

TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL CON FLUJO LATERAL Y
ALMACENAMIENTO (OTIS, ONE-DIMENSIONAL TRANSPORT
WITH INFLOW AND STORAGE): UN MODELO DE TRANSPORTE
DE SOLUTOS PARA ARROYOS Y RÍOS

U.S. GEOLOGICAL SURVEY

Water-Resources Investigations Report 98 – 4018

TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL CON FLUJO LATERAL Y ALMACENAMIENTO (OTIS, ONE- DIMENSIONAL TRANSPORT WITH INFLOW AND STORAGE): UN MODELO DE TRANSPORTE DE SOLUTOS PARA ARROYOS Y RÍOS

Por Robert L. Runkel

El manual de OTIS ha sido traducido, de forma desinteresada, del inglés al español por José Antonio Cuchí-Oterino (cuchi@unizar.es). Escuela Politécnica Superior de Huesca, Huesca. España) y por Luis Camacho-Botero (Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. Colombia). Es altamente apreciado su generoso esfuerzo.

U.S. GEOLOGICAL SURVEY

Water-Resources Investigations Report 98–4018

Denver, Colorado
1998

U.S. DEPARTMENT OF THE INTERIOR

BRUCE BABBITT, Secretary

U.S. GEOLOGICAL SURVEY

Thomas J. Casadevall, Acting Director

El uso de nombres comerciales, productos, industrias o compañías se hace por razones descriptivas y no implica promoción por el gobierno de los Estados Unidos de América.

Para información adicional escribir a: Copias de este informe pueden ser compradas en:

District Chief
U.S. Geological Survey
Box 25046, MS 415
Denver Federal Center
Denver, CO 80225

U.S. Geological Survey
Information Services
Box 25286, MS 517
Denver Federal Center
Denver, CO 80225

INDICE

Resúmen	1
1.0 Introducción	2
1.1 Mejoras del modelo	2
1.2 Organización del informe	3
1.3 Agradecimientos	3
2.0 Teoría	4
2.1 Fundamentos - Modelos de almacenamiento transitorio	4
2.2 Ecuaciones diferenciales rectoras	5
2.2.1 Procesos considerados / Supuestos del modelo	5
2.2.2 Ecuaciones de variable temporal	6
2.2.3 Ecuaciones de estado estacionario	7
2.3 El sistema conceptual	8
2.4 Soluciones numéricas - Ecuaciones en variable temporal	8
2.4.1 Diferencias finitas	8
2.4.2 Método Crank-Nicolson	10
2.4.3 Concentración de soluto en el canal principal	10
2.4.4 Concentraciones en la zona de almacenamiento y en el sedimento del lecho	12
2.4.5 Desacoplando las ecuaciones del canal principal, zona de almacenamiento y sedimento del lecho fluvial	13
2.5 Soluciones numéricas- Ecuaciones en estado estacionario	14
2.6 Condiciones de frontera (contorno)	15
2.6.1 Condición de frontera (contorno) aguas arriba	15
2.6.2 Condición de frontera (contorno) aguas abajo	15
2.7 Estimación de parámetros	16
3.0 Guía del usuario	20
3.1 Aplicabilidad	20
3.2 Características del modelo	20
3.2.1 Modos de simulación: dinámico y estado-estacionario	20
3.2.2 Solutos conservativos y no-conservativos	21
3.2.3 Regímenes de flujo	21
3.2.4 Estimación de parámetros utilizando OTIS-P	22
3.3 Revisión del sistema conceptual	22
3.4 Estructura de entrada/salida	24
3.4.1 OTIS	24
3.4.2 OTIS-P	25
3.5 Formato de entrada	26
3.5.1 Unidades	26
3.5.2 Comentarios internos	27
3.5.3 El fichero de control.....	27
3.5.4 El fichero de parámetros	29
3.5.5 Fichero de flujo	35
3.5.6 Fichero de datos (OTIS-P únicamente).....	40
3.5.7 El fichero de entrada STARPAC (OTIS-P únicamente).....	41
3.6 Ejecución del modelo	44
3.6.1 OTIS	44
3.6.2 OTIS-P	44
3.7 Análisis de resultados	45
3.7.1 Los ficheros de salida de solutos y sorción.....	45
3.7.2 El post-procesador	46
3.7.3 Alternativas de graficación (ploteado).....	47

4.0 Aplicaciones del modelo	48
4.1 Aplicación 1: Transporte conservativo (OTIS).....	48
4.2 Aplicación 2: Transporte con sorción Kd (OTIS)	52
4.3 Aplicación 3: Transporte con decaimiento de primer orden (OTIS)	54
4.4 Aplicación 4: Transporte conservativo con flujo inestable (OTIS)	55
4.5 Aplicación 5: Condición de frontera continua y estimación de parámetros (OTIS-P).....	57
4.6 Aplicación 6: Simulación de estado estacionario y estimación de parámetros (OTIS-P)	61
5.0 Guía de Software	65
5.1 Plataformas soportadas	65
5.2 Distribución del Software	65
5.3 Instalación.....	67
5.4 Compilación.....	68
5.5 Visión general del Software.....	69
5.5.1 Desarrollo del Modelo	69
5.5.2 Ficheros Include	69
5.5.3 Búsqueda de errores.....	71
Referencias	72

FIGURAS

1. Mecanismos de almacenamiento transitorio.....	4
2. Modelo conceptual que incluye el canal principal y la zona de almacenamiento	5
3. Sistema conceptual subdivido en un número dado de segmentos discretos (volúmenes de control)	9
4. Esquema de segmentación usado para la implementación de la solución numérica	9
5. Condición de frontera aguas arriba, definida en términos de una concentración fija	15
6. Condición de frontera aguas abajo definida en términos de un flujo dispersivo fijo	16
7. Procedimiento de estimación iterativa de parámetros	19
8. Sistema conceptual que incluye uno o mas tramos	23
9. El primer tramo en el sistema conceptual y las variables de entrada (input) requeridas	24
10. OTIS Ficheros de entrada/salida (Input/Output).....	25
11. OTIS-P Ficheros de entrada/salida (Input/Output)	26
12. Condiciones de frontera agua arriba	36
13. Ejemplo de fichero de salida de solutos para una simulación variable en el tiempo	46
14. Fichero de control para la Aplicación 1	49
15. Fichero de parámetro para la aplicación 1	50
16. Fichero de estado estacionario para la aplicación 1.....	51
17. Concentraciones de cloruro simuladas y observadas a 105 y 433 metros	51
18. Listado parcial del fichero de parámetros para la aplicación 2.....	52
19. Concentraciones simuladas y observadas de estroncio a 38 y 281 metros	53
20. Estroncio sorbido simulado en los 5 puntos de impresión	53
21. Listado parcial del fichero de parámetros para la Aplicación 3.....	54
22. Las OTIS resultantes comparan con una solución analítica	55
23. Fichero de flujo inestable para la Aplicación 4.....	56
24. Concentraciones simuladas y observadas de litio, a 457 metros	57
25. Fichero de control para la Aplicación 5.....	58
26. Listado parcial del fichero de datos para la Aplicación 5	59
27. Fichero de entrada STARPAC para la Aplicación 5	60
28. Condición de frontera, aguas arriba, (milla del río 11.0) y concentraciones simuladas y observadas en las millas del río 9.5 y 8.0.	62
29. Perfil espacial de la concentración de hierro disuelto en St. Kevin Gulch	63
30. Listado parcial del fichero de datos para la Aplicación 6	64
31. Estructura de directorios de OTIS/OTIS-P	67

TABLAS

1. Especificación por parte del usuario del régimen hidrológico de flujo.....	22
2. El fichero de control de OTIS	28
3. El fichero de control de OTIS-P.....	28
4. El fichero de parámetros - registro tipos 1-9.....	30
5. El fichero de parámetros - registro tipo 10.....	31
6. El fichero de parámetros - registro tipo 11.....	31
7. El fichero de parámetros - registro tipo 12.....	32
8. El fichero de parámetros - registro tipo 13.....	33
9. El fichero de parámetros - registro tipos 14-15.....	34
10. El fichero de parámetros - registro tipo 16.....	34
11. El fichero de parámetros - registro tipo 17, Condiciones de frontera agua arriba	35
12. Fichero de flujo estacionario - registro tipo 1	37
13. Fichero de flujo estacionario - registro tipo 2	37
14. Fichero de flujo estacionario - registro tipo 3	38
15. Fichero de estado no estacionario - registro tipo 1	38
16. Fichero de estado no estacionario - registro tipos 2 y 3.....	39
17. Fichero de estado no estacionario - registro tipos 4-7	40
18. El fichero de datos - registro tipo 1	40
19. El fichero de datos - registro tipo 2 (Simulaciones en estado estacionario)	41
20. El fichero de datos - registro tipo 2 (Simulaciones variables en el tiempo).....	41
21. El fichero de entrada STARPAC - registros tipo 1-7.....	42
22. El fichero de entrada STARPAC - registro tipo 8	43
23. Estimación de parámetros para el tramo 2.....	61
24. Sistemas soportados.....	65
25. Ficheros a descargar para sistemas Unix y Windows	66
26. Ambientes de desarrollo específico	69
27. Máximas dimensiones y valores por defecto de fmodules.inc.....	70
28. Máximas dimensiones y valores por defecto para fmodules2.inc (solo OTIS-P).....	70

Transporte unidimensional con flujo lateral y almacenamiento (OTIS, One-Dimensional Transport with Inflow and Storage): Un modelo de transporte de solutos para arroyos y ríos

Por Robert L. Runkel

El manual de OTIS ha sido traducido, de forma desinteresada, del inglés al español por José Antonio Cuchi-Oterino (cuchi@unizar.es). Escuela Politécnica Superior de Huesca, Huesca. España) y por Luis Camacho-Botero (Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. Colombia). Es altamente apreciado su generoso esfuerzo.

Resumen

OTIS es un modelo de simulación matemática utilizado para caracterizar la evolución y transporte de solutos transportados por agua en arroyos y ríos. La ecuación básica que sostiene el modelo es la ecuación de advección-dispersión con términos adicionales para considerar el almacenamiento transitorio, el flujo lateral, la descomposición de primer orden y la sorción. Esta ecuación y las ecuaciones asociadas para describir el almacenamiento transitorio y la sorción se resuelven utilizando una solución Crack-Nicolson por diferencias finitas.

OTIS puede ser usado junto con datos de experimentos de campo con trazadores para cuantificar los parámetros hidrológicos que afectan al transporte de solutos. Esta aplicación habitualmente implica una aproximación por tanteo y error en donde los parámetros estimados son ajustados para obtener una aceptable concordancia entre las concentraciones de trazador simuladas y observadas. Aplicaciones adicionales incluyen el análisis de solutos no conservativos que están sujetos a procesos de sorción y de decaimiento. OTIS-P, una versión modificada de OTIS, combina la solución de la ecuación básica con un programa de regresión no lineal. OTIS P determina un conjunto óptimo de estimaciones de parámetros que minimiza el cuadrado de las diferencias entre las concentraciones observadas y estimadas automatizando, de este modo, el proceso de estimación de parámetros.

Este informe detalla el desarrollo y aplicación de OTIS y OTIS-P. Secciones del mismo describen la teoría del modelo, especificaciones de input/output, modelos de aplicaciones e instrucciones de instalación.

1.0 INTRODUCCIÓN

Este informe describe el desarrollo y uso de un modelo de transporte de solutos incorporando, transporte unidimensional, flujo lateral y almacenamiento (OTIS, del inglés One dimensional Transport with Inflow and Storage). El modelo OTIS de transporte de solutos fue originalmente documentado por Runkel y Broshears (1991). El presente documento reemplaza dicho trabajo. Toda la información relevante contenida en el trabajo de Runkel y Broshears (1991) ha sido actualizada e incluida en este informe, con la excepción de los apéndices A-D que están ahora disponibles en <http://co.water.usgs.gov/otis>.

1.1 Mejoras del modelo

Varios aspectos y opciones han sido añadidos al modelo OTIS de transporte de solutos desde la aparición del trabajo original descrito por Runkel y Broshears (1991). A continuación se incluye un breve resumen de las mejoras introducidas en el modelo.

