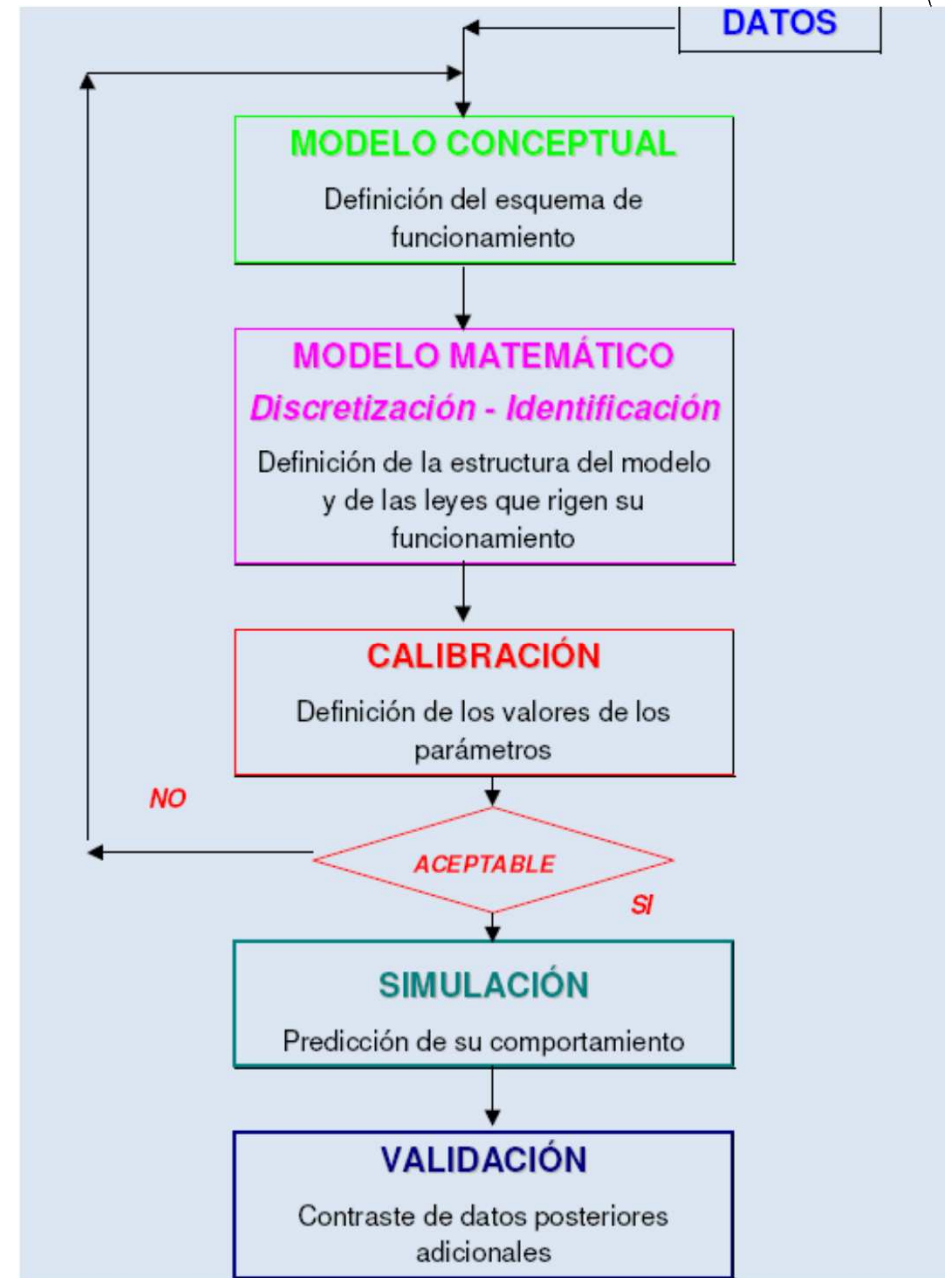
Sugerencia

- Comenzar de la manera más simple posible (homogeneidad, isotropía).
- Análisis de los escenarios: la incertidumbre en los parámetros de entrada conduce a varias posibles salidas.
- Analizar la información de utilidad a los fines del modelo

Datos necesarios

- Geometría del sistema
- Características hidráulicas: velocidad, pendiente, caudal, conductancia, relaciones con acuíferos, áreas de recarga y descarga
- Acciones sobre el sistema: pérdidas, detracciones, ingresos (caudales y concentraciones)
- Respuesta a las acciones: concentraciones, niveles de agua, caudales, hidrogramas
- Leyes hidrológicas y químicas: evolución infiltración excedentes riego, evolución escorrentía, movimiento de plaguicidas.

