

Un modelo numérico con MATLAB para simular la autodepuración de un río

David Ernesto Marón DomínguezE-MAIL: dmaron@icb.cujae.edu.cu

Centro de Estudios Matemáticos (CEMAT). Universidad Tecnológica de La Habana José Antonio Echeverría (Cujae), Cuba.

Dayana Lugones RodríguezE-MAIL: day033125@gmail.com

Centro de Investigaciones Hidráulicas. Universidad Tecnológica de La Habana José Antonio Echeverría (Cujae), Cuba.

Tania Herrera AchónE-MAIL: tanherreraa@gmail.com

Centro de Investigaciones Hidráulicas. Universidad Tecnológica de La Habana José Antonio Echeverría (Cujae), Cuba.

Teresita de Jesús Romero LópezE-MAIL: teresitaromerolope@gmail.com

Centro de Investigaciones Hidráulicas. Universidad Tecnológica de La Habana José Antonio Echeverría (Cujae), Cuba.

RESUMEN

Este trabajo propone un modelo numérico 1D para evaluar la calidad del agua en ríos y canales. Se basa en la aplicación del Método de los Elementos Finitos (MEF) a las ecuaciones diferenciales de la Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO) y del Oxígeno Disuelto (OD) con régimen permanente. El modelo del MEF fue implementado en MATLAB acoplándose a un algoritmo de optimización para la calibración de los parámetros cinéticos y del coeficiente de dispersión. Se muestra la aplicación a un caso real de un río en Cuba. Su aplicación demuestra la capacidad del modelo para predecir la dinámica de los contaminantes, apoyando la gestión sostenible de recursos hídricos y su implementación facilitará la toma de decisiones ante vertimientos de residuales, contribuyendo a la protección de un río.

PALABRAS CLAVE: *autodepuración, elementos finitos, modelo numérico, ríos*

A numerical model using MATLAB to simulate river self-purification

ABSTRACT

This work proposes a 1D numerical model for evaluating water quality in rivers and canals. It is based on the application of the Finite Element Method (FEM) to the differential equations of Biochemical Oxygen Demand (BOD) and Dissolved Oxygen (DO) under steady-state conditions. The FEM model was implemented in MATLAB, coupled with an optimization algorithm for calibrating the kinetic parameters and the dispersion coefficient. The application is shown to a real case of a river in Cuba. Its application demonstrates the model's ability to predict pollutant dynamics, supporting the sustainable management of water resources. Furthermore, its implementation will facilitate decision-making regarding wastewater discharges, contributing to river protection.

KEYWORDS: *self-purification, finite elements, numerical model, rivers*

01 INTRODUCCIÓN

Los ríos han sido considerados como la principal fuente de disposición de descargas de contaminantes (Pestana, 2016). Claramente, los ríos poseen varios rasgos atractivos como un medio de disposición de aguas residuales: transporte de aguas residuales hacia el océano, dilución y dispersión debido al mezclado rápido, baja sedimentación y resuspensión con extendimiento del sedimento sobre un área grande y condiciones turbulentas que causan una rápida reaireación.

Los modelos de calidad del agua de los ríos, no son más que relaciones entre la velocidad de descarga y la concentración del oxígeno disuelto. De aquí que el tema y estudio de la modelación de la calidad de las aguas superficiales goce de una amplia repercusión y de gran auge en la actualidad (Pestana, 2016). El objetivo de este trabajo es aplicar un modelo numérico de calidad del agua de acuerdo con las características de los ríos o canales, para la simulación del proceso de autodepuración. Esta aplicación incluye la calibración de los parámetros de calidad de agua.

Según Velázquez (2013), los modelos numéricos representan de manera numérica el proceso físico o los cambios cuantitativos del sistema utilizando ecuaciones y algoritmos matemáticos que relacionan parámetros numéricos. Los dos métodos numéricos más utilizados en el campo de las ciencias y de las ingenierías son el Método de las Diferencias Finitas (MDF) y el Método de los Elementos Finitos (MEF). El MEF permite realizar un modelo matemático de cálculo del sistema real, más fácil y económico de modificar que un prototipo; sin embargo, no deja de ser un método aproximado de cálculo debido a las hipótesis básicas del mismo. Su desarrollo ha avanzado junto con la evolución computacional, ya que los ordenadores permiten resolver eficientemente las numerosas ecuaciones que genera (Marón Domínguez, 2001).

1.1. Calibración y validación de los modelos numéricos

La calibración del modelo numérico tiene como objetivo ajustar sus parámetros mediante prueba y error, dentro de rangos válidos, usando datos observados del sistema real. El proceso requiere ejecutar repetidamente el modelo hasta que sus predicciones coincidan con los datos medidos, cumpliendo los criterios establecidos. Esta etapa es necesaria porque, aunque el modelo se base en principios teóricos correctos, sus simplificaciones pueden generar desviaciones de la realidad. Para validar su precisión, pueden emplearse distintos enfoques según las condiciones simuladas (Escobar Verbel, 2021). La validación de los modelos numéricos tiene como objetivo determinar la credibilidad del modelo elaborado en el que se utilizan los parámetros obtenidos de la calibración.

1.2. Modelación de la Calidad del Agua

Los modelos de calidad del agua tienen por finalidad determinar parámetros de calidad como las nuevas concentraciones de contaminantes del cuerpo de agua en cada cuando las condiciones de modificación y el estado inicial son conocidos.