- **Algoritmos de sorción.** El modelo original se desarrolló inicialmente para solutos conservativos, como los trazadores, que no están sujetos a transformaciones químicas y/o biológicas. El comportamiento no conservativo se modelaba a través de la especificación de un decaimiento de primer orden o de la velocidad de producción. El modelo incluye ahora un mecanismo por medio del cual se puede considerar la sorción sobre el lecho del cauce. Los algoritmos de la cinética de la sorción, basados en el trabajo de Bencala (1983), se describen en la sección 2.2.
- **Estimación automática de parámetros.** El modelo OTIS se usa típicamente en conjunto con datos de dilución de trazadores con el fin de estimar los parámetros que caracterizan la hidrodinámica de la corriente. La estimación de parámetros se ha hecho, de forma tradicional, por un procedimiento de tanteo y error, en el cual los parámetros del modelo se ajustan manualmente mediante una serie de simulaciones hasta obtener un ajuste aceptable entre los valores simulados y observados. OTIS-P es una versión modificada de OTIS que permite la estimación automatizada de parámetros usando técnicas de regresión no lineal. (Sección 2.7).
- **Respuesta en Estado Estacionario.** Como se describe en la sección 3.7.1, para cada segmento en el sistema modelado ahora se proporciona la respuesta en estado estacionario.
- **Opciones de condiciones de frontera.** El modelo proporciona ahora tres opciones para la especificación de la condición de frontera aguas arriba: (a) Como un pulso de duración finita de concentración. (b) Como un pulso de duración finita de flujo de masa. (c) Como una señal continua de concentración. Estas opciones se describen en la sección 3.5.4.
- **Opción de interpolación.** Los usuarios pueden solicitar generación de resultados en cualquier punto dentro del sistema modelado. En el modelo original, la concentración para cada “punto a imprimir” especificado por el usuario, se determinaba mediante interpolación. El usuario tiene ahora la opción de fijar la concentración en un punto de impresión dado igual a la concentración del segmento más cercano de aguas arriba (Sección 3.5.4).
- **Documentación para el fichero de entrada.** Los usuarios del modelo pueden incluir ahora comentarios en los ficheros de entrada de OTIS con el fin de documentar su trabajo. Cualquier registro de entrada antecedido en la columna 1 con un # será tratado como un comentario y no tenido en cuenta por las subrutinas de entrada (Sección 3.5.2).
- **Cambios diversos en entradas/salidas.** Dos cambios relacionados con las entradas/salidas del modelo incluyen un nuevo formato de entrada para las velocidades de decaimiento de primer orden (Sección 3.5.4), y la eliminación de la opción de procesamiento múltiple (Sección 3.5.3).

1.2 Organización del informe

A continuación se describen las restantes secciones del informe. La sección 2.0 proporciona una descripción de las bases teóricas que soportan el modelo de transporte de solutos. Esta sección incluye descripciones de los procesos simulados, las ecuaciones diferenciales gobernantes y los métodos numéricos usados dentro del modelo. La sección 3.0, una Guía del Usuario, presenta los requerimientos de entrada (input) y salida (output) del programa en Fortran. En esta sección se detallan los parámetros del modelo, opciones de impresión y variables de control de la simulación. La sección 4.0 presenta varias aplicaciones del modelo e incluye ejemplos de ficheros de entrada y salida. La sección final, una Guía de Software, (sección 5.0) describe como obtener el modelo, procedimientos de instalación del mismo y varios aspectos de la programación.

1.3 Agradecimientos

Muchos de los conceptos y técnicas que fundamentan el modelo de transporte de solutos OTIS están basados en el trabajo pionero de Ken Bencala del U.S. Geological Survey (USGS). El autor también reconoce la guía y visión de Bob Broshears y Briant Kimball (USGS) y Diane McKnight (University of Colorado, Boulder). Igualmente, las discusiones con Jud Harvey y Brian Wagner (USGS), Alan Jackman (University of California, Davis), y Janet Rogers (National Institute of Standards and Technology, U.S. Department of Commerce) llevaron al desarrollo de OTIS-P. Zac Vohs (USGS) colaboró en el desarrollo y distribución de los programas de computador.

2.0 TEORIA

2.1 Fundamentos - Modelos de almacenamiento transitorio

El modelo aquí escrito se basa en un modelo de almacenamiento transitorio presentado por Bencala y Walters (1983). Por almacenamiento transitorio se entiende la detención temporal de solutos en pequeños remolinos y bolsas estancadas de agua, que permanecen relativamente estacionarios frente al movimiento más rápido de las aguas cerca del centro del canal (fig. 1a). Además, porciones significantes del flujo pueden moverse a través de la grava gruesa del lecho de la corriente y las áreas porosas dentro de las orillas. (fig. 1b). El tiempo de viaje para los solutos transportados a través de estas áreas porosas puede ser significativamente mas largo que el de aquellos que viajan dentro de la columna de agua. Estas bolsas de agua y las áreas porosas del lecho son las dos zonas que contribuyen al almacenamiento transitorio, como se muestra en la figura 1.

Mecanismos de almacenamiento transitorio

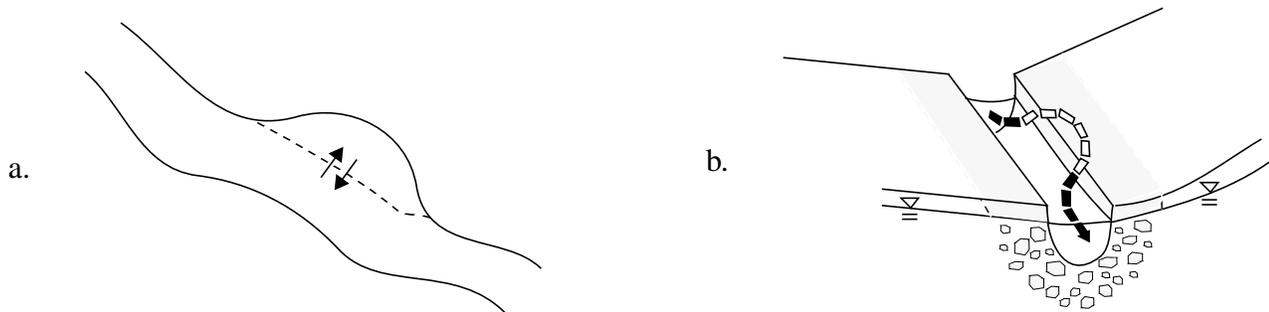


Figura 1. Mecanismos de almacenamiento transitorio. El almacenamiento transitorio sucede (a) cuando los solutos entran en pequeñas bolsas de agua que se mueven lentamente y (b) cuando los solutos dejan el canal principal y entran en el medio poroso que forma el lecho y las orillas del canal. Las flechas indican el movimiento de soluto entre el canal principal y la zona de almacenamiento transitorio (adaptado de Runkel y Bencala, 1995).

El modelo se forma escribiendo las ecuaciones de balance de masas para las dos áreas conceptuales: el canal principal y la zona de almacenamiento. Como canal principal se define aquella parte de la corriente en la cual los mecanismos de transporte dominantes son la advección y la dispersión. Por zona de almacenamiento se entiende la porción de la corriente que contribuye al almacenamiento transitorio (bolsas de agua estancada y áreas porosas del lecho fig. 1).

La figura 2 describe los procesos que afectan a la concentración de solutos en el canal principal y en la zona de almacenamiento. Dentro del canal principal, los solutos son transportados aguas abajo, por advección y dispersión. Advección y dispersión no están incluidos en la zona de almacenamiento, donde el transporte aguas abajo es despreciable. El flujo lateral representa el agua adicional que entra al canal principal como flujo superficial, flujo subsuperficial y descarga de agua subterránea. El flujo lateral saliente representa el agua que sale del canal principal hacia la cuenca circundante. El canal principal y la zona de almacenamiento están relacionadas a través del proceso de almacenamiento transitorio; el intercambio de masa de soluto entre el canal principal y la zona de almacenamiento atribuible al

almacenamiento transitorio se modela como un proceso de transferencia de masa de primer orden. Las reacciones químicas se producen dentro del canal principal y de la zona de almacenamiento.

Modelo conceptual: Canal Principal y Zona de almacenamiento

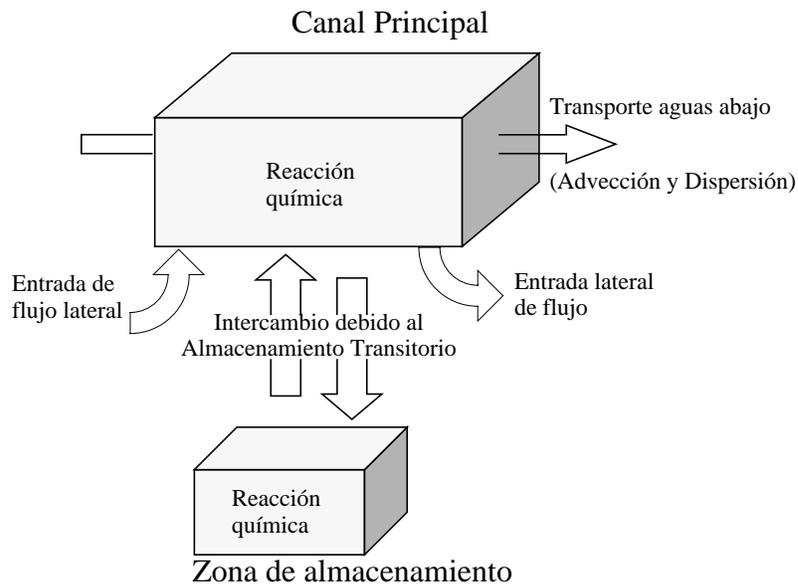


Figura 2. Modelo conceptual que incluye el canal principal y la zona de almacenamiento.

Descripciones adicionales sobre el almacenamiento transitorio se encuentran en Thackston y Krenkel (1967), Thackston y Schnelle (1970), Valentine y Wood(1977), Nordin y Troutman (1980), Jackman y otros (1984), Rutherford (1994), y Harvey y otros (1996). Una representación matemática del almacenamiento transitorio se presenta en la siguiente sección.

2.2 Ecuaciones diferenciales rectoras

2.2.1 Procesos considerados / Supuestos del modelo

Las ecuaciones que sustentan el modelo OTIS de transporte de solutos se presentan en la sección que sigue. Estas ecuaciones fueron originalmente presentadas por Bencala (1983), Bencala y Walters (1983), y Runkel y Broshears(1991). Una detallada derivación se presenta en el Apéndice A de Runkel y Broshears (1991). El supuesto básico utilizado dentro de la derivación es que la concentración de soluto solo varía en la dirección longitudinal (es decir que la concentración no varía con la profundidad o la anchura), A partir de este supuesto, las ecuaciones de desarrollan para un sistema unidimensional que consiste en una serie de segmentos de corriente (volúmenes de control). Cada segmento incluye el canal principal y la zona de almacenamiento, dos áreas conceptuales en las que se conserva la masa. A continuación se resumen los supuestos adicionales del modelo.

Canal principal - Supuestos del modelo

- Los procesos físicos que afectan a la concentración de solutos incluyen advección, dispersión, entrada de flujo lateral, salida de flujo lateral y almacenamiento transitorio.
- Las reacciones químicas que afectan a la concentración de soluto incluyen la sorción sobre el lecho y descomposición de primer orden.
- Todos los parámetros del modelo que describen procesos físicos y reacciones químicas pueden cambiar en el espacio.
- Los parámetros del modelo que describen la advección y la entrada de flujo lateral pueden variar en el tiempo. Estos parámetros incluyen la variación de flujo volumétrico (caudal), el área de la sección transversal del canal principal, la velocidad del flujo de entrada lateral y la concentración de soluto asociada con el flujo de entrada lateral. Los restantes parámetros del modelo son constantes en el tiempo.

Zona de almacenamiento. Suposiciones del modelo

- En la zona de almacenamiento no hay advección, dispersión, flujo de entrada lateral ni flujo de salida lateral. El único proceso que afecta a las concentraciones de soluto es el almacenamiento transitorio.
- Las reacciones químicas que afectan a las concentraciones de soluto incluyen la sorción y la descomposición de primer orden.
- Todos los parámetros del modelo que describen el almacenamiento transitorio y las reacciones químicas pueden ser variables en el espacio.
- Todos los parámetros del modelo que describen el almacenamiento transitorio y las reacciones químicas son constantes en el tiempo.