Síntesis



Paquetes informáticos

- Cuencas: HEC HMS (USACE), WMS (Brighman Young Univ), HSPF, SHE (Sistema hidrológico Europeo) Mike-SHE, TopModel.
- Erosión suelos: Rusle (USDA) – USLE – MUSLE
- Calidad de agua en ríos: Qual2E (CEAM – EPA) – TOXSWA – WASP3 – MIKE SHE
- Plaguicidas en ambientes acuáticos:
 - GENECC (EPA) GENECC (GENeric Estimated Environmental Concentration)
 - Exams – (CEAM – EPA)
 - Express – (CEAM – EPA)
 - PRZM (CEAM – EPA)
 - Pelmo
 - Pearl
- calidad de agua en cuenca
 - WASP (EPA) BASINS (Better Assessment Science Integrating point & Non-point Sources) basado en HSPF – EPA
 - SWAT (USDA) modelo de transporte hidrológico en cuencas, agricultura. Musle. ARCSWAT
 - NSPECT erosión y calidad fuentes no puntuales . GIS
 - SHETRAN SHE transporte de sedimentos y solutos en cuencas, puntuales y no
 - NPSM (EPA)
 - PRZM-RIVWQ (EPA)
- Ecología acuática: Aquatox ((CEAM – EPA)
- Plaguicidas en suelos: Macro, PRZM GW

Modelos de simulación para predecir las concentraciones de plaguicidas en aguas superficiales y subterráneas para su uso en la salud humana y evaluaciones de la exposición ecológicas acuáticas.

- **Surface Water**

PRZM, EXAMS, PRZM/EXAMS SHELL, KABAM, FIRST, GENEEC2, Tier I Rice Model, PFAM

- GENEEC es un modelo de agua superficial que se utiliza para evaluar la exposición de los plaguicidas para los organismos acuáticos y el medio ambiente.
- EXPRESS (EXAMS – PRZM Exposure Simulation Shell) v 1.03.02 (2007) está diseñado para facilitar una evaluación rápida y coherente de la exposición a plaguicidas acuático en una variedad de cultivos. EXPRESS es un proyecto conjunto de la Oficina de la USEPA de Destino y Efectos Ambientales División de Programas de Pesticidas "(OPP / EFED) y la Oficina de la USEPA de Investigación y Desarrollo (ORD).

- **Ground Water**

SCI-GROW, PRZM-GW

<http://www.epa.gov/oppefed1/models/water/>

Diferencias modelos matemáticos usados para evaluación de exposición por plaguicidas

- Utilizan las mismas ecuaciones que describen las funciones pero tienen
 - Modelo conceptual definido. Escenarios.
 - Límites, dimensiones y condiciones iniciales definidas.
 - Son aplicaciones parciales de los modelos completos
 - Macro y Macro in Focus
 - PRZM y PRZM/EXAMS

Modelos en registro plaguicidas

	Europa	EEUU
Tier 1	Step 1	Geneec: farm pond First: Embalse agua potable Scigrow: A.Subte
Tier 2	Step 2	PRZM escenarios (+100)
Tier 3	Scenarios (10) SWS - superficial SGN - subterrneos SWASH (AgDrift, Macro, PRZM , TOXSWA)	EXAMS: superfice + Deriva
Tier 4	L&M (Landscape & Mitigation)	Monitoring