Para que un modelo de calidad de aguas pueda ser aplicado confiablemente, para la predicción de las condiciones de los diversos parámetros, tiene que cumplir, obviamente, con la condición básica de reproducir aceptablemente las condiciones reales. Desde que las aguas residuales contienen un alto valor de DBO, y la concentración de OD es un indicador primario de los sistemas acuáticos, la DBO es ampliamente usada para medir el grado de polución de las aguas (contaminación) y ha sido tradicionalmente el parámetro más importante para la contaminación orgánica.

En la figura 1.1, se muestra de forma simplificada, el proceso de autodepuración de un río (Pestana, 2016).

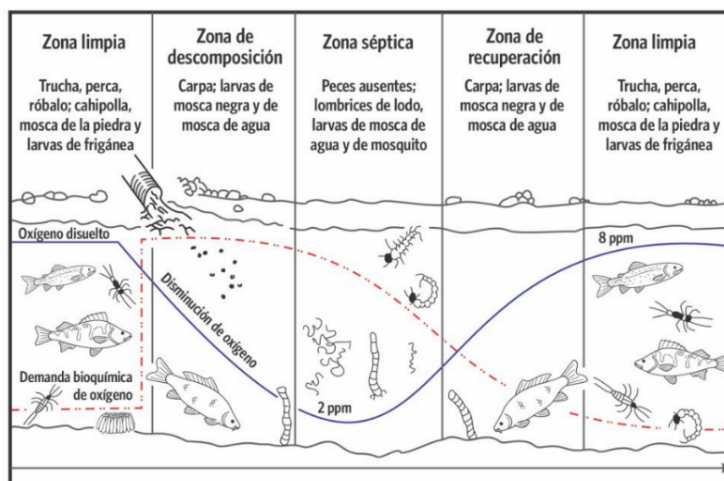


Figura 1.1. Proceso de Autodepuración en un río (Chaparro, 2020).

En la figura anterior se observa la curva «Sag» del OD, cuyo punto crítico depende de factores como carga contaminante, caudal, morfometría y temperatura. En muchos casos, el efecto dispersivo puede ignorarse al analizar la descarga de un contaminante, dependiendo de la relación entre transporte advectivo y dispersivo, que viene dado por el número de Peclet, el cual es un término adimensional que tiene lugar una vez aplicado el análisis dimensional de longitud y concentración que intervienen en estos procesos (Martín-Monerris & Marzal-Doménech, 2010).

1.3. Calidad de las aguas en los ríos cubanos

En Cuba, el aumento de la demanda de agua y su deterioro progresivo exigen que las administraciones implementen nuevas metas en la gestión y control de los recursos naturales. El Instituto Nacional de Recursos Hidráulicos (INRH) y los Consejos de Cuencas Hidrográficas, junto a otros gestores, mantienen redes de monitoreo de la calidad y cantidad del agua, las cuales han sido ampliadas y mejoradas continuamente.

En el año 2019, se realizó un estudio en el río Luyanó, el cual dio a demostrar que según los indicadores de calidad del agua es un cuerpo de agua muy contaminado por materia orgánica, cuyo origen son las numerosas y variadas fuentes de contaminación que llegan al río de forma directa e indirecta. Los valores registrados dan superiores a los fijados por las normas cubanas de calidad del agua, impidiendo que el preciado líquido pueda ser usado como agua potable por la industria alimenticia y actividades relacionadas con la recreación y la pesca.

1.4. Modelo matemático permanente de la DBO y del OD

El régimen impermanente presenta mayor complejidad numérica que el régimen permanente al depender de dos variables (x, t), convirtiendo las ecuaciones gobernantes en un sistema de ecuaciones diferenciales parciales (Marón Domínguez, 2001). Su solución requiere discretización del espacio y del tiempo. Esta mayor complejidad computacional exige esquemas avanzados de simulación hidrodinámica. Aunque en épocas secas pueden aproximarse a un régimen permanente (variaciones temporales mínimas), factores como infiltración o aportes subterráneos introducen siempre cierta variabilidad en el tiempo. Por ello, el flujo permanente en ríos naturales es una idealización útil para la modelación, pero con limitaciones prácticas ante la inherente dinámica hidrológica.

Mientras la carga contaminante no supere la capacidad de resiliencia del río, los mecanismos autodepurativos pueden restaurar el equilibrio. Pero cuando los vertidos son crónicos o excesivos, se requieren darles tratamiento a esas aguas a través de las plantas de tratamiento, control de vertidos, etc. La autodepuración de un río viene modelada matemáticamente por dos ecuaciones en derivadas parciales de segundo orden para el caso de régimen impermanente, describiendo la variación de la concentración de la DBO y la variación de la concentración del OD en el tiempo y en el espacio (Szymkiewicz, 2010). A partir de estas ecuaciones, se procedió a su simplificación para régimen permanente en donde el tiempo es despreciable. Estas ecuaciones se muestran según las expresiones:

$$AU \frac{\partial \text{DBO}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(AD \frac{\partial \text{DBO}}{\partial x} \right) + AK_1 \text{DBO} = -A W_{dbo} + R_{dbo}(x) \quad (1.1)$$

$$AU \frac{\partial \text{OD}}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(AD \frac{\partial \text{OD}}{\partial x} \right) + AK_2 \text{OD} = AK_2 \text{OD}_{sat} - W_{do} + AK_3 \text{DBO} + R_{od}(x) \quad (1.2)$$