2.2.2 Ecuaciones de variable temporal

La consideración de los procesos físicos descritos en la sección 2.2.1 da lugar a un conjunto acoplado de ecuaciones diferenciales para el canal principal y la zona de almacenamiento. (Runkel y Broshears, 1991):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{Q}{A}\frac{\partial C}{\partial x} + \frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(AD\frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{q_{LIN}}{A}(C_L - C) + \alpha(C_S - C) \quad (1)$$

$$\frac{dC_S}{dt} = \alpha\frac{A}{A_S}(C - C_S) \quad (2)$$

donde¹

A	- área de la sección transversal del canal principal [L ²]
A_S	- área de la sección transversal de la zona de almacenamiento [L ²]
C	- concentración de soluto en el canal principal [M/L ³]
C_L	- concentración de soluto en el flujo lateral de entrada lateral [M/L ³]
C_S	- concentración de soluto en la zona de almacenamiento [M/L ³]
D	- coeficiente de dispersión [L ² /T]
Q	- variación de flujo volumétrico (caudal) [L ³ /T]
q_{LIN}	- variación del flujo de entrada lateral [L ³ /T-L]
t	- tiempo [T]
x	- distancia [L]
α	- coeficiente de cambio de la zona de almacenamiento [1/T]

¹Las unidades fundamentales de Masa [M], Longitud [L], y Tiempo [T] se usan a través de esta sección. Otras unidades específicas se introducen en la Sección 3.0.

Estas ecuaciones describen los procesos físicos que afectan a los solutos en el sistema acuático y por lo tanto son aplicables a solutos conservativos (no reactivos), como los trazadores. Los solutos no conservativos (reactivos) pueden ser considerados añadiendo términos a las ecuaciones (1) y (2). Aquí consideramos dos tipos de reacciones químicas: cinética de sorción y descomposición de primer orden. La sorción puede tener lugar directamente en el lecho del cauce o dentro de la zona de almacenamiento. La adición de términos representando la sorción y la descomposición produce:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \mathcal{L}(C) + \rho \hat{\lambda}(C_{sed} - K_d C) - \lambda C \quad (3)$$

$$\frac{dC_s}{dt} = S(C_s) + \hat{\lambda}_s(\hat{C}_s - C_s) - \lambda_s C_s \quad (4)$$

donde

\hat{C}_s - concentración base de soluto en la zona de almacenamiento [M/L³]

C_{sed} - concentración de sorbato sobre el sedimento del lecho [M/M]

K_d - coeficiente de distribución (partición) [L³/M]

λ - coeficiente de descomposición de primer orden en el canal principal [1/T]

λ_s - coeficiente de descomposición de primer orden en la zona de almacenamiento [1/T]

$\hat{\lambda}$ - coeficiente de velocidad de sorción en el canal principal [1/T]

$\hat{\lambda}_s$ - coeficiente de velocidad de sorción en la zona de almacenamiento [1/T]

ρ - masa de sedimento accesible/volumen de agua [M/L³]

y $\mathcal{L}(C)$ y $S(C_s)$ representan los procesos físicos en el canal principal y la zona de almacenamiento, respectivamente [el lado derecho de las ecuaciones (1) y (2)]. Los parámetros de sorción introducidos aquí (\hat{C}_s , K_d , $\hat{\lambda}$, $\hat{\lambda}_s$ y ρ) se discuten en detalle en Bencala (1983). La ecuación (3) introduce C_{sed} , una tercera variable de concentración para la cual se requiere un balance de masas. La concentración de sedimento del lecho (concentración de sorbato) está regida por:

$$\frac{dC_{sed}}{dt} = \hat{\lambda}(K_d C - C_{sed}) \quad (5)$$

Para resolver las ecuaciones (3)-(5) en el caso general donde los parámetros varían en el tiempo y el espacio, deben emplearse técnicas de solución numéricas. Las técnicas numéricas para la resolución de ecuaciones de variable temporal son el tema de la sección 2.4.

2.2.3 Ecuaciones de estado estacionario

Las ecuaciones diferenciales rectoras y las correspondientes técnicas de solución numérica pueden simplificarse si se desea una solución en estado estacionario. Se producen condiciones de estado estacionario cuando los parámetros del modelo, variables de flujo y condiciones de frontera (contorno) (sección 2.6) se mantienen constantes por un periodo indefinido de tiempo. Bajo estas condiciones, el sistema alcanza un estado de equilibrio en el cual las concentraciones no cambian con el tiempo.

Igualando a cero los términos de cambio de concentración ($\partial C/\partial t$, dC_S/dt , y dC_{sed}/dt), las ecuaciones (3)-(5) se convierten en:

$$0 = \mathcal{L}(C) + \rho \hat{\lambda}(C_{sed} - K_d C) - \lambda C \quad (6)$$

$$0 = S(C_S) + \hat{\lambda}_S(\hat{C}_S - C_S) - \lambda_S C_S \quad (7)$$

$$0 = \hat{\lambda}(K_d C - C_{sed}) \quad (8)$$

Las ecuaciones (7) y (8) se resuelven ahora para las concentraciones en la zona de almacenamiento y en el lecho del cauce, proporcionando:

$$C_S = \frac{\alpha A C + \hat{\lambda}_S A_S \hat{C}_S}{\alpha A + \lambda_S A_S + \hat{\lambda}_S A_S} \quad (9)$$

$$C_{sed} = K_d C \quad (10)$$

La ecuación rectora en estado estacionario para el canal principal [ecuación (6)] es resuelta numéricamente, como se discute en la sección 2.5.

2.3 El sistema conceptual

Para implementar un esquema de solución numérica, definimos primero el sistema físico. La figura 3 describe un sistema idealizado en el cual la corriente se subdivide en un número de segmentos discretos. Cada uno de estos segmentos representa un volumen de control dentro del cual se conserva la masa. Por ello, las ecuaciones (3)-(5) se aplican a cada segmento dentro del sistema modelado.

La figura 4 muestra tres segmentos arbitrarios del sistema conceptual representados en la figura 3. Bajo este esquema de segmentación, los subíndices i , $i-1$, e $i+1$ denotan las concentraciones y parámetros en el centro de cada segmento, mientras que los subíndices $(i-1, i)$ e $(i, i+1)$ definen los valores en la interfaz entre segmentos. La longitud de cada segmento, Δx , se introduce también en la figura. Estas definiciones se usan en la sección 2.4.

2.4 Soluciones numéricas - Ecuaciones en variable temporal

2.4.1 Diferencias finitas

Debido a la presencia de derivadas temporales y espaciales, la ecuación (3) es una ecuación en derivadas parciales (EDP). Un método común para resolver EDPs es aproximar las derivadas espaciales, $\partial/\partial x$, usando diferencias finitas. Entonces pueden implementarse métodos estandarizados (por ejemplo Método de Euler, Runge Kutta, Crank-Nicolson).

Sistema conceptual

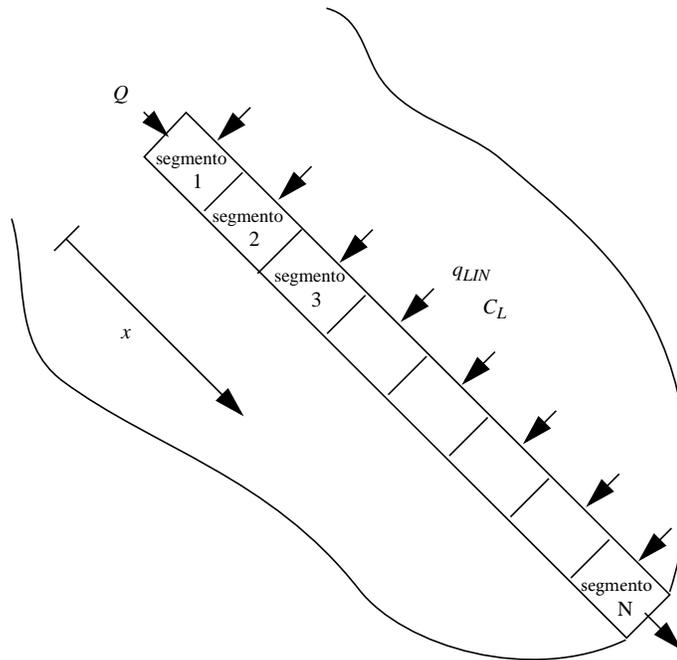


Figura 3. Sistema conceptual subdivido en un número dado de segmentos discretos (volúmenes de control).

Esquema de segmentación

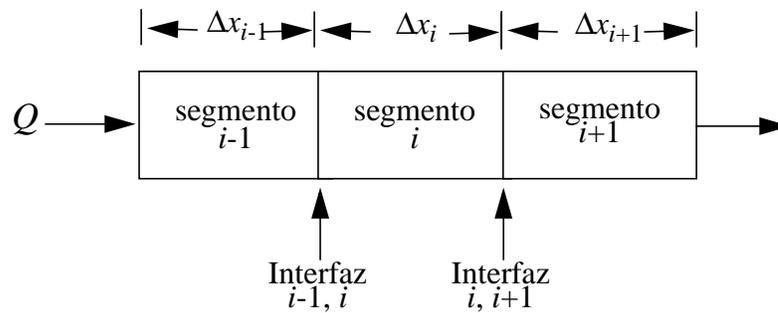


Figura 4. Esquema de segmentación usado para la implementación de la solución numérica.

Las aproximaciones en diferencias finitas utilizadas para las derivadas espaciales están desarrolladas en el apéndice B de Runkel y Broshears (1991). Usando estas aproximaciones, la ecuación (3) se transforma en:

$$\frac{dC}{dt} = L[C] + \frac{q_{LIN}}{A_i}(C_L - C_i) + \alpha(C_S - C_i) + \rho\hat{\lambda}(C_{sed} - K_d C_i) - \lambda C_i \quad (11)$$

donde $L[C]$ es la aproximación, en diferencias finitas, para los términos de advección y dispersión, dados por

$$L[C] = -\left(\frac{Q}{A}\right)_i \left(\frac{C_{i+1} - C_{i-1}}{2\Delta x}\right) + \frac{1}{A_i} \left\{ \frac{(AD)_{i,i+1}(C_{i+1} - C_i) - (AD)_{i-1,i}(C_i - C_{i-1})}{\Delta x^2} \right\} \quad (12)$$

Señalar que Δx y los subíndices i son como se definen en la sección 2.3 y la figura 4. Así mismo remarcar que la ecuación (12) se establece para el caso especial de segmentos de igual tamaño ($\Delta x_{i-1} = \Delta x_i = \Delta x_{i+1}$). Puede consultarse el Apéndice B de Runkel y Broshears (1991) para el caso general de segmentos de longitud variable.

2.4.2 Método Crank-Nicolson

Como se ha señalado en los párrafos precedentes, las ecuaciones diferenciales normales como (4), (5) y (11) pueden ser resueltas usando una variedad de técnicas. Estas técnicas pueden ser, en sentido amplio, agrupadas en métodos explícitos e implícitos. De forma resumida, los métodos explícitos proyectan una solución usando variables de la variable dependiente (por ejemplo la concentración del soluto) para el nivel actual de tiempo, mientras que los métodos implícitos usan valores tanto de niveles de tiempo actual como futuros. Para información adicional sobre técnicas de solución, implícitas y explícitas, el lector interesado puede consultar Chapra y Canale (1988).

Por razones de seguridad, eficiencia y estabilidad, se usa el método implícito Crank-Nicolson, dentro del modelo del soluto. Varias ventajas del método llevan a esta elección. Primero, el método Crank-Nicolson es seguro, en segundo orden, tanto en tiempo como en espacio (Chapra y Canale, 1988). Segundo, la naturaleza unidimensional del modelo lleva a la formación de una matriz tridimensional de coeficientes que puede ser resuelta usando un eficiente método LU de descomposición, el algoritmo de Thomas. Finalmente el método Crank-Nicolson es incondicionalmente estable; la solución no oscilará cuando se incremente el intervalo de tiempo.

Las dos secciones siguientes esbozan la aplicación de la aproximación Crank-Nicolson a las ecuaciones (4), (5), y (11). Un detallado desarrollo de la solución Crank-Nicolson se presenta en el apéndice C de Runkel y Broshears (1991).