Modelos hidrológicos de cuencas

- **HEC HMS**

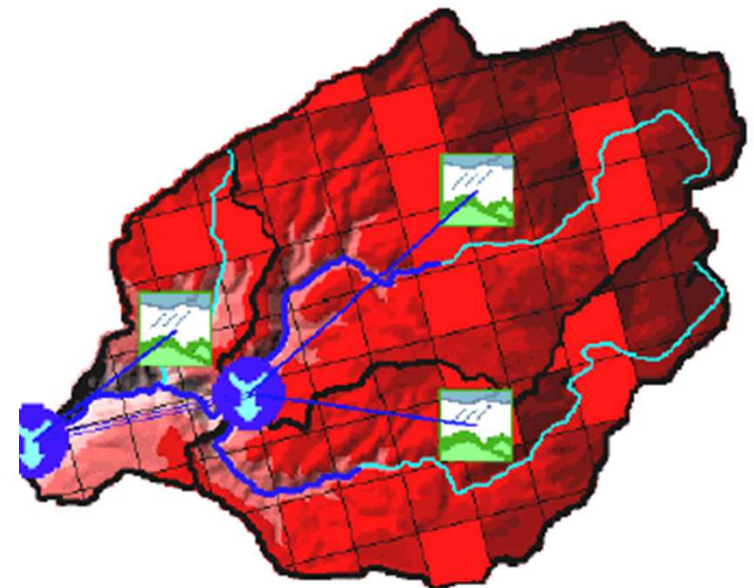
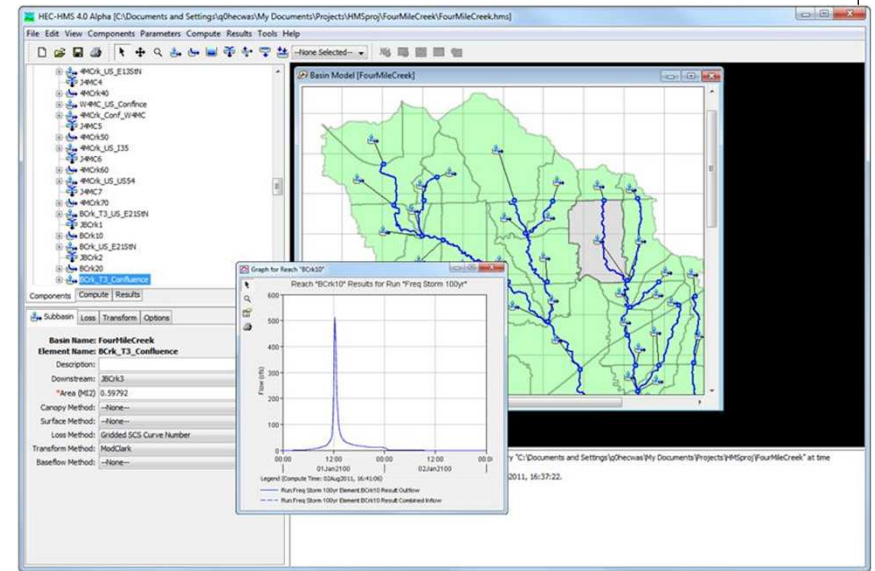
<http://www.hec.usace.army.mil/software/hec-hms/>

El Sistema de Modelación Hidrológica (HEC-HMS) está diseñado para simular los procesos de precipitación-escorrentía de los sistemas de cuencas dendríticas.

- **HEC GEOHMS**

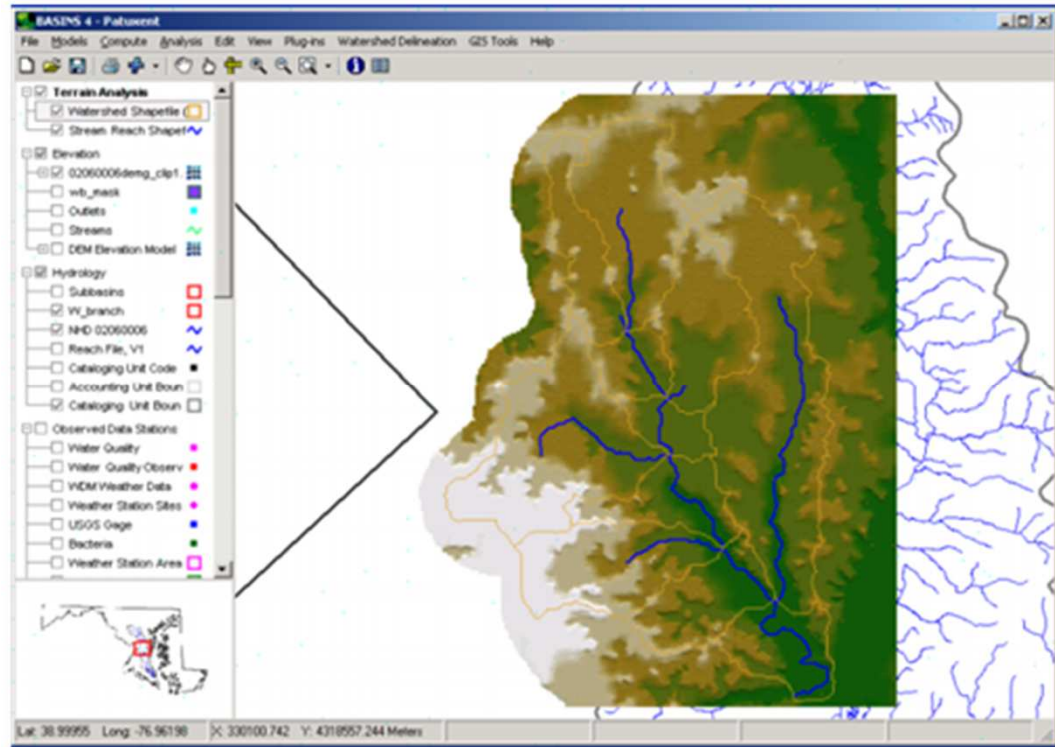
Analizando los datos digitales del terreno con ArcGIS, HEC-GEOHMS transforma las vías de drenaje y límites de la cuenca en una estructura de datos hidrológicos que representa la red de drenaje. El programa permite a los usuarios visualizar la información espacial, las características de las cuencas hidrográficas de documentos, lleve a cabo el análisis espacial, y delinean subcuencas y arroyos.