Donde $\text{DBO}(x)$ es la demanda bioquímica de oxígeno (mg/l), $\text{OD}(x)$ es el oxígeno disuelto (mg/l), A es el área mojada de la sección transversal del río (m^2), U es la velocidad del agua (m/día), D es el coeficiente de dispersión ($\text{m}^2/\text{día}$), K_1 es la constante de degradación de la DBO (1/día), K_2 es la constante de reaeración del OD (1/día), K_3 es la velocidad para remover la DBO por sedimentación y adsorción (1/día), OD_{sat} es la concentración de OD en saturación (1/día), W_{dbo} y W_{do} son los términos fuente y/o sumidero de la DBO y del OD respectivamente (mg/l día) y $R_{dbo}(x)$ y $R_{od}(x)$ son los aportes debido a los vertimientos puntuales de DBO y del OD, respectivamente (mg/l). A estas dos ecuaciones se le aplica el MEF para obtener su forma discretizada.

La constante K_1 representa la constante de degradación de la DBO y mide la tasa o velocidad de degradación de la materia orgánica presente en un sistema acuático (Benjumea Hoyos, 2018). La constante K_2 representa la constante de reaeración del OD y es la velocidad a la cual se transfiere a las aguas naturales el oxígeno que está presente en la atmósfera.

El parámetro W representa la tasa neta de remoción de oxígeno asociada a todos los procesos distintos a la oxidación bioquímica, por ejemplo, la respiración de plantas acuáticas y reacciones químicas o los aportes, por ejemplo, la fotosíntesis. Es importante en el proceso de calibración para alcanzar los mejores ajustes de los parámetros la presencia de este coeficiente.

1.5. Modelo Streeter-Phelps

El ingeniero H. W. Streeter y el experto E. B. Phelps estudiaron los procesos de oxidación y reaeración en el río Ohio (EE.UU.) entre 1914 y 1915, usando datos experimentales recopilados por el Servicio de Salud Pública (Streeter & Phelps, 1925). Durante los años 60, versiones más avanzadas del modelo incorporaron factores como fotosíntesis y demanda de oxígeno sedimentario, así como aplicaciones para sistemas múltiples gracias al avance de la computación. El modelo opera en condiciones estacionarias y con dispersión nula, ideal para predecir la evolución del OD a lo largo del cauce de un río. Su simplicidad lo hace aplicable cuando las variaciones diarias de contaminación son mínimas. Estas hipótesis permiten una modelación práctica de la autodepuración en cursos fluviales. Para estas condiciones simplificadas las ecuaciones diferenciales (1.1) y (1.2) pueden resolverse analíticamente y dichas soluciones son las siguientes:

$$\text{DBO}(x) = \text{DBO}_o e^{-\frac{K_1 x}{U}}, \quad \text{OD}(x) = \text{OD}_o + \frac{K_3 \text{DBO}_o}{K_2 - K_1} \left(e^{-\frac{K_2 x}{U}} - e^{-\frac{K_1 x}{U}} \right), \quad K_1 \neq K_2 \quad (1.3)$$

Si ocurre que $K_1 = K_2$ entonces las expresiones (1.3) son otras, pero es muy poco probable que esta situación se cumpla en la realidad. Según se observa en (1.3) el modelo de Streeter-Phelps no tiene en cuenta el coeficiente de dispersión D , pero se puede obtener una solución analítica más general de las ecuaciones diferenciales (1.1) y (1.2) teniendo en cuenta el coeficiente de dispersión D . En el trabajo de Morales Castillo (2025) se muestran las funciones que son las soluciones exactas de las ecuaciones (1.1) y (1.2) para el caso en que el coeficiente de dispersión D no es nulo siendo estas funciones las siguientes:

$$\text{DBO}(x) = \text{DBO}_o e^{m_2 x}, \quad \text{OD}(x) = \text{OD}_o + \frac{K_3 \text{DBO}_o}{D m_2^2 - U m_2 - K_2} (e^{m_2 x} - e^{m_4 x}) \quad (1.4)$$

donde

$$m_2 = \frac{U - \sqrt{U^2 + 4DK_1}}{2D} \quad \text{y} \quad m_4 = \frac{U - \sqrt{U^2 + 4DK_2}}{2D}, \quad m_2 \neq m_4 \quad (1.5)$$

Si ocurre que $m_2 = m_4$ entonces las expresiones (1.4) son otras, pero es muy poco probable que esta situación se cumpla en la realidad.

1.6. Problema inverso para la calibración de los parámetros

En situaciones reales, es común contar con mediciones de DBO y OD en múltiples puntos de un río o canal, pero no conocer, los parámetros clave: K_1 , K_2 y K_3 . Para estimar estos valores, se requiere implementar un algoritmo numérico que combine el MEF con un algoritmo de optimización del asistente matemático MATLAB. Este algoritmo ajusta iterativamente los parámetros hasta que los valores simulados coincidan con las mediciones reales de DBO y de OD. Después de obtener los valores calculados de la DBO_{cal} y del OD_{cal} por el modelo directo se comparan estos con los valores observados de la DBO_{obs} y del OD_{obs} teniendo en cuenta la formula clásica del Error Medio Cuadrático (EMC).