2.4.3 Concentración de soluto en el canal principal

En el algoritmo Crank-Nicolson, el lado derecho de la ecuación (11) se evalúa tanto en tiempo actual (tiempo j) y en tiempo futuro (tiempo $j+1$). En adición, la derivada con respecto al tiempo dC/dt , se estima usando una aproximación en diferencias centradas:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\Delta t} \quad (13)$$

donde

- Δt - intervalo de tiempo de integración [T]
- j - indica el valor de un parámetro o variable en el tiempo actual
- $j+1$ - indica el valor de un parámetro o variable a tiempo avanzado

La ecuación (11) se convierte así en:

$$\frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\Delta t} = \frac{G[C, C_S, C_{sed}]^{j+1} + G[C, C_S, C_{sed}]^j}{2} \quad (14)$$

donde

$$G[C, C_S, C_{sed}] = L[C] + \frac{q_{LIN}}{A_i}(C_L - C_i) + \alpha(C_S - C_i) + \rho\hat{\lambda}(C_{sed} - K_d C_i) - \lambda C_i \quad (15)$$

Dado que la ecuación (14) envuelve las concentraciones de soluto en los segmentos vecinos en el nivel de tiempo avanzado (C_{i-1}, C_{i+1} a tiempo $j+1$), no es posible resolverla explícitamente para C_i^{j+1} (aquí tenemos un método implícito). Podemos, sin embargo, reagrupar la ecuación (14) de modo que todas las cantidades conocidas aparezcan en la parte derecha y todas las incógnitas aparezcan en la izquierda. Hay dos excepciones a esta reagrupación: las concentraciones en la zona de almacenamiento y en el sedimento del lecho al nivel de tiempo avanzado (C_S^{j+1}, C_{sed}^{j+1}) son incógnitas y permanecen en el lado derecho. Estas excepciones se discuten en la sección 2.4.5. Por el momento, la reagrupación proporciona:

$$\left[1 + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} + \alpha + \rho\hat{\lambda}K_d + \lambda \right)\right] C_i^{j+1} - \frac{\Delta t}{2} L[C]^{j+1} = C_i^j + \frac{\Delta t}{2} \left(G[C, C_S, C_{sed}]^j + \frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} C_L^{j+1} + \alpha C_S^{j+1} + \rho\hat{\lambda} C_{sed}^{j+1} \right) \quad (16)$$

Esta a su vez, puede ser simplificada agrupando términos:

$$E_i C_{i-1}^{j+1} + F_i C_i^{j+1} + G_i C_{i+1}^{j+1} = R_i \quad (17)$$

donde

$$E_i = - \frac{\Delta t}{2A_i^{j+1}\Delta x} \left(\frac{Q_i^{j+1}}{2} + \frac{(AD)_{i-1,i}^{j+1}}{\Delta x} \right) \quad (18)$$

$$F_i = 1 + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{(AD)_{i-1,i}^{j+1} + (AD)_{i,i+1}^{j+1}}{A_i^{j+1}\Delta x^2} + \frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} + \alpha + \rho\hat{\lambda}K_d + \lambda \right) \quad (19)$$

$$G_i = \frac{\Delta t}{2A_i^{j+1}\Delta x} \left(\frac{Q_i^{j+1}}{2} - \frac{(AD)_{i,i+1}^{j+1}}{\Delta x} \right) \quad (20)$$

$$R_i = C_i^j + \frac{\Delta t}{2} \left(G[C, C_S, C_{sed}]^j + \frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} C_L^{j+1} + \alpha C_S^{j+1} + \rho\hat{\lambda} C_{sed}^{j+1} \right) \quad (21)$$

Las ecuaciones (18)-(21) son para el caso especial de segmentos de igual tamaño. El apéndice C de Runkel y Broshears (1991) puede consultarse para el caso general de segmentos de longitud variable.

Después de desarrollar la ecuación (17) para todos los segmentos en el sistema modelado, podemos llegar a un conjunto de ecuaciones lineales algebraicas. Estas ecuaciones deben ser resueltas simultáneamente para obtener la concentración de soluto en el canal principal, C_i^{j+1} , en cada uno de los segmentos de la corriente. A continuación se presenta un conjunto hipotético de ecuaciones para un sistema de cinco segmentos.

$$\begin{bmatrix} F_1 & G_1 & & & \\ E_2 & F_2 & G_2 & & \\ & E_3 & F_3 & G_3 & \\ & & E_4 & F_4 & G_4 \\ & & & E_5 & F_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^{j+1} \\ C_2^{j+1} \\ C_3^{j+1} \\ C_4^{j+1} \\ C_5^{j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \\ R_4 \\ R_5 \end{bmatrix} \quad (22)$$

Sistemas de ecuaciones tal como el que se muestra en la ecuación (22) pueden ser eficientemente resueltos usando el algoritmo de Thomas. Una descripción completa del algoritmo de Thomas se presenta en Runkel y Chapra (1993).

2.4.4 Concentraciones en la zona de almacenamiento y en el sedimento del lecho

Los conceptos presentados en la sección precedente pueden ahora ser aplicados a las ecuaciones para la zona de almacenamiento y el sedimento del lecho [ecuaciones (4) y (5)]. De aquí se obtienen las siguientes expresiones Crank-Nicolson:

$$\frac{C_S^{j+1} - C_S^j}{\Delta t} = \frac{\left(\alpha \frac{A}{A_S} (C - C_S) + \hat{\lambda}_S (\hat{C}_S - C_S) - \lambda_S C_S \right)^{j+1} + \left(\alpha \frac{A}{A_S} (C - C_S) + \hat{\lambda}_S (\hat{C}_S - C_S) - \lambda_S C_S \right)^j}{2} \quad (23)$$

$$\frac{C_{sed}^{j+1} - C_{sed}^j}{\Delta t} = \frac{[\hat{\lambda} (K_d C - C_{sed})]^{j+1} + [\hat{\lambda} (K_d C - C_{sed})]^j}{2} \quad (24)$$

En contraste con la ecuación para el canal principal, las ecuaciones (23) y (24) puede resolverse explícitamente para las variables de interés, C_S^{j+1} y C_{sed}^{j+1} . Esto proporciona:

$$C_S^{j+1} = \frac{(2 - \gamma^j - \Delta t \hat{\lambda}_S - \Delta t \lambda_S) C_S^j + \gamma^j C^j + \gamma^{j+1} C^{j+1} + 2 \Delta t \hat{\lambda}_S \hat{C}_S}{2 + \gamma^{j+1} + \Delta t \hat{\lambda}_S + \Delta t \lambda_S} \quad (25)$$

$$C_{sed}^{j+1} = \frac{(2 - \Delta t \hat{\lambda}) C_{sed}^j + \Delta t \hat{\lambda} K_d (C^j + C^{j+1})}{2 + \Delta t \hat{\lambda}} \quad (26)$$

donde

$$\gamma = \frac{\alpha \Delta t A}{A_S} \quad (27)$$

Estas formulaciones explícitas se usan en la siguiente sección.

2.4.5 Desacoplando las ecuaciones del canal principal, zona de almacenamiento y sedimento del lecho fluvial

Runkel y Chapra (1993, 1994) presentan una técnica para desacoplar las ecuaciones del canal principal y la zona de almacenamiento. Aquí extendemos la técnica para incluir la ecuación del sedimento del lecho. Una inspección de la ecuación (17) indica que la concentración en el canal principal depende tanto de las concentraciones en la zona de almacenamiento y en el sedimento del lecho para el nivel de tiempo avanzado (C_S^{j+1} y C_{sed}^{j+1}). Debido a que estas concentraciones son desconocidas, la ecuación (17) está acoplada a las ecuaciones (25) y (26). Este acoplamiento sugiere una técnica de solución iterativa por la cual las ecuaciones (17), (25), y (26) se resuelvan en secuencia hasta alcanzar un nivel deseado de convergencia. El proceso iterativo es ineficiente de modo que (17), (25), y (26) deben ser resueltas mas de una vez durante cada intervalo del tiempo.

Afortunadamente, estas ecuaciones pueden desacoplarse observando las ecuaciones (25) y (26). Examinando (25) se ve que la concentración del almacenamiento es función de dos cantidades conocidas, C^j y C_S^j , y una cantidad desconocida, C^{j+1} . De forma similar, la concentración en el sedimento del lecho es función de dos concentraciones conocidas (C^j y C_{sed}^j) y una desconocida (C^{j+1}). Substituyendo las ecuaciones (25) y (26) en la ecuación (21), llegamos a una nueva expresión para R :

$$R_i' = C_i^j + \frac{\Delta t}{2} \left[G[C, C_S, C_{sed}]^j + \frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} C_L^{j+1} \right. \\ \left. + \alpha \left(\frac{(2 - \gamma^j - \Delta t \hat{\lambda}_S - \Delta t \lambda_S) C_S^j + \gamma^j C^j + \gamma^{j+1} C^{j+1} + 2 \Delta t \hat{\lambda}_S \hat{C}_S}{2 + \gamma^{j+1} + \Delta t \hat{\lambda}_S + \Delta t \lambda_S} \right) \right. \\ \left. + \rho \hat{\lambda} \left(\frac{(2 - \Delta t \hat{\lambda}) C_{sed}^j + \Delta t \hat{\lambda} K_d (C^j + C^{j+1})}{2 + \Delta t \hat{\lambda}} \right) \right] \quad (28)$$

Aunque R todavía contiene una incógnita, la ecuación (28) es una expresión mucho más útil. La única incógnita es C^{j+1} , una variable que ya aparecía en el lado izquierdo de la ecuación (17). Por lo tanto podemos mover los términos que envuelven C^{j+1} a la parte izquierdo de (17), creando nuevas expresiones para F y R :

$$F_i' = 1 + \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{(AD)_{i-1,i}^{j+1} + (AD)_{i,i+1}^{j+1}}{A_i^{j+1} \Delta x^2} + \frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} + \alpha \left(1 - \frac{\gamma^{j+1}}{2 + \gamma^{j+1} + \Delta t \hat{\lambda}_S + \Delta t \lambda_S} \right) \right. \\ \left. + \rho \hat{\lambda} K_d \left(1 - \frac{\Delta t \hat{\lambda}}{2 + \Delta t \hat{\lambda}} \right) + \lambda \right] \quad (29)$$

$$R_i'' = C_i^j + \frac{\Delta t}{2} \left[G[C, C_S, C_{sed}]^j + \frac{q_{LIN}^{j+1}}{A_i^{j+1}} C_L^{j+1} \right. \\ \left. + \alpha \left(\frac{(2 - \gamma^j - \Delta t \hat{\lambda}_S - \Delta t \lambda_S) C_S^j + \gamma^j C^j + 2 \Delta t \hat{\lambda}_S \hat{C}_S}{2 + \gamma^{j+1} + \Delta t \hat{\lambda}_S + \Delta t \lambda_S} \right) \right. \\ \left. + \rho \hat{\lambda} \left(\frac{(2 - \Delta t \hat{\lambda}) C_{sed}^j + \Delta t \hat{\lambda} K_d C^j}{2 + \Delta t \hat{\lambda}} \right) \right] \quad (30)$$

Dado que R ahora envuelve solo cantidades conocidas, la ecuación (17) puede ser resuelta, de forma independiente, para la concentración de soluto en el canal principal, C^{j+1} . Habiendo resuelto (17), las ecuaciones de la zona de almacenamiento y del sedimento del lecho [ecuaciones (25) y (26)] se convierten en función de la concentración conocida en el canal principal, C^{j+1} . Así hemos desacoplado las expresiones Crank-Nicolson rectoras.

2.5 Soluciones numéricas - Ecuaciones en estado estacionario

De igual manera que las ecuaciones de tiempo variable, aproximamos las derivadas espaciales de la ecuación (6) usando diferencias finitas. Estas aproximaciones se encuentran en el apéndice B de Runkel y Broshears (1991). La ecuación algebraica resultante para el canal principal viene dada por:

$$0 = L[C] + \frac{q_{LIN}}{A_i} (C_L - C_i) + \alpha (C_S - C_i) + \rho \hat{\lambda} (C_{sed} - K_d C_i) - \lambda C_i \quad (31)$$

La dependencia de las ecuaciones del canal principal sobre las concentraciones en la zona de almacenamiento y el sedimento del lecho puede ser eliminada substituyendo las ecuaciones (9) y (10) en la anterior. Esto proporciona:

$$0 = L[C] + \frac{q_{LIN}}{A_i} (C_L - C_i) + \frac{\alpha A_S (\hat{\lambda}_S \hat{C}_S - \lambda_S C_i - \hat{\lambda}_S C_i)}{\alpha A + \lambda_S A_S + \hat{\lambda}_S A_S} - \lambda C_i \quad (32)$$

Dado que la ecuación (32) incluye las concentraciones de soluto en los segmentos adyacentes (C_{i-1} , C_{i+1}), no es posible resolverla explícitamente para C_i . Podemos, sin embargo, reordenar la ecuación (32) de modo que las incógnitas, C_{i-1} , C_i y C_{i+1} , aparezcan en el lado izquierdo. Esta reordenación proporciona:

$$E_i C_{i-1} + F_i C_i + G_i C_{i+1} = R_i \quad (33)$$

donde

$$E_i = \frac{-1}{A_i \Delta x} \left(\frac{Q_i}{2} + \frac{(AD)_{i-1,i}}{\Delta x} \right) \quad (34)$$

$$F_i = \left(\frac{(AD)_{i-1,i} + (AD)_{i,i+1}}{A_i \Delta x^2} + \frac{q_{LIN}}{A_i} + \alpha A_S \left(\frac{\lambda_S + \hat{\lambda}_S}{\alpha A_i + A_S \lambda_S + A_S \hat{\lambda}_S} \right) + \lambda \right) \quad (35)$$

$$G_i = \frac{1}{A_i \Delta x} \left(\frac{Q_i}{2} - \frac{(AD)_{i,i+1}}{\Delta x} \right) \quad (36)$$

$$R_i = \frac{q_{LIN}}{A_i} C_L + \frac{\alpha A_S \hat{\lambda}_S \hat{C}_S}{\alpha A_i + A_S \lambda_S + A_S \hat{\lambda}_S} \quad (37)$$

Las ecuaciones (34)-(37) son para el caso especial de segmentos de idéntico tamaño. El apéndice D de Runkel y Broshears (1991) puede ser consultado para el caso de segmentos de longitud variable. Las concentraciones de soluto en el canal principal se determinan resolviendo un sistema de ecuaciones análogo a las que muestran la ecuación 22.