<http://www.hec.usace.army.mil/software/hec-geohms/>



Modelos de cuencas calidad

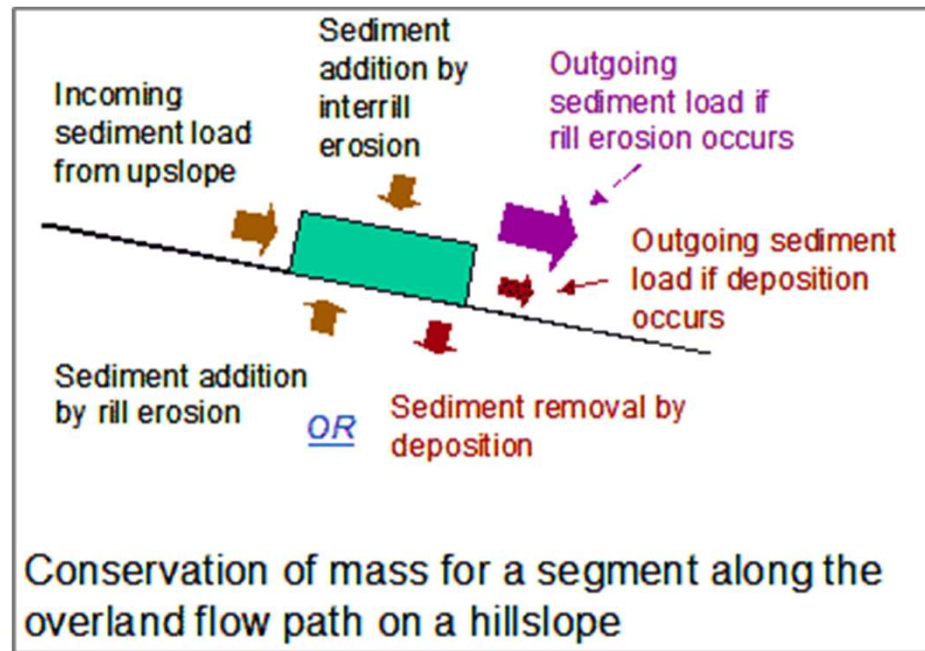
- **BASINS 4.1**



BASINS es una herramienta útil para manejo de cuencas, desarrollo de cargas diarias máximas totales (TMDL), la gestión de las zonas costeras, los programas de fuentes no puntuales, modelización de la calidad del agua,

Modelos de erosión de suelos

- Rusle USDA:



RUSLE2 estima tasas de **surcos e interrill la erosión del suelo** causada por **las lluvias** y su asociado **el flujo superficial**.

Tambien USLE y MUSLE

River and Stream Water Quality Model (QUAL2K)

QUAL2K (or Q2K) is a river and stream water quality model that is intended to represent a modernized version of the QUAL2E (or Q2E) model (Brown and Barnwell 1987). Q2K is similar to Q2E in the following respects:

One dimensional. The channel is well-mixed vertically and laterally.

- Steady state hydraulics. Non-uniform, steady flow is simulated.
- Diurnal heat budget. The heat budget and temperature are simulated as a function of meteorology on a diurnal time scale.
- Diurnal water-quality kinetics. All water quality variables are simulated on a diurnal time scale.
- Heat and mass inputs. Point and non-point loads and abstractions are simulated.

The QUAL2K framework includes the following new elements:

Software Environment and Interface. Q2K is implemented within the Microsoft Windows environment. It is programmed in the Windows macro language: Visual Basic for Applications (VBA). Excel is used as the graphical user interface.