02 COMPROBACIÓN DE LOS ALGORITMOS DE CÁLCULO

Se muestran dos ejemplos de la aplicación del modelo numérico desarrollado en este trabajo. El primer ejemplo no es real y se comparan las soluciones clásicas del Modelo de Streeter-Phelps con las soluciones numéricas del MEF. El segundo ejemplo si es real y utiliza las mediciones que fueron hechas en un trabajo de investigación anterior realizado por Morales Castillo (2025) en el Rio Luyanó, que se encuentra en La Habana, Cuba. En ambos ejemplos el modelo numérico del MEF se acoplo al algoritmo de optimización fmincon del MATLAB para calibrar los 3 parámetros cinéticos del modelo.

2.1. Ejemplo 1. Un río de un solo tramo con dispersión nula (Modelo de Streeter-Phelps)

En este ejemplo no real, se aplica el modelo permanente del MEF aplicado a las ecuaciones diferenciales (1.1) y (1.2), pero con dos diferencias fundamentales que se consideran nulas la dispersión (D) y el termino fuente (W). Esta suposición corresponde exactamente con el modelo clásico de Streeter-Phelps, representado por las soluciones analíticas (1.3).

Se modela un río con flujo conformado por un solo tramo, con un vertido de contaminantes solo al inicio del tramo en aguas arriba, en $x = 0$. El objetivo es comparar la solución numérica que se obtiene del MEF con las soluciones de Streeter-Phelps. A continuación, se presentan los datos de la simulación de este ejemplo.

Datos de la malla de la región: Se asume que el río tiene una longitud de $L = 6$ km y se ha dividido en $N = 100$ subintervalos, con lo cual la malla tiene 101 nodos en total en todo el tramo, y cada subintervalo tiene una longitud de $\Delta x = 60$ m.

Datos del flujo y de la geometría del río: Teóricamente se toma un río poco caudaloso con gasto igual a $q_r = 5$ m³/s. La sección transversal del río es de forma rectangular con los siguientes datos: ancho de fondo $b = 5$ m, el talud es $m = 0$, un coeficiente de fricción de Manning de $n = 0,001$ y una pendiente de fondo de $S_o = 0,0001$. Se utiliza la ecuación de Manning con la cual se obtiene un tirante normal de $H = 0,28$ m, un área mojada de $A = 1,4$ m² y una velocidad del agua de $U = 3,9286$ m/s. Se supone que estos valores se mantienen constante en todo el tramo del río.

Datos del vertimiento: El río recibe un vertimiento de residuales aguas arriba, en $x = 0$. Este vertimiento está caracterizado por tres datos: una $DBO_v = 25$ (mg/L), un $OD_v = 5$ (mg/L) y un gasto o caudal de vertimiento de $q_v = 0,5$ (m³/s) que se corresponde con el 10 % del gasto del río q_r . Se ha asumido que el gasto de vertimiento es mucho menor que el gasto que circula por el río y que no afecta las condiciones del flujo permanente. En la figura 2.1 se muestra una representación de la región de estudio.



Figura 2.1. Esquema de la región de simulación.

Datos de la temperatura: Se ha supuesto una temperatura de 24 °C, la cual se evalúa en la ecuación del ajuste cubico que relaciona la temperatura con el oxígeno disuelto saturado reportado en el trabajo de Morales Castillo (2025) y se obtiene un valor de $OD_{sat} = 8,4337$ mg/L.

Datos de los parámetros a calibrar: Como en este ejemplo no se disponen de mediciones reales de la DBO y del OD, en el río, se asumen conocidos los valores de los 3 parámetros cinéticos que aparecen en (1.3), se evalúan las soluciones del Modelo de Streeter-Phelps dado en (1.3) y se toman dichos resultados como los valores observados de la DBO y del OD en todos los nodos de la malla. Estos valores asumidos son los siguientes: $K_1 = 0,000125$ en (1/seg) que corresponde con 10,8 en (1/día), $K_2 = 0,000005$ en (1/seg) que corresponde con 0,432 en (1/día) y $K_3 = 0,0005$ en (1/seg) que corresponde con 43,2 en (1/día). Estos valores prefijados se muestran en la Tabla 2.1. De los 101 valores observados son seleccionados 21 de ellos que se utilizan en el proceso de calibración para poder evaluar la función objetivo que tiene incorporado el algoritmo de optimización del MATLAB. El objetivo es comprobar si con el algoritmo de calibración se pueden recuperar los valores de los 3 parámetros cinéticos, totalmente o con un cierto grado de aproximación. Las restricciones de cotas que se tomaron para estos 3 parámetros en el algoritmo de optimización fue el intervalo $[0, 0,001]$ en 1/seg.

A continuación, se muestra la Tabla 2.1 con los resultados del proceso de calibración de los 3 parámetros cinéticos, así como también se muestran los valores de los parámetros que fueron prefijados. Posterior a dicha tabla se muestra la gráfica de los valores calculados (*) y los observados (o) de la DBO y del OD.

Tabla 2.1. Parámetros prefijados y parámetros calibrados

Parámetros	Valores prefijados	Valores calibrados
K_1 (1/seg)	0,0015	0,0015001
K_2 (1/seg)	0,0075	0,0074993
K_3 (1/seg)	0,00225	0,0022499

De la Tabla 2.1 se observa que el ajuste es bastante aceptable en este ejemplo, ya que solo se calibran 3 parámetros del modelo. Aunque este ejemplo no es real y no muy complejo pero el algoritmo numérico del MEF acoplado al algoritmo de optimización logra reproducir casi exactamente los valores prefijados de los 3 parámetros cinéticos del modelo lo cual era el objetivo principal en este ejemplo. El valor de la función objetivo para este caso fue $F_{Obj} = 3,569 \times 10^{-5}$ (1/seg). Es decir, que se puede plantear que para este ejemplo la comparación entre el modelo numérico del MEF junto a la calibración y las soluciones (1.3) es aceptable.