2.6 Condiciones de frontera (contorno)

Dos condiciones de frontera (contorno) deben ser especificadas para resolver las ecuaciones diferenciales de segundo orden como la ecuación (3). Para el caso de un canal de corriente unidimensional, estas condiciones de frontera (contorno) se aplican a las fronteras aguas arriba y aguas abajo.

2.6.1 Condición de frontera (contorno) aguas arriba

La condición de frontera (contorno) aguas arriba se define en términos de una concentración fijada, (C_{bc}), en el frontera (contorno) aguas arriba, como muestra la figura 5. Por lo tanto esta condición de frontera (contorno) representa la concentración de soluto que está entrando por la parte superior de la corriente del sistema modelado. Para las soluciones en las ecuaciones de variable temporal (sección 2.2.2), las condiciones de frontera (contorno) aguas arriba, pueden variar a lo largo del tiempo. La especificación por el usuario de la condición del frontera (contorno) aguas arriba se discute en la sección 3.5.4.

Segmento 1 - Condición de frontera aguas arriba

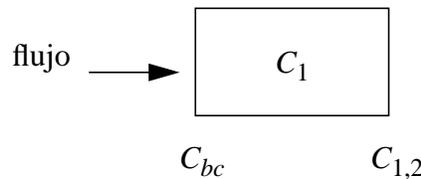


Figura 5. Condición de frontera aguas arriba, definida en términos de una concentración fija, C_{bc} .

2.6.2 Condición de frontera (contorno) aguas abajo

En contraste con la condición aguas arriba, la condición de frontera (contorno) aguas abajo no es una concentración fijada sino un flujo dispersivo fijado. Para implementar la condición de frontera (contorno) aguas abajo se define un flujo dispersivo en la interfaz entre los segmentos i e $i+1$. Aquí en

subíndice i se refiere al último segmento del sistema modelado, e $i+1$ se refiere a un segmento ficticio adyacente al último segmento. El flujo dispersivo se define como:

$$\left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_{i, i+1} = DSBOUND \quad (38)$$

donde $DSBOUND$ es un valor suministrado por el usuario para el flujo dispersivo. Notar que si $DSBOUND$ se establece igual a cero, la ecuación (38) es una condición de frontera (contorno) de gradiente nulo. Esto implica que la concentración en el segmento i es igual a la del segmento $i+1$.

La aplicación de la condición de frontera (contorno) aguas abajo se muestra en la figura 6; la especificación de $DSBOUND$ por el usuario se discute en la sección 3.5.4.

Condición de frontera aguas abajo

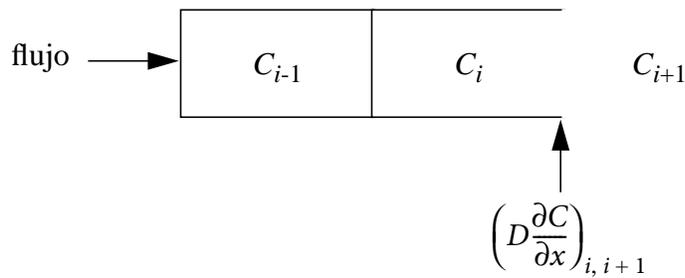


Figura 6. Condición de frontera aguas abajo definida en términos de un flujo dispersivo fijo.

2.7 Estimación de parámetros

La estimación de parámetros es un objetivo de muchos estudios de transporte de solutos: dado un conjunto de concentraciones medidas, determinar un conjunto de valores de parámetros que describan adecuadamente al sistema bajo estudio. Los estudios de dilución de trazadores (ver Broshears y otros, 1993), por ejemplo, pretenden cuantificar los parámetros hidrológicos que caracterizan el transporte físico y la mezcla (Q, A, A_S, α, D).

La estimación de parámetros envuelve a menudo un procedimiento de tanteo y error, en donde las estimaciones de los parámetros se ajustan manualmente durante una serie de simulaciones para obtener una igualdad aceptable entre las concentraciones simuladas y observadas. Una alternativa a la aproximación por tanteo y error es utilizar técnicas de estimación de parámetros como la regresión no lineal por mínimos cuadrados (NLS) que automáticamente determinan un conjunto de estimaciones óptimas de los parámetros.

El propósito de esta sección es proveer un breve resumen de cómo se implementa la NLS dentro del modelo OTIS de transporte de solutos. Los lectores que deseen más información pueden consultar Draper y Smith (1981), Wagner y Gorelick (1986), y Donaldson y Tryon (1990). Detalles adicionales sobre NLS dentro de OTIS se presentan en la Guía del Usuario (secciones 3.2 y 3.5) y dos aplicaciones del modelo (secciones 4.5 y 4.6).

En general, las concentraciones observadas de solutos pueden ser expresadas como la suma de la concentración simulada y un término de error al azar:

$$c_k = f(\zeta, \hat{\theta})_k + \varepsilon_k, \quad k = 1, N \quad (39)$$

donde

- N - el número de observaciones
- NP - el número de parámetros del modelo
- c_k - la variable dependiente de estado, la concentración observada de la concentración de soluto en el canal principal [M/L³]
- $f(\zeta, \hat{\theta})_k$ - una función no lineal que simula la observación k éxima, la solución de las ecuaciones (3)-(5), proporcionan la concentración simulada en el canal principal, C_k
- ζ - la variable independiente. Para los problemas con variación temporal $\zeta = t$, mientras que para los problemas en estado estacionario, $\zeta = x$
- $\hat{\theta}$ - un vector de longitud NP conteniendo las estimaciones de los parámetros
- ε_k - error al azar asociado con la observación k éxima

y los parámetros del modelo donde $\hat{\theta}$ incluye $D, A, A_S, \alpha, \lambda, \lambda_S, \hat{\lambda}, \hat{\lambda}_S, \rho$ y K_d .

La regresión no lineal por mínimos cuadrados puede ser vista como un problema de optimización con una función objetivo dada por:

$$RSS(\hat{\theta}) = \sum_{k=1}^N \{w_k [c_k - f(\zeta, \hat{\theta})_k]^2\} = \sum_{k=1}^N (w_k \varepsilon_k^2) \quad (40)$$

donde

$RSS(\hat{\theta})$ - suma ponderada de los cuadrados de los residuales

w_k - factor ponderado asignado a la observación k éxima

El objetivo del NLS es determinar el vector de parámetros estimados, $\hat{\theta}$, que minimiza la suma de los errores al cuadrado [esto minimiza $RSS(\hat{\theta})$ en la ecuación (40)]. Como describen Wagner y Gorelick (1986), este problema de minimización puede quedar imponderado, donde a cada error se le concede la misma importancia ($w_k=1, k=1, N$). Alternativamente, la ponderación se pueden asignar con base en la magnitud de la concentración de soluto (Wagner y Gorelick, 1986):

$$w_k = 1 / f(\zeta, \hat{\theta})_k^2 \quad (41)$$

Aquí usamos una técnica ajustada NLS descrita por Dennis y otros (1981) que minimiza $RSS(\hat{\theta})$ usando un procedimiento iterativo. Dentro del procedimiento iterativo, los estimados de los parámetros se mejoran de acuerdo con:

$$\hat{\theta}_{m+1} = \hat{\theta}_m - (J^T W J + S + Y_m^{-1} J_m^T W_m \hat{\varepsilon}_m^T) \quad (42)$$

sometido a

$$\sqrt{\sum_{l=1}^{NP} \left[\frac{(\theta_{m+1,l} - \theta_{m,l})}{SCALE_l} \right]^2} \leq d_m \quad (43)$$

donde

- S - matriz NP por NP que aproxima un término a partir de la matriz de Hess
- $SCALE$ - tamaño típico de un parámetro dado
- W - diagonal de una matriz N por N de factores de ponderación, $w_k, k=1,N$
- Y - diagonal de una matriz NP por NP escogida de modo que se satisfaga la ecuación (43)
- d - diámetro de la región de confianza (Donaldson y Tryon, 1990)
- l - denota las cantidades que corresponden al parámetro l
- m - denota la m ésima iteración
- $\hat{\epsilon}$ - vector de longitud N de residuales, $\epsilon_k, k=1,N$
- $\hat{\theta}$ - estimación del parámetro l en la iteración m

y J es una matriz N por NP con elementos $J_{k,l}$ definidos por:

$$J_{k,l} = \frac{\partial f(\zeta, \hat{\theta})_k}{\partial \theta_l} \quad (44)$$

El procedimiento iterativo continua hasta que se alcance uno de dos criterios de convergencia. La convergencia puede estar basado en el relativo cambio en los parámetros:

$$\frac{\max[|\hat{\theta}_{m+1,l} - \hat{\theta}_{m,l}| / SCALE_l], \quad l=1, NP}{\max[(|\hat{\theta}_{m+1,l}| + |\hat{\theta}_{m,l}|) / SCALE_l], \quad l=1, NP} < STOPP \quad (45)$$

o en el cambio en la suma de los cuadrados de los residuales:

$$\frac{fcst[RSS(\hat{\theta})]}{RSS(\hat{\theta}_m)} < STOPSS \quad (46)$$

donde $STOPP$ y $STOPSS$ son criterios de convergencia especificados por el usuario y $fcst[RSS(\hat{\theta})]$ es el cambio predicho en la suma de los cuadrados de los residuales.

La figura 7 muestra un diagrama resumiendo el procedimiento iterativo de estimación de parámetros. El proceso iterativo comienza obteniendo los estimados iniciales de los parámetros, $\hat{\theta}_0$, y el diámetro inicial de la región de confianza, d_0 . Se resuelven entonces las ecuaciones (3)-(5) para determinar las concentraciones simuladas en el canal principal, $f(\zeta, \hat{\theta})$, correspondiendo a las N concentraciones observadas, Los estimados de los NP parámetros, $\hat{\theta}_m$, se revisan utilizando la ecuación (42) y se realiza un test de convergencia. Si se satisfacen las ecuaciones (45) o (46), la solución ha convergido y el estimado final de los parámetros queda dado por $\hat{\theta}_m$. Si no se cumple ninguna de las ecuaciones mencionadas, comienza una nueva iteración.

Estimación de parámetros usando mínimos cuadrados no lineales

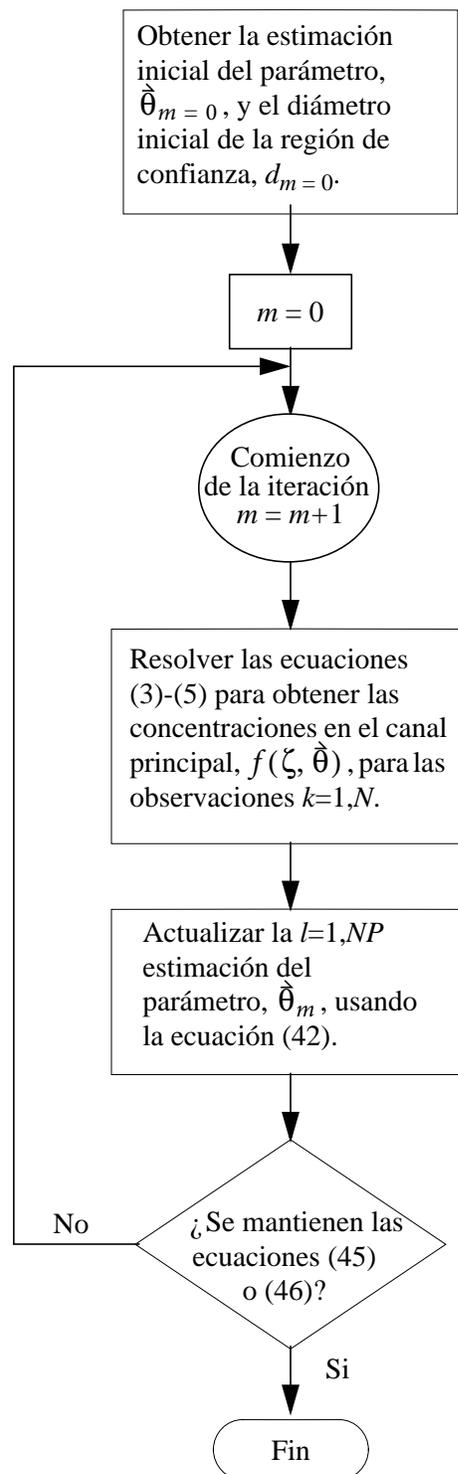


Figura 7. Procedimiento de estimación iterativa de parámetros.