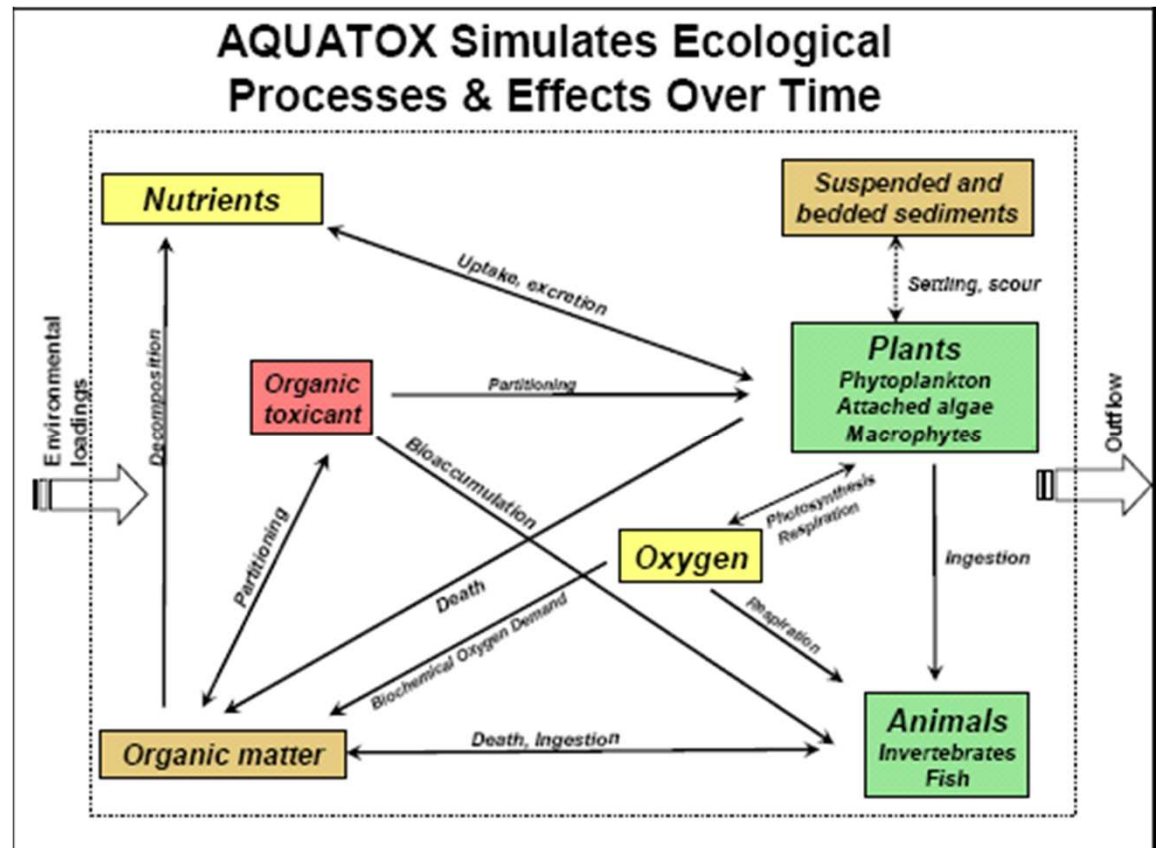
- Model segmentation. Q2E segments the system into river reaches comprised of equally spaced elements. In contrast, Q2K uses unequally-spaced reaches. In addition, multiple loadings and abstractions can be input to any reach.
- Carbonaceous BOD speciation. Q2K uses two forms of carbonaceous BOD to represent organic carbon. These forms are a slowly oxidizing form (slow CBOD) and a rapidly oxidizing form (fast CBOD). In addition, non-living particulate organic matter (detritus) is simulated. This detrital material is composed of particulate carbon, nitrogen and phosphorus in a fixed stoichiometry.

WWQTCS Info

- [WWQTCS Home](#)
- [Technical Support](#)
- [Tools](#)
 - [Watershed Models](#)
 - [Basins](#)
 - [LSPC](#)
 - [WAMView](#)
 - [SWMM](#)
 - [WARMF](#)
 - [Water Quality Models](#)
 - [WASP](#)
 - [QUAL2K](#)
 - [Aquatox](#)
 - [EPD-RIV1](#)
 - [Hydrodynamic Models](#)
 - [EFDC](#)
 - [EPD-RIV1](#)
 - [Database](#)
- [Training](#)