En la figura 2.2 se observa también que el ajuste alcanzado entre los valores observados y los valores calculados es bastante aceptable. Es bueno recordar que para el proceso de la calibración se tomaron como valores observados 21 valores de los 101 que hay en total, lo cual representan un 21 % del total de puntos de la malla. Se percibe claramente en la gráfica del OD la forma de la llamada «SAG» o «cuchara» con un punto de mínimo que representa el punto donde comienza a recuperarse el oxígeno en el río. En este ejemplo el valor del punto de mínimo corresponde con la distancia $x = 1031,7$ m. Este se obtiene de forma exacta por la condición necesaria de punto de mínimo de una función real a partir de la función del OD que aparece en (1.3).

2.2. Ejemplo 2. Ejemplo del río Luyanó

Este ejemplo es real y corresponde con la aplicación del modelo numérico del MEF en el río Luyanó el cual se encuentra en la provincia de La Habana, en Cuba. El tramo del río Luyanó estudiado es el segmento que se encuentra comprendido entre el Puente de la Viga hasta la confluencia del arroyo Pastrana, en la provincia de La Habana. Haciendo uso de los datos y mediciones obtenidas en un estudio realizado anteriormente se pudo realizar con cierto grado de aproximación, la simulación realizada en este trabajo, lo cual fue reportado en el trabajo de Morales Castillo (2025). A continuación, se muestran los datos necesarios para este ejemplo.

Datos de la malla de la región: El río tiene $L = 1,766$ km de longitud, el cual está dividido en $N = 7$ subintervalos, por lo tanto, la malla de la región tiene 8 nodos. La malla no es una malla uniforme, es decir, la longitud de los subintervalos no es constante para todos los subintervalos.

Datos del vertimiento: Según la información que se pudo obtener del documento digital, en el río se identi-

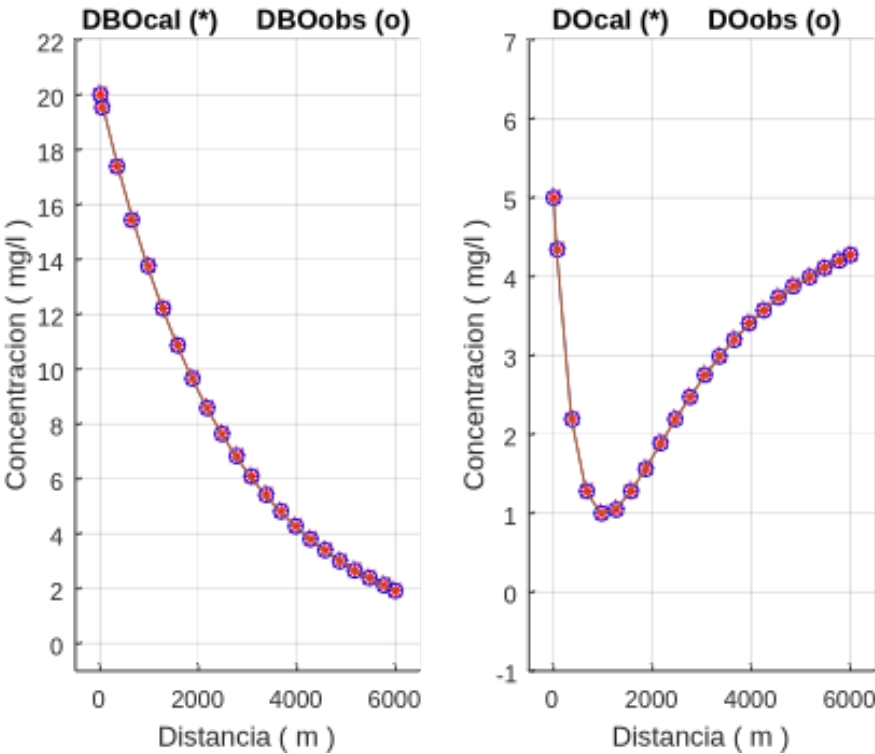


Figura 2.2. Gráficas de la DBO y del OD.

Tabla 2.2. Parámetros físicos y geométricos del río Luyanó (Morales Castillo, 2025)

Tramo	No	Estación/Tributario	km	q (m ³ /s)	A (m ²)	U (m/s)	b	H
1	E1	Traspatio de la Escuela	0	0,32	1,83	0,17	4,17	0,44
	T1	Arroyo Luyanó	0,084	0,45	1,08	0,31	3,0	0,36
2	E2	Puente Calle Fé	0,245	0,45	1,897	0,24	5,27	0,36
	E3	Puente Calle Mayor	0,703	0,45	2,055	0,22	5,27	0,39
	E4	Puente Calzada de Luyanó	1,286	0,45	1,743	0,26	5,81	0,3
	E5	Puente Calle López	1,766	0,53	2,092	0,25	5,81	0,36

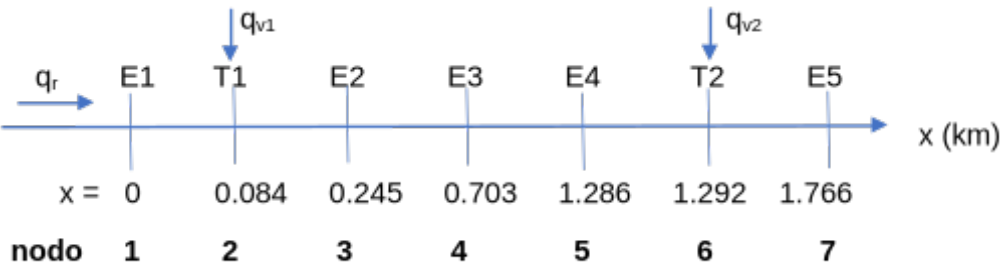


Figura 2.3. Esquema de la región de simulación de este ejemplo.