3.0 GUIA DEL USUARIO

Esta sección, la Guía del Usuario de OTIS, provee información acerca del uso del modelo OTIS de transporte de solutos. OTIS está conformado por dos modelos operacionales. El primero, al cual se hace referencia en adelante como OTIS, es una versión actualizada del modelo originalmente documentado por Runkel y Broshears (1991). OTIS soluciona las ecuaciones gobernantes descritas en la sección 2.2 utilizando los parámetros del modelo especificados por el usuario, información del flujo y de la configuración del sistema. El segundo modelo, OTIS-P, es una versión modificada de OTIS acoplada con algoritmos no-lineales de mínimos cuadrados descritos por Donaldson y Tyron (1990). OTIS-P determina el conjunto óptimo de parámetros estimados de acuerdo con datos observados de concentración tal como se describe en la sección 2.7.

Las secciones 3.1 a 3.7 describen las especificaciones de entrada/salida para OTIS y OTIS-P. En las discusiones que siguen a continuación, los términos “modelo de transporte de solutos OTIS” y “el modelo” hacen referencia a los dos modelos OTIS y OTIS-P; a menos que se especifique lo contrario, la información proporcionada es aplicable a ambos modelos. Detalles específicos de un modelo dado se proporcionan donde corresponde.

3.1 Aplicabilidad

El modelo de transporte de solutos OTIS, originalmente desarrollado para ser utilizado en corrientes o ríos pequeños de montaña, puede ser aplicado en cualquier río en el cual se pueda suponer flujo unidimensional. La suposición primordial del análisis de flujo unidimensional es que la masa del soluto está uniformemente distribuida a lo ancho de la sección transversal de la corriente. Bajo esta suposición, la concentración del soluto varía solamente en la dirección longitudinal; la concentración no varía con la profundidad o el ancho de la corriente. A pesar de que esta condición de uniformidad rara vez ocurre en la naturaleza, es una suposición razonable en muchas corrientes y ríos. Fisher y otros (1979) proporcionan detalles adicionales del análisis del flujo uni-dimensional.

El modelo puede ser utilizado para cuantificar los procesos físicos que afectan las sustancias conservativas tales como trazadores. Aplicaciones adicionales incluyen análisis de solutos no-conservativos que están sujetos a sorción y/o decaimiento de primer orden. Una revisión completa de los procesos físicos y químicos incluidos en el modelo se proporciona en la sección 2.0.

3.2 Características del modelo

Varias opciones de simulación están disponibles dentro en el modelo de transporte de solutos. A continuación se presenta una revisión general de las diferentes opciones y en la sección 3.5 se presentan detalles más específicos.

3.2.1 Modos de simulación: dinámico y estado-estacionario

El modelo de transporte de solutos puede ser utilizado para resolver las ecuaciones variables en el tiempo (dinámicas) de la sección 2.2.2 o las ecuaciones de estado-estacionario de la sección 2.2.3. Los párrafos siguientes describen estos dos modos de simulación. Una descripción completa de los parámetros relevantes de entrada se presenta en la sección 3.5.4.

La opción de simulación dinámica se selecciona cuando el usuario está interesado en determinar la naturaleza variable en el tiempo del soluto que es transportado. Esta opción requiere que el usuario especifique una condición de frontera (contorno) variable en el tiempo aguas arriba, un intervalo de tiempo de integración (variable de entrada TSTEP), y un intervalo de tiempo para la impresión de resultados (variable de entrada PSTEP). La opción dinámica se invoca para cualquier valor no nulo de TSTEP.

La opción de estado-estacionario se selecciona cuando hay un interés en la respuesta a largo plazo del sistema a una condición de carga constante. La opción de estado-estacionario se invoca al fijar el intervalo de tiempo de integración, TSTEP, en cero.

3.2.2 Solutos conservativos y no-conservativos

El modelo puede simular el destino y transporte de solutos conservativos y no conservativos. Los solutos conservativos están sujetos a los procesos físicos de advección, dispersión, flujo lateral, y almacenamiento en tránsito. Dos procesos adicionales, sorción y decaimiento de primer orden, pueden considerarse al modelar solutos no-conservativos.

Los solutos conservativos se modelan fijando las variables auxiliares IDECAY e ISORB en cero (0). Solutos no-conservativos sujetos a sorción se modelan fijando ISORB en uno (1) y especificando los diferentes parámetros de sorción (LAMHAT, LAMHAT2, RHO, KD, CSBACK). Decaimiento (o producción) de primer-orden se modela fijando IDECAY en uno (1) y especificando coeficientes de primer orden de decaimiento o velocidad de producción (LAMBDA y LAMBDA2). Valores positivos de LAMBDA y LAMBDA2 deben especificarse si el soluto está sujeto a decaimiento de primer orden, mientras que valores negativos deben utilizarse si el soluto está sujeto a producción de primer orden. En la sección 3.5.4 se presenta información adicional de las diferentes variables auxiliares y parámetros de entrada.

3.2.3 Regímenes de flujo

Adicionalmente a las opciones anteriores, el modelo tiene la capacidad de simular el transporte bajo diversas condiciones de flujo. El modelo considera flujos variables espacialmente (uniformes/ no-uniformes) y temporalmente (estacionarios (permanentes)/ no-estacionarios (no-permanentes)). La especificación por el usuario del régimen hidrológico gobernante se resume en la tabla 1. Las primeras dos opciones mostradas en la tabla son relativamente sencillas dado que involucran el régimen de flujo estacionario. Bajo el régimen de flujo estacionario, parámetros del modelo tales como flujo lateral y área de la sección transversal permanecen constantes con respecto al tiempo. La tercera opción en la tabla 1, flujo no-estacionario involucra parámetros del modelo que cambian en el tiempo. Esta opción se selecciona típicamente cuando el modelo de transporte de solutos se utiliza en conjunto con un modelo de tránsito de caudales que proporciona flujos laterales, caudales y áreas de la sección transversal variables en el tiempo. Muy pocas aplicaciones de flujo no-estacionario se han llevado a cabo a la fecha; los usuarios del modelo deben por lo tanto contactar al autor con referencia a aplicaciones que involucren flujo no-estacionario.

El formato de entrada utilizado para especificar el régimen de flujo se presenta en la sección 3.5.5. Para información adicional de los diferentes regímenes de flujo, el lector es remitido a Henderson (1966).

Tabla 1. Especificación por parte del usuario del régimen hidrológico de flujo

Régimen de flujo	Especificaciones del usuario
Flujo estacionario, uniforme	Fije los términos de flujo lateral, QLATIN y QLATOUT, en cero. Fije el indicador de cambio de caudal, QSTEP, en cero.
Flujo estacionario, no-uniforme	Fije los términos de flujo lateral, QLATIN y QLATOUT, en los valores deseados. Fije el indicador de cambio de caudal, QSTEP, en cero.
Flujo no estacionario, no-uniforme	Prepare el fichero de flujo utilizando datos de caudal, flujo lateral, y área que hayan sido generados por un modelo pertinente de tránsito de caudales [por ejemplo, DR ₃ M, Alley y Smith (1982)]. Fije el indicador de cambio de caudal, QSTEP, igual al intervalo de tiempo de impresión de resultados del modelo de tránsito.

3.2.4 Estimación de parámetros utilizando OTIS-P

Varios estudios de modelación involucran procedimientos manuales en los cuales los parámetros del modelo se ajustan durante una serie de simulaciones hasta obtener una concordancia aceptable entre valores simulados y observados. Un método alternativo es la utilización de técnicas automáticas de estimación de parámetros tales como los procedimientos de NLS descritos en la sección 2.7. El modelo OTIS-P acopla el marco matemático de OTIS con los algoritmos de NLS de STARPAC (Donaldson y Tyron, 1990). De esta manera, OTIS-P proporciona un medio de estimación automática de los parámetros del modelo.

Con el fin de utilizar el procedimiento de estimación automática de parámetros, el usuario prepara los ficheros de entrada básicos de OTIS y dos ficheros adicionales requeridos por OTIS-P. Estos ficheros adicionales proveen los datos observados de concentración y varios parámetros de entrada de STARPAC. Los usuarios pueden solicitar estimación de parámetros para cualquier subconjunto de los 10 parámetros del modelo (DISP, AREA, AREA2, ALPHA, LAMBDA, LAMBDA2, LAMHAT, LAMHAT2, RHO, y KD).

3.3 Revisión del sistema conceptual

Antes de describir detalladamente los requerimientos de entrada del modelo, es útil definir algunas de las variables del programa en términos del sistema conceptual. La figura 8 ilustra el sistema modelado como una serie de tramos. Para nuestros propósitos, un tramo se define como una distancia continua a lo largo de la cual los parámetros del modelo permanecen constantes. Un tramo, por ejemplo, tendrá un coeficiente de dispersión, un coeficiente de decaimiento de primer orden y un flujo lateral constantes. El número de tramos definidos en un sistema dado refleja tanto la variabilidad inherente del tramo como la disponibilidad de datos. Un tramo uniforme espacialmente puede ser modelado utilizando un tramo único, mientras que una corriente con una, bien-caracterizada variación de las propiedades del canal, puede ser simulada utilizando varios tramos. El número de tramos en el sistema modelado se especifica mediante el parámetro de entrada NREACH.

Sistema conceptual - Tramos y segmentos

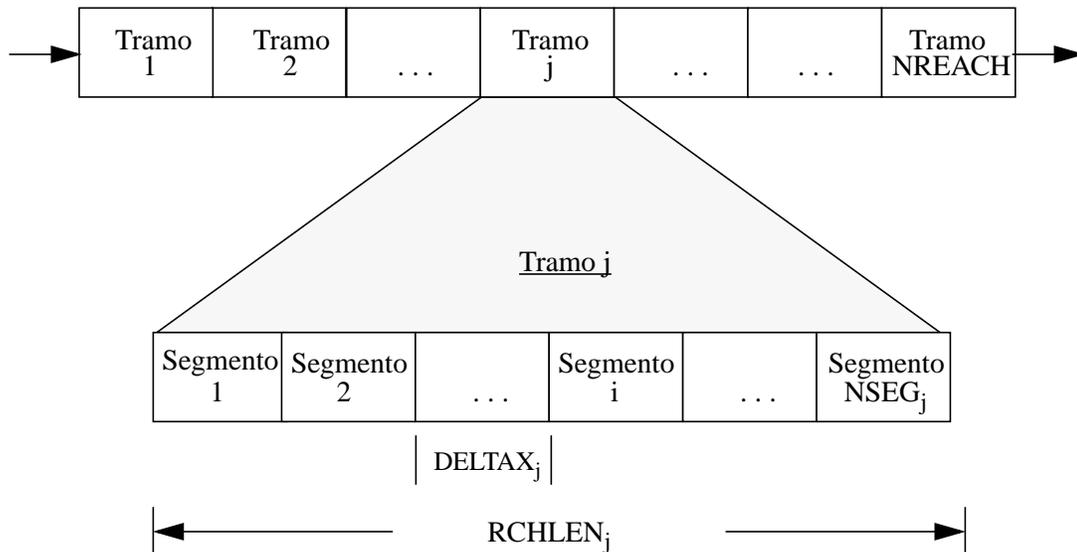


Figura 8. Sistema conceptual que incluye uno o mas tramos. Cada tramo está subdividido en un número de elementos computacionales o segmentos.

Cada tramo se subdivide en un número de elementos computacionales o segmentos. Cada uno de los cuales representa un volumen de control sobre el cual las ecuaciones gobernantes de balance de masa son aplicables. Para un tramo dado hay NSEG segmentos de longitud DELTAX. Note que DELTAX se calcula de la longitud del tramo, RCHLEN, y el número de segmentos:

$$DELTA X = \frac{RCHLEN}{NSEG} \quad (47)$$

VARIABLES adicionales del programa se muestran en la figura 9. Aquí se observa el primer tramo en la red de la corriente y su relación con las variables de entrada requeridas. Debido a que este tramo comienza en la frontera de aguas arriba del sistema, se define el caudal de entrada QSTART, y el valor de frontera (contorno) del soluto, USBC. USBC es la condición de frontera (contorno) de aguas arriba, la cual se discute en las secciones 2.6.1 y 3.5.4 (registro tipo 17, tabla 11). La variable del programa denotando la coordenada o distancia referenciada del inicio de la corriente, XSTART, también se aplica al extremo de aguas arriba del tramo uno. Nótese que estas tres variables aplican únicamente al primer tramo del sistema modelado.