Modelos ecológicos

- AQUAtox



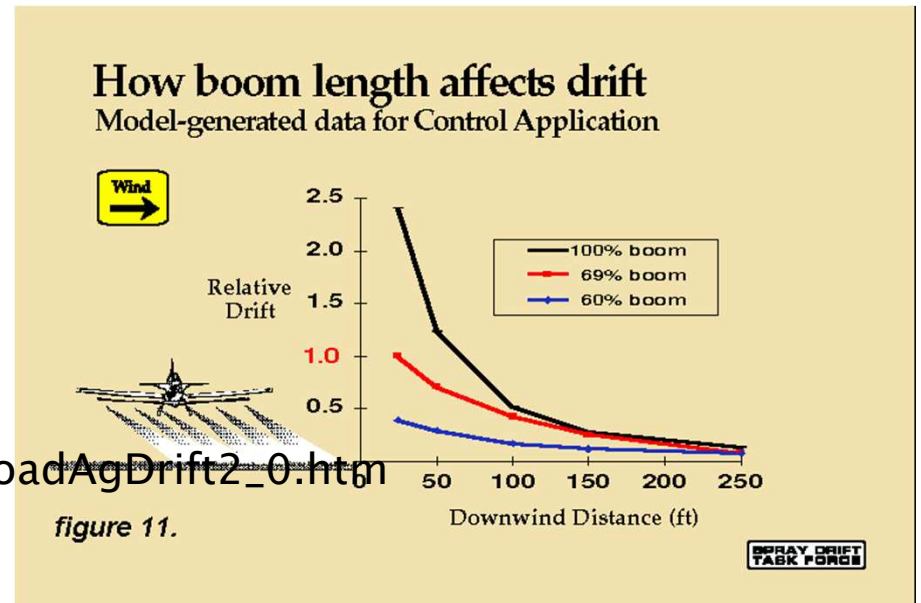
APLICACIONES

- El desarrollo de los objetivos alimenticios numéricos basados en los puntos finales biológicos deseados.
- Evaluar cuál de los diferentes factores de estrés que está causando el deterioro biológico observado.
- Predecir los efectos de los plaguicidas y otras sustancias tóxicas en la vida acuática.
- La evaluación de las respuestas del ecosistema potenciales para el cambio climático.
- La determinación de los efectos de los cambios de uso en la vida acuática mediante el vínculo con BASINS.
- Estimar el tiempo de recuperación de los tejidos de peces contaminados a niveles seguros después de la reducción de cargas contaminantes.

MODELOS ATMOSFÉRICOS

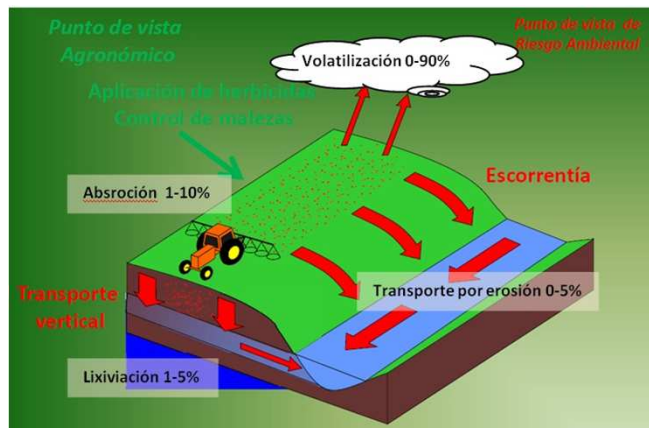
- AgDRIFT 2.0

http://www.agdrift.com/AgDRIFT2/DownloadAgDrift2_0.htm

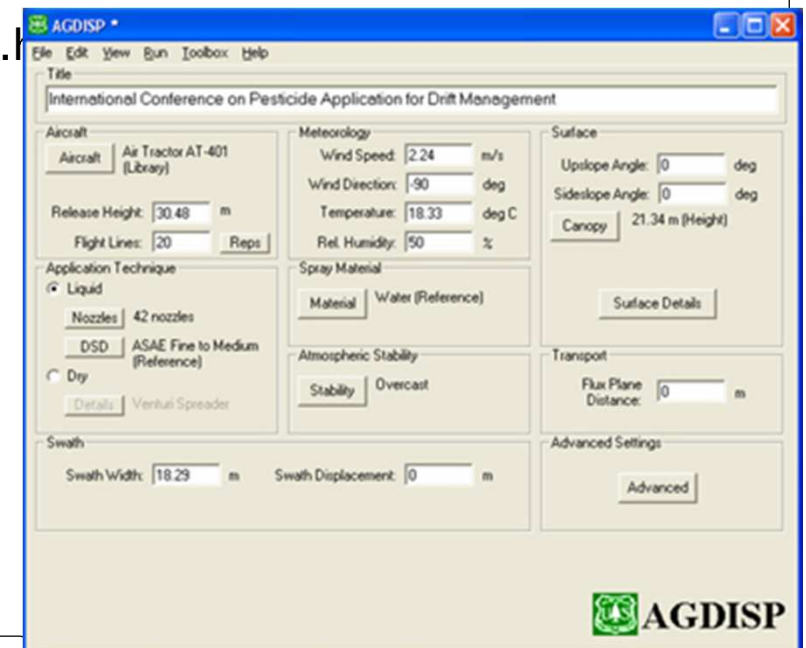


- AgDISP

<http://www.continuum-dynamics.com/pr-agdisp.html>



Principales formas en que un agroquímico puede convertirse en contaminante del ambiente (Martini, P. 2008).