Tabla 2.3. Valores de la DBO y del OD del río Luyanó (Morales Castillo, 2025)

Tramo	No	Estación/Tributario	T (°C)	OD (mg/L)	DBO (mg/L)
1	E1	Traspatio de la Escuela	26,47	3,22	10,23
2	T1	Arroyo Luyanó	26,63	2,18	17,73
	E2	Puente Calle Fé	25,23	2,52	11,23
	E3	Puente Calle Mayor	24,67	2,18	14,03
	E4	Puente Calzada de Luyanó	25,57	1,71	15,23
3	T2	Colector Marginal	25,83	2,68	32,57
	E5	Puente Calle López	25,33	2,32	16,83

ficaron dos fuentes puntuales significativas: el arroyo Luyanó que confluye con el río Hondo en el km 0,084 y el Colector Marginal que recolecta las aguas residuales albañales del Reparto Juanelo y descarga sus aguas en el km 1,292, vendrían siendo estos puntos, los nodos 2 y 6 respectivamente, ver figura 2.3.

Datos del flujo y de la geometría del río: Debido a que en cada tramo del segmento del río el gasto que circula depende del gasto del río más la entrada del vertimiento, por lo que el gasto es variable, entonces se obtienen valores distintos de la velocidad y del área de la sección transversal de cada tramo según la ecuación de continuidad.

Datos de la temperatura: En la Tabla 2.3 se muestran los valores de la temperatura de cada tramo del segmento del río en estudio. Con estos valores de temperatura se evaluó la expresión del ajuste cubico que relaciona temperatura (T) con oxígeno disuelto saturado (OD_{sat}) que se da en el trabajo reportado por Morales Castillo (2025). Este ajuste cubico ya está incorporado en el algoritmo numérico del MEF implementado en el asistente MATLAB.

Datos de los parámetros a calibrar: En este ejemplo real no se disponen de los valores de los parámetros cinéticos y del coeficiente de dispersión, por lo tanto, se debe de esperar obtener, del resultado de la calibración, los valores de estos coeficientes. En un trabajo de investigación anterior desarrollado por Morales Castillo (2025) se consideró que la ecuación diferencial (1.1) de la DBO no tenía termino fuente y/o sumidero (W). En este trabajo se ha considerado incorporar un término fuente W a la ecuación diferencial (1.1) debido a que se demuestra la importancia de la presencia de este término para la calibración de los parámetros del modelo numérico. Estos dos términos simulan las entradas y/o salidas de la DBO y del OD a lo largo de cada subintervalo de la malla del río, lo cual tiene sentido físico real desde el punto de vista práctico. Estos dos términos fuentes son denotados en este trabajo como W_{dbo} y W_{do} .

En este ejemplo no se conocen los valores de los 3 parámetros cinéticos, K_1 , K_2 y K_3 , de los 2 coeficientes de dispersión D_{dbo} y D_{do} y de los 2 términos fuentes y/o sumideros W_{dbo} y W_{do} . Por lo tanto, estos son los 7 parámetros que hay que calibrar para cada subintervalo de la malla a partir de las mediciones de la DBO y del OD en dichos puntos. Se toman como observados o conocidos los valores de DBO y OD, además de los parámetros hidráulicos que se muestran en la Tabla 2.2 y en la Tabla 2.3. En la Tabla 2.4 se muestran los valores calibrados de los 3 parámetros cinéticos y en la Tabla 2.5 se muestran los valores calibrados de los 2 parámetros de dispersión y de los 2 parámetros fuentes. En la figura 2.4 se muestran los valores observados y los calibrados en las gráficas de la DBO y del OD.

Tabla 2.4. Resultados de la calibración de K_1 , K_2 y K_3

Parámetros	Tramo 1 (intervalo 1)	Tramo 2 (intervalos 2,3,4,5)	Tramo 3 (intervalo 6)
K_1 (1/día)	43,2	42,01	43,2
K_2 (1/día)	43,2	43,75	43,2
K_3 (1/día)	43,2	41,31	43,2
K_y (adim)	1	0,98334	1

En la Tabla 2.4 se observa que los valores obtenidos de la calibración de los 3 parámetros cinéticos son iguales

Tabla 2.5. Resultados de la calibración de D y W

Coeficiente	1	2	3	4	5	6
D_{dbo} (m^2/seg)	10	10,016	10,008	10	10,004	10
D_{do} (m^2/seg)	10	10,005	10,002	10	10,01	10
W_{dbo} (mg/L seg)	0	-0,04	$-8,35 \times 10^{-4}$	0,036	$2,57 \times 10^{-4}$	0
W_{do} (mg/L seg)	0	-0,014	$-1,82 \times 10^{-4}$	$-8,6 \times 10^{-4}$	$-4,24 \times 10^{-4}$	0