Sistema conceptual - Tramo 1

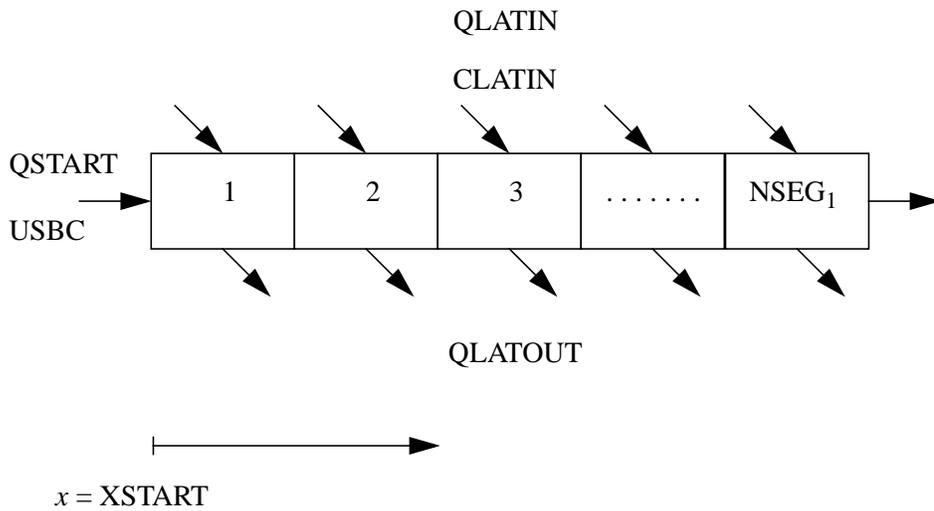


Figura 9. El primer tramo en el sistema conceptual y las variables de entrada (input) requeridas.

Las restantes variables del programa mostradas en la figura, QLATIN, CLATIN y QLATOUT, se especifican típicamente para cada tramo del sistema modelado (una excepción es el caso de flujo no-estacionario; ver sección 3.5.5). La tasa de flujo lateral, QLATIN, representa el flujo que entra al canal como flujo superficial, flujo sub-superficial, y como caudal de agua subterránea. Este flujo adicional lleva consigo una concentración de soluto, CLATIN. La última variable, QLATOUT, es un término de flujo de salida lateral de salida que representa una pérdida de agua del canal de la corriente. Los dos, QLATIN y QLATOUT, se especifican sobre una base por unidad de longitud (en $L^3/T-L$).

3.4 Estructura de entrada/salida

Esta sección describe los ficheros de entrada y salida asociados con OTIS y OTIS-P. Aquí se presenta una descripción breve de cada fichero; descripciones más detalladas se presentan en las secciones 3.5-3.7.

3.4.1 OTIS

La estructura de entrada/salida de OTIS se ilustra en la figura 10. El primer fichero de entrada, el fichero de control, se utiliza para especificar los nombres de los demás ficheros de entrada y salida. De manera contraria a los demás ficheros de entrada, el nombre del fichero de control es fijo, control.inp, dentro del programa (software) y su nombre no puede ser cambiado. Un segundo fichero de entrada, el fichero de parámetros, establece opciones de simulación, condiciones de frontera (contorno) y parámetros del modelo que permanecen constantes durante la simulación. El último fichero, el fichero de flujo, contiene parámetros del modelo que pueden potencialmente variar durante la simulación (por ejemplo, el caudal y el área de la sección transversal). Los nombres del fichero de parámetros y de flujo son especificados por el usuario en el fichero de control, control.inp.

Ficheros de entrada/salida: OTIS

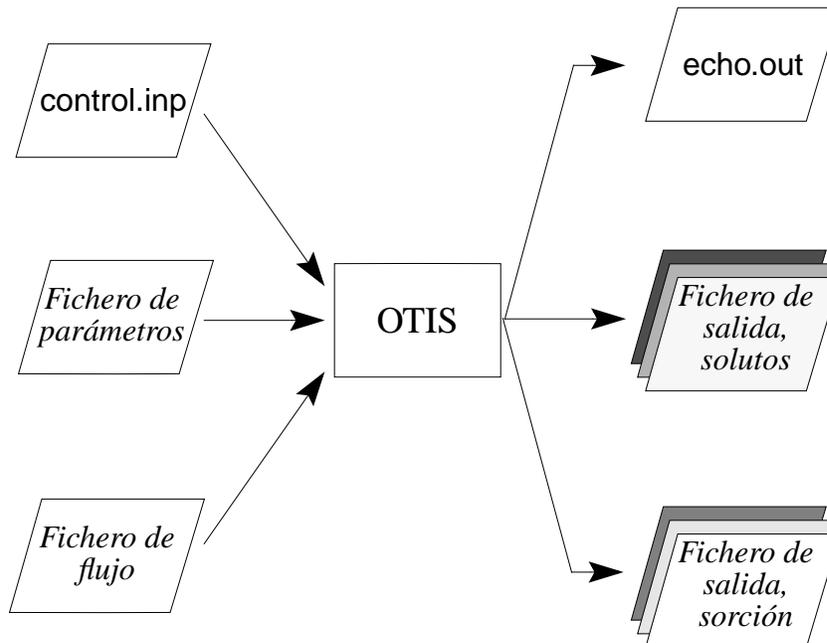


Figura 10. OTIS Ficheros de entrada/salida (Input/Output).

En la figura 10 también se muestran los ficheros de salida creados por OTIS. Al final de una simulación, el fichero `echo.out` contiene un “echo” (copia) de las opciones de simulación y parámetros del modelo especificados por el usuario. Este fichero contiene igualmente los mensajes de error que hayan podido ser generados durante la ejecución del modelo. Adicionalmente al fichero `echo`, el modelo genera un fichero de salida por cada soluto especificado. Si se modela sorción, un fichero de salida de sorción es igualmente generado para cada soluto. Los nombres de los ficheros de salida de solutos y sorción son especificados por el usuario en el fichero de control, `control.inp`.

3.4.2 OTIS-P

La estructura de entrada/salida de OTIS-P se ilustra en la figura 11. Se requieren cinco ficheros de entrada. Los primeros tres ficheros de entrada (`control`, `parámetros` y `flujo`) son idénticos a los descritos en la sección 3.4.1 para OTIS. Un cuarto fichero de entrada, el fichero de datos, proporciona los datos de concentración observados que son utilizados en el procedimiento de estimación de parámetros. El último fichero de entrada, el fichero de entrada STARPAC, es utilizado con el fin de especificar los parámetros que deben ser estimados por OTIS-P, así como otras opciones del procedimiento de estimación de parámetros. Los nombres de los ficheros de entrada datos y STARPAC son especificados por el usuario en `control.inp`.

En la figura 11 también se muestran los ficheros de salida creados por OTIS-P. Al igual que el modelo OTIS, OTIS-P crea `echo.out`, un fichero de salida de solutos, y si es el caso correspondiente, un fichero de salida de sorción. Dos ficheros adicionales creados son el fichero de salida de parámetros y el fichero de salida de STARPAC. El fichero de salida de parámetros contiene los estimados finales de los parámetros determinados mediante el uso de NLS, mientras que el fichero de salida de STARPAC contiene análisis estadísticos relacionados con los datos observados y el procedimiento de NLS. Los nombres de los ficheros de salida de solutos, sorción, parámetros y STARPAC son especificados por el usuario en `control.inp`.

Ficheros de entrada/salida: OTIS-P

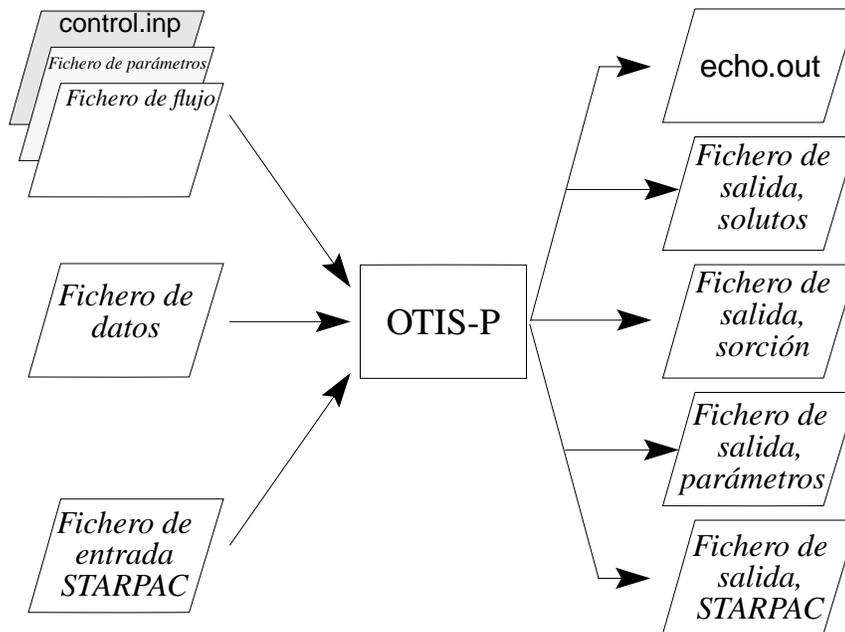


Figura 11. OTIS-P Ficheros de entrada/salida (Input/Output).

3.5 Formato de entrada

Como se describe en la sección 3.4, varios ficheros de entrada deben ensamblarse antes de la ejecución del modelo. Tres de estos ficheros de entrada son utilizados por OTIS y OTIS-P (secciones 3.5.3-3.5.5), y los restantes dos son utilizados exclusivamente por OTIS-P (secciones 3.5.6-3.5.7).

En las secciones que siguen a continuación, cada fichero de entrada se describe en términos de una serie de tipos de registro. En cada tipo de registro, uno o más campos son utilizados para especificar varios parámetros de entrada. En general, tipos de registro hacen referencia a líneas en el fichero de entrada, y los campos corresponden con columnas específicas dentro de cada registro. Ejemplos de ficheros de entrada se presentan en la sección 4.0.

3.5.1 Unidades

En la sección 2.2 las ecuaciones gobernantes y los parámetros de modelo se describen utilizando unidades fundamentales de masa [M], longitud [L], y tiempo [T]. En el modelo OTIS de transporte de solutos, unidades específicas deben asignarse a los diferentes parámetros de entrada. El usuario del modelo puede seleccionar las unidades correspondientes sujeto a lo siguiente:

- **Unidades de longitud [L].** Cualquier unidad de longitud puede ser utilizada al especificar las variables de entrada al modelo. El único requerimiento es que la unidad de longitud debe ser consistente para todos los parámetros del modelo y variables de configuración del sistema. La unidad de longitud seleccionada se denota mediante una L en las descripciones del fichero de entrada subsiguientes.
- **Unidades de concentración [CU].** La selección de unidades de concentración es generalmente independiente de las unidades utilizadas para los parámetros del modelo y variables de configuración del sistema. Unidades consistentes de concentración deben utilizarse para la especificación de las condiciones de frontera (contorno) (USBC, DSBOUND), las concentraciones de flujo lateral (CLATIN), y las variables de sorción (RHO, KD, CSBACK). La unidad de concentración seleccionada se denota mediante CU en las descripciones del fichero de entrada que se presentan a continuación.
- **Unidades de tiempo.** Todos los parámetros del modelo que requieren la especificación de una unidad de tiempo (por ejemplo, caudales y coeficientes de variación) se definen en términos de segundos. Nótese, sin embargo, que variables de control de la simulación, tal como la hora inicial de la simulación (TSTART) se especifican en términos de horas.

3.5.2 Comentarios internos

Los usuarios del modelo pueden documentar su trabajo mediante la incorporación de comentarios en cualquiera de los ficheros de entrada descritos a continuación. Todas las líneas con el signo (#) localizado en la columna 1 serán tratadas como comentarios por el modelo. Esta característica se ilustra en los ejemplos de ficheros de entrada descritos en la sección 4.0.

3.5.3 El fichero de control

El fichero de control, control.inp, se utiliza para especificar los nombres de los diferentes ficheros de entrada y salida. El formato del fichero de control se describe a continuación; ejemplos de ficheros de control se presentan en la sección 4.0.