Análisis multivariado

River Prediction And Classification System

RIVPACS (Wright et al. 1989)

- Distancia de fuente
- Pendiente
- Granulometría media
- Altitud
- Descarga
- Ancho medio
- Profundidad media
- Latitud
- Longitud
- Alcalinidad
- Temperatura del aire (media y rango)



- Análisis discriminante múltiple (MDA) los relaciona con bentos



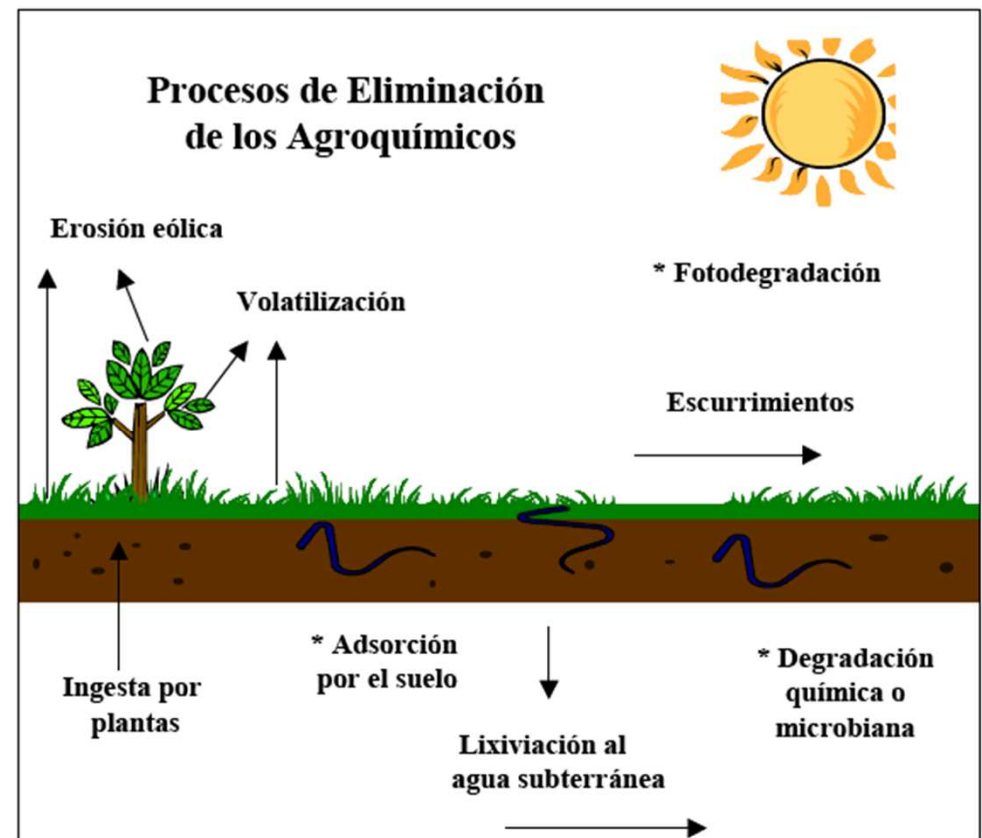
- Predicción bentos



- Fauna observada
Fauna esperada

Propiedades de los plaguicidas que definen su cinética ambiental y por ende son utilizados por los modelos

- Solubilidad en agua
- Coeficiente de partición lípido/ag
- Degradabilidad
- Presión de vapor
- Disociación y ionización



Fuente: Los Indicadores Biológicos en la Evaluación de la Contaminación por Agroquímicos en Ecosistemas Acuáticos y Asociados

Ph.D. Mohammad H. Badii Zabeh¹, Dr. Raúl Garza Cuevas², Dr. Victoriano Garza Almanza³, Dr. Jerónimo Landeros Flores⁴

Paginas modelos

- <http://www.ewater.com.au/>
- <http://www.usgs.gov/water/>
- [:http://water.usgs.gov/software/](http://water.usgs.gov/software/)
- <http://www.usace.army.mil/>
- <http://www.nrcs.usda.gov/>
- <http://www.epa.gov/>
- <http://www2.epa.gov/exposure-assessment-models>
- <http://www.hec.usace.army.mil/software/>
- http://coastalmanagement.noaa.gov/nonpoint/docs/packet/NSPECT_CSC
- <http://www.epa.gov/oppefed1/models/water>
- <http://swat.tamu.edu/>
- http://www2.mst.dk/common/Udgivramme/Frame.asp?http://www2.mst.dk/udgiv/publications/2004/87-7614-274-4/html/kap02_eng.htm
- Guia lhobe para toma de muestras