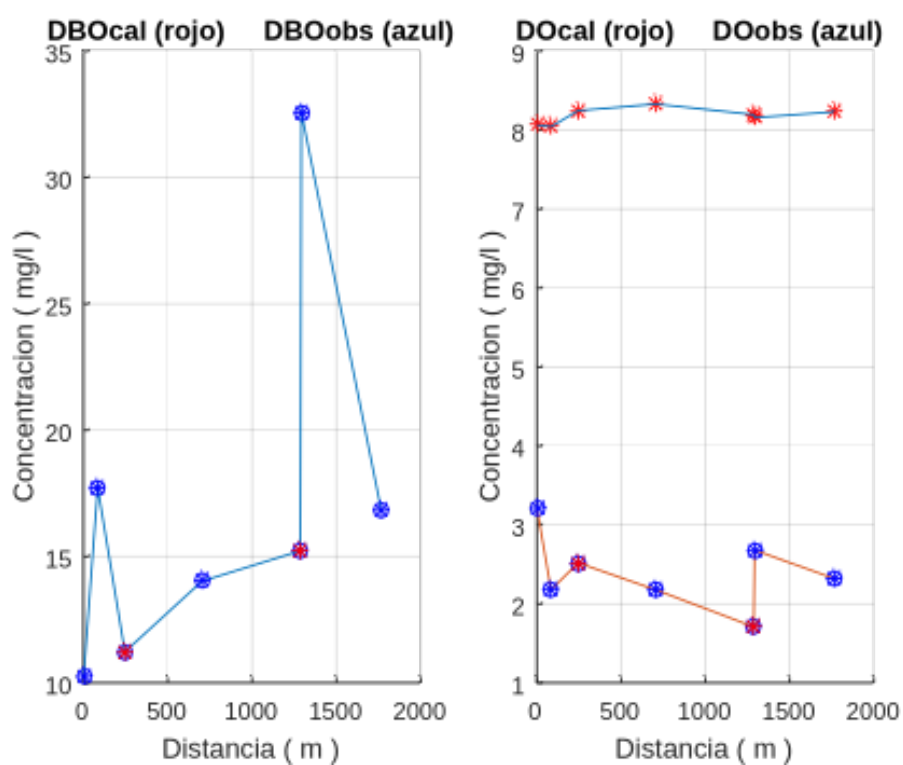


Figura 2.4. Resultados gráficos de la DBO y del OD.

en el primer y último subintervalo y las diferencias están en los 4 subintervalos del tramo 2 que incluye los subintervalos 2, 3, 4 y 5. Para estos 3 parámetros cinéticos las restricciones de cotas fue el intervalo $[0, 0,001]$ en $(1/\text{seg})$ y los resultados se muestran en la Tabla 2.4 en $(1/\text{día})$. El resultado de la última fila de dicha tabla corresponde con el coeficiente K_y que no se calibra, sino que es la división de K_3 entre K_1 y además representa el rendimiento del oxígeno, es decir, los litros de oxígeno que hacen falta para degradar 1 litro de la DBO.

Posteriormente se efectuaron otras corridas convirtiendo el tramo 2 en 4 subintervalos y los resultados fueron satisfactorios y similares a los obtenidos. También se efectuó una corrida considerando cada parámetro cinético, K_1 , K_2 y K_3 , constante en todos los 6 intervalos de la región obteniéndose los valores: $K_1 = 36,1$ $(1/\text{día})$, $K_2 = 43,2$ $(1/\text{día})$ y $K_3 = 36,6$ $(1/\text{día})$, donde en este caso particular el valor de la función objetivo fue $F_{Obj} = 6,2 \times 10^{-6}$ (mg/l) . Este resultado es muy importante ya que reduce el número total de los parámetros a calibrar en el algoritmo de optimización.

En las dos primeras filas de la Tabla 2.5 se observa que los valores calibrados de los 2 coeficientes de dispersión, de las ecuaciones (1.1) y (1.2), prácticamente son iguales y además muy próximos al valor de $10 \text{ m}^2/\text{seg}$. Esto hace pensar que para este ejemplo el coeficiente de dispersión es uno solo en ambas ecuaciones. Para ambos coeficientes de dispersión las restricciones de cotas fue el intervalo $[0, 20]$ en m^2/seg . Esto sugirió efectuar otras corridas considerando fijo los coeficientes de dispersión al valor $D_{dbo} = D_{do} = 10 \text{ m}^2/\text{seg}$ en ambas ecuaciones y los resultados fueron satisfactorios y muy similares a los obtenidos. Este resultado es muy importante también ya que reduce el número total de los parámetros a calibrar en el algoritmo de optimización.

En las dos últimas filas de la Tabla 2.5 se observa que los valores de los parámetros fuentes y/o sumideros son bastantes pequeños y en algunos casos son nulos. Para los términos fuentes las restricciones de cotas fue el intervalo $[-10, 10]$ en (mg/l seg) . Esto sugirió efectuar otras corridas considerando fijo el valor de los términos fuentes a los valores $W_{dbo} = W_{do} = 0$ en ambas ecuaciones, pero los resultados no fueron satisfactorios. Esto demuestra la importancia de considerar la presencia de los dos términos fuentes, W_{dbo} y W_{do} , en las dos ecuaciones diferenciales (1.1) y (1.2). Por otro lado, es importante también puntualizar que esto nos dice que los dos términos fuentes no se pueden considerar iguales, en ambas ecuaciones, ni tampoco constantes en toda la malla como ocurrió con los dos coeficientes de dispersión.