BIBLIOGRAFÍA

- ANGELIER E., 2003. Ecología de las aguas corrientes. Editorial Acribia. Zaragoza, España. 217 p.
 - CHIN D.A., 2006. Water Quality Engineering in Natural Systems. Wiley Interscience. 610p.
 - COLE G. 1988. Manual de Limnología. Editorial Hemisferio Sur. Buenos Aires. 405 p.
 - DOMENICO P.A., SCHWARTZ F., 1997. Physical and Chemical Hydrogeology. John Wiley & Sons, USA, 2ª ed., 506p.
 - MARTINEZ DE AZAGRA A. 1996 Hidrología forestal. El ciclo hidrológico. Secretariado de publicaciones. Universidad de Valladolid. España.
 - MIHELIC J., 2001. Fundamentos de Ingeniería Ambiental. Limusa Wiley. 384 p.
 - PEPPER I., Ch. GERBA, M. BRUSSEAU (Ed.), 1996. Pollution Science. University of Arizona, EEUU. 399 p.
 - SCHNOOR J., 1996. Environmental Modeling: Fate and transport of pollutants in water, air and soil. University of Iowa. Interscience publication. E.U.A. 682p.
 - THOMANN, R. and MUELLER, J, 1987. Principles of surface water quality modeling and control. Manhattan College. Harper Collins Publishers. E.U.A.
 - ZHENG C., BENNETT G., 2002. Applied Contaminant Transport Modeling. Wiley InterScience. 1ª y 2ª ediciones. 621p.
-
- ALLAN D., 1995. Stream Ecology. Structure and Function of running Waters. Chapman&Hall. 388p.
 - FETTER C.W.. 1999. Contaminant hydrogeology. Prentice Hall, 500p.
 - FREEZE R.A., CHERRY J.A., 1979. Groundwater. Prentice Hall. 604p.
 - GOMEZ CEREZO, R. 2003 Modelos conceptuales de funcionamiento de ríos y arroyos. Departamento de Ecología e Hidrología. Universidad de Murcia.
 - TINDALL J.A., J. KUNKEL, 1999. Unsaturated Zone Hydrology for Scientist and Engineers. Prentice Hall. 624p
 - VAN DER PERK M., .2006. Soil and Water Contamination from molecular to catchment scale. Taylor & Francis Group, 389p.
 - VANNOTE, R. MINSHALL, G. CUMMINS, R. SEDELL, C. & CUSHING, C. (1980): The River Continuum concept. Fish Aquatic Science. (37): 130– 137.
 - VEN TE CHOW, 1994. Hidrología Aplicada. Mc Graw– Hill Interamericana (formato PDF)
 - WARD, J. V. (1989). The four dimensional nature of lotic ecosystems. Journal of the North American Benthological Society (8): 2–8.
 - WETZEL R.G., LIKENS G.E., 1991. Limnological Analysis. Elsevier, 2ªed. . 391p.
 - YARON, B., G. DAGAN, J. GOLDSHID, 1984. Pollutants in Porous Media. The Unsaturated Zone Between Soil Surface and Groundwater. Springer–Verlag, 296p.

RECURSOS INTERNET

- AUGE, M. <http://www.gl.fcen.uba.ar/investigacion/grupos/hidrogeologia/auge/>
- Encyclopedia of Hydrological Sciences online!.
<http://onlinelibrary.wiley.com/book/10.1002/0470848944>
- FETTER C. W. Home Page for *Applied Hydrogeology*
<http://www.appliedhydrogeology.info/>
- Gallagher D., [Andrea Dietrich](#) 1998. Environmental Sampling & Monitoring Primer. Civil Engineering Department at Virginia Tech:
<http://www.cee.vt.edu/ewr/environmental/teach/smprimer/smprimer.html>
- Gallagher D., Naraine Persaud, 1998. Soil and Ground Water Pollution Primer. Civil Engineering Department at Virginia Tech:
<http://www.cee.vt.edu/ewr/environmental/teach/gwprimer/gwprimer.html>
- Glossaire International d'Hydrologie (UNESCO)
<http://webworld.unesco.org/water/ihp/db/glossary/glu/HINDFR.HTM>
- Hidrolgeología y aguas subterráneas. Instituto Geológico y Minero de España.
http://www.igme.es/internet/web_aguas/igme/homec.htm
- SANCHEZ ROMÁN, J. 2010 Hidrogeología Hidrología. Universidad de Salamanca, España <http://web.usal.es/~javisan/hidro/hidro.htm>