De la calibración se obtuvo que el valor de la función objetivo fue de $F_{Obj} = 6,5 \times 10^{-6}$ (mg/L) y los Máximos Errores Absolutos de ambas variables incógnitas fueron $\text{MaxErrAbs}_{DBO} = 1,3 \times 10^{-5}$ (mg/L) y $\text{MaxErrAbs}_{OD} = 3,8 \times 10^{-6}$ (mg/L) . Estos resultados demuestran que el ajuste debido a la calibración fue satisfactorio. Es bueno recordar que solo se tomaron dos nodos para el proceso de la calibración, que son los nodos 2 y 6, lo cual señala que aun con pocos puntos de mediciones es posible poder calibrar los parámetros y obtener un buen ajuste.

Las aproximaciones demuestran que las gráficas son capaces de representar de forma satisfactoria el mismo comportamiento que ocurre en la realidad. La línea roja que aparece en la gráfica del OD representa el comportamiento del oxígeno disuelto saturado OD_{sat} conforme a la variación de las temperaturas según los subintervalos de la malla. El valor de la función objetivo fue de $F_{Obj} = 7,4552 \times 10^{-6}$ (mg/L) , lo que conlleva a decir que el algoritmo ha convergido a una solución óptima.

03 CONCLUSIONES

- El modelo numérico del MEF confeccionado demostró ser aplicable en ríos o canales con régimen permanente con o sin variación espacial de los distintos parámetros o coeficientes hidráulicos que intervienen, con múltiples tramos y con variaciones hidráulicas: caudal, velocidad, geometría y vertimientos. Permitió incorporar la dispersión (D) y el termino fuente y/o sumidero (W) para representar las situaciones más reales de la práctica.
- Mediante el acoplamiento del MEF con un algoritmo de optimización en MATLAB como el `fmincon`, se logró calibrar parámetros del modelo incluso con datos limitados, como en el ejemplo real del río Luyanó.
- La aplicación del modelo a un ejemplo real, evidenció su capacidad para ajustarse a datos observados o medidos en el terreno. Los resultados mostraron una correlación satisfactoria entre los valores simulados y los medidos, validando la utilidad del modelo para predecir la evolución de la DBO y el OD en cuerpos

de agua superficiales.

04 RECOMENDACIONES

- Extender la aplicación del modelo numérico desarrollado a muchos más ríos de Cuba y así predecir las posibles afectaciones en los ríos, consecuencia de los vertimientos de contaminantes que afectan la calidad de estos.
- Se recomienda desarrollar una versión del modelo que considere variaciones temporales en régimen impermanente en dependencia de las campañas de mediciones.

05 REFERENCIAS

- Benjumea Hoyos, C. A.** (2018). Determinación de coeficientes de degradación de materia orgánica en el río Negro (municipio de Rionegro, Colombia). *Revista Bionatura*, 3(1), 10. <https://doi.org/10.21931/RB/2018.03.01.10>
- Chaparro, E.** (2020). *Determinación de la capacidad de autodepuración de un tramo del río Tunjuelo respecto al pH y la Demanda Biológica (DBO)* [Trabajo de grado].
- Escobar Verbel, M.** (2021). *Modelación Hidrodinámica y de la Calidad del Agua para evaluar la capacidad de asimilación de vertimientos del río Sinú* [Trabajo de grado]. Universidad de Córdoba, Facultad de Ingenierías, Ingeniería Ambiental.
- Marón Domínguez, D. E.** (2001). *Aplicación del M.E.F. y del M.D.F. en modelos de flujo y de transporte de contaminantes con densidad constante o variable en medios porosos saturados* [Tesis doctoral]. Instituto Superior Politécnico “José Antonio Echeverría”.
- Martín-Monerris, M., & Marzal-Doménech, P.** (2010). *Modelación de la calidad del agua*. Universidad Politécnica de Valencia.
- Morales Castillo, M. d. C.** (2025). Calibración con MATLAB de un modelo numérico de la depuración natural de ríos [Publicación continua]. *Revista de Ciencias Químicas del CENIC*, 56, 135-146.
- Pestana, A. J.** (2016). *Propuesta de Análisis de un modelo matemático para la determinación de la calidad del agua de las aguas superficiales*.
- Streeter, H. W., & Phelps, E. B.** (1925). A study of the pollution and natural purification of the Ohio river. *Public Health Bulletin*.
- Szymkiewicz, R.** (2010). *Numerical Modeling in Open Channel Hydraulics*. Springer.
- Velázquez, R. M.** (2013). *Modelos Matemáticos de Calidad del Agua en Lagos y Embalses*. División de Ingenierías Civil y Geomática.

Conflicto de intereses

Los autores declaran que no existen conflictos de intereses.

Contribución de los autores

David Ernesto Marón Domínguez <https://orcid.org/0000-0003-4198-9962>

Participó en el diseño de la investigación, análisis de los resultados, en las contribuciones de la interpretación de los datos y también participó en la revisión del documento.

Dayana Lugones Rodríguez <https://orcid.org/0009-0001-7716-9707>

Organizó tablas, gráficos y también participó en la revisión del documento.

Tania Herrera Achón <https://orcid.org/0000-0003-1483-9221>

Realizó la revisión final del documento, y en la organización de las referencias bibliográficas.

Teresita de Jesús Romero López <https://orcid.org/0000-0001-9572-8333>

Participó en el análisis de los resultados y en las contribuciones de la interpretación de los datos.