El fichero de control de OTIS

El formato de control.inp para OTIS se muestra en la tabla 2, donde se observa que el fichero de control consta de cuatro tipos de registro. El registro tipo 1 especifica el nombre del fichero de parámetros, el registro tipo 2 especifica el nombre del fichero de flujo, y el registro tipo 3 especifica los nombres de los ficheros de salida de solutos. Si se modela sorción, el registro tipo 4 especifica los nombres de los ficheros de salida de sorción. El registro 4 se omite si sorción no es modelada.

A pesar de que la tabla 2 lista 4 tipos de registro, el fichero de control puede contener más de cuatro registros dado que algunos tipos de registros pueden repetirse. Los registros tipo 3 y 4, por ejemplo, se repiten por cada soluto (ficheros de salida se crean para cada soluto).

Tabla 2. El fichero de control de OTIS

Registro tipo	VARIABLES de entrada	Formato	Columnas	Descripción
1	FICHERO	C	1-40	Nombre de fichero para <i>Fichero de parámetros</i>
2	FICHERO	C	1-40	Nombre de fichero para <i>Fichero de flujo</i>
3*	FICHEROS	C	1-40	Nombres de ficheros para <i>Ficheros de Salida de Solutos</i>
4*	FICHEROS	C	1-40	Nombres de ficheros para <i>Ficheros de Salida de Sorción</i>

C - Carácter

Notas: (1) Omitir el registro tipo 4 si no se modela sorción.
 (2) Repetir los registros tipos 3 y 4 para cada soluto modelado (NSOLUTE veces).

El fichero de control de OTIS-P

El formato de control.inp para OTIS-P se presenta en la tabla 3, donde se observa que el fichero de control consta de ocho tipos de registros. Los tipos de registro 1-8 especifican los nombres de los ficheros de parámetros, de flujo, de datos, de entrada STARPAC, de parámetros de salida, de salida STARPAC, de salida de solutos, y de salida de sorción, respectivamente. El registro tipo 8 se omite si no se modela sorción.

Tabla 3. El fichero de control de OTIS-P

Registro tipo	VARIABLES de entrada	Formato	Columnas	Descripción
1	FICHERO	C	1-40	Nombre de fichero para <i>Fichero de parámetros</i>
2	FICHERO	C	1-40	Nombre de fichero para <i>Fichero de flujo</i>
3	FICHERO	C	1-40	Nombre de fichero para <i>Fichero de Datos</i>
4	FICHERO	C	1-40	Nombre de fichero para <i>Fichero de Entrada STARPAC</i>
5	FICHERO	C	1-40	Nombre de fichero para <i>Fichero de Salida de Parámetros</i>
6	FICHERO	C	1-40	Nombre de fichero para <i>Fichero de Salida STARPAC</i>
7	FICHERO	C	1-40	Nombre de fichero para <i>Fichero de salida de Solutos</i>
8*	FICHERO	C	1-40	Nombre de fichero para <i>Fichero de salida de Sorción</i>

C - Carácter

* Nota: Omitir el registro tipo 8 si no se modela sorción.

3.5.4 El fichero de parámetros

El fichero de parámetros especifica opciones de impresión, condiciones de frontera, y los parámetros del modelo que permanecen constantes a lo largo de la simulación. El formato del fichero de parámetros se presenta en las tablas 4-11. El fichero de parámetros se crea utilizando los 17 tipos de registro que se discuten a continuación.

Registro tipo 1 - Título de la simulación

El primer registro en el fichero de parámetros es el título de la simulación de hasta 80 caracteres. Este título se imprime como parte del fichero de salida echo.out.

Registro tipo 2 y 3 - Parámetros de impresión

La opción de impresión, que se fija en el registro tipo 2, determina el formato de los ficheros de salida de solutos. Si la opción de impresión se fija en 1, concentraciones del soluto se generan solamente para el canal principal. Concentraciones de soluto tanto en el canal principal como en la zona de almacenamiento se generan si la opción de impresión se fija en 2.

El registro tipo 3 establece el intervalo de impresión, es decir el intervalo de tiempo al cual se imprimen resultados. Si, por ejemplo, se requieren resultados cada 15 minutos, se debe suministrar un valor de 0.25 horas como intervalo de impresión. El intervalo de impresión real y el intervalo de impresión requerido pueden resultar ser diferentes si el intervalo requerido no es un múltiplo exacto del intervalo de tiempo de integración. En este caso, el modelo establece el intervalo de impresión igual al múltiplo más cercano del intervalo de tiempo de integración.

Registro tipo 4-6 - Parámetros de tiempo

El siguiente paso en la construcción del fichero de parámetros es suministrar los parámetros de tiempo correspondientes. El registro tipo 4 se utiliza para fijar la variable de entrada TSTEP. Como se discute en la sección 3.2.1, la solución de estado estacionario (sección 2.5) se computa si TSTEP se fija en cero. Para valores diferentes de cero, TSTEP se utiliza como el intervalo de tiempo de integración (Δt) en la solución numérica dinámica (sección 2.4). Múltiples simulaciones deben realizarse con el fin de determinar un intervalo de tiempo de integración que produzca una solución precisa.

Los parámetros de tiempo restantes, TSTART y TFINAL, se fijan utilizando los tipos de registro 5 y 6. La variable de entrada TSTART denota la hora de inicio de la simulación, y TFINAL especifica la hora de finalización de la simulación. Como se indica en la tabla 4, los valores de TSTEP, TSTART, y TFINAL se especifican en horas.

Registro tipo 7 - Distancia en la frontera de aguas arriba

El registro tipo 7 especifica XSTART, la coordenada o distancia referenciada en la frontera de aguas arriba del sistema modelado. Durante la ejecución del modelo, XSTART se utiliza en la determinación de las distancias en varios puntos aguas abajo. Como la frontera de aguas arriba está al comienzo del área modelada, comúnmente a XSTART se le asigna el valor 0.0.

Registro tipo 8 - Condición de frontera de aguas abajo

La condición de frontera (contorno) de aguas abajo, DSBOUND, se fija utilizando el registro tipo 8. En varias aplicaciones de modelación, el flujo representado por la condición de frontera (contorno) de aguas abajo se fija en cero. Como se discutió en la sección 2.6, el fijar DSBOUND en cero implica que el gradiente de concentración en la frontera de aguas abajo es igual a cero. Debido a esta suposición, la longitud del último tramo en el sistema modelado debe especificarse de tal forma que la localización de la frontera se sitúe suficientemente aguas abajo del punto de interés más cercano. Detalles adicionales de la frontera de aguas abajo se proporcionan en las secciones 2.6 y 4.1.

Registro tipo 9 - Número de tramos

Como se discutió en la sección 3.3, el sistema modelado se divide en una serie de tramos, NREACH. Este parámetro se establece en el registro 9. Para cada tramo, parámetros espacialmente constantes se especifican utilizando el registro 10.

Tabla 4. El fichero de parámetros - registro tipos 1-9

Registro tipo	Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
1	TITLE	C	1-80	---	Título de la simulación
2	PRTOPT	I	1-5	---	Opción de impresión
3	PSTEP	D	1-13	horas	Intervalo de impresión
4	TSTEP	D	1-13	horas	Intervalo total de tiempo
5	TSTART	D	1-13	hora	Tiempo de comienzo de simulación
6	TFINAL	D	1-13	hora	Tiempo de final de simulación
7	XSTART	D	1-13	L	Distancia a la frontera aguas arriba
8	DSBOUND	D	1-13	(L/seg) CU	Condición de frontera de aguas abajo
9	NREACH	I	1-5	---	Número de tramos

I - Entero
C - Carácter
D - Doble precisión

Registro tipo 10 - Parámetros específicos a un tramo

El registro tipo 10 establece los parámetros para cada tramo (tabla 5). En forma diferente a los registros tipo 1-9, el registro 10 contiene más de una variable de entrada. El primer campo en el registro indica el número de segmentos contenidos en el tramo, NSEG, y el segundo campo especifica la longitud del tramo, RCHLEN. Estos dos parámetros definen la longitud de cada segmento, DELTAX, tal como se describe en la sección 3.3. El coeficiente de dispersión, DISP, el área de la zona de almacenamiento, AREA2, y el coeficiente de intercambio de la zona de almacenamiento, ALPHA, complementan el registro 10. Dado que este tipo de registro es utilizado para parámetros específicos a un tramo, debe repetirse NREACH veces, una vez por cada tramo de la red de la corriente.

El mecanismo de almacenamiento transitorio puede inhabilitarse fijando ALPHA en 0.0, tal como se ilustra en la aplicación 3 (sección 4.3). Para evitar la división por cero, AREA2 debe fijarse en un valor diferente de cero. Este valor no afectará, sin embargo, los resultados de la simulación con la condición de que ALPHA sea 0.0.

Tabla 5. El fichero de parámetros - registro tipo 10

Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
NSEG	I	1-5	---	Número de segmentos por tramo
RCHLEN	D	6-18	L	Longitud del tramo
DISP	D	19-31	L ² /seg	Coefficiente de dispersión
AREA2	D	32-44	L ²	Área de la sección transversal en la zona de almacenamiento
ALPHA	D	45-57	/segundo	Coefficiente de intercambio en la zona de almacenamiento

I - Entero
D - Doble precisión

Nota: Registro tipo 10 se repite para cada tramo (NREACH veces).

Registro tipo 11 - Número de solutos, opciones químicas

El registro 11 contiene tres campos (tabla 6). El número de solutos, NSOLUTE, se especifica en el primer campo. El segundo y tercer campos especifican las opciones químicas, IDECAY e ISORB. Solutos conservativos tales como trazadores se modelan fijando IDECAY e ISORB en 0 (cero). Solutos no-conservativos sujetos a decaimiento de primer orden se modelan fijando IDECAY en 1 y especificando los coeficientes de decaimiento de primer orden en el registro tipo 12. La sorción se modela fijando ISORB en 1 y especificando los parámetros de sorción en el registro tipo 13.

Tabla 6. El fichero de parámetros - registro tipo 11

Variables de entrada	Formato	Columnas	Descripción
NSOLUTE	I	1-5	Número de solutos
IDECAY	I	6-10	Opciones de decaimiento
ISORB	I	11-15	Opciones de sorción

I - Entero

Registro tipo 12 - Coeficientes de decaimiento de primer orden (opcional)

Nota: el registro 12 se omite si decaimiento de primer orden no se modela (IDECAY=0, registro tipo 11).

Coeficientes de decaimiento de primer orden se especifican en el registro 12 (tabla 7). El primer campo en el registro tipo 12 especifica el coeficiente de decaimiento temporal para el canal principal, LAMBDA; el coeficiente de decaimiento de primer orden para la zona de almacenamiento, LAMBDA2, se especifica en el segundo campo [ver ecuaciones (3) y (4)].

Dado que se permite la variación de coeficientes de decaimiento de primer orden de un tramo a otro y entre solutos, el registro tipo 12 se utiliza varias veces dentro un fichero de parámetros dado. Después de especificar los coeficientes de decaimiento para el primer soluto en el tramo 1, el registro tipo 12 se repite para los tramos restantes (el registro tipo 12 es utilizado NREACH veces para el soluto 1). En forma similar, el registro 12 se repite NREACH veces para los solutos restantes.

Tabla 7. El fichero de parámetros - registro tipo 12

Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
LAMBDA	D	1-13	/segundo	Coeficiente de decaimiento de primer orden en canal principal
LAMBDA2	D	14-26	/segundo	Coeficiente de decaimiento de primer orden en zona de almacenamiento

D - Doble precisión

Nota: Para cada soluto, el registro tipo 12 se repite una vez por cada tramo (NREACH veces).

Registro tipo 13 - Parámetros de sorción (opcional)

Nota: El registro 13 se omite si sorción no se modela (ISORB=0. registro tipo 11).

El registro tipo 13 consta de 5 campos que especifican los parámetros de sorción para un soluto dado en cada tramo (tabla 8). Los campos uno y dos contienen LAMHAT y LAMHAT2, los coeficientes de sorción en el canal principal y en la zona de almacenamiento; los campos restantes especifican la masa de sedimento / volumen de agua accesible (RHO), el coeficiente de distribución (KD), y la concentración de soluto base ambiental (background) de la zona de almacenamiento (CSBACK) [ver ecuaciones (3) y (4)].

Dado que se permite la variación de parámetros de sorción de un tramo a otro y entre solutos, el registro tipo 13 se utiliza varias veces dentro de un fichero de parámetros dado. Después de especificar los parámetros de sorción para el soluto uno en el tramo uno, el registro tipo 13 se repite para los tramos restantes (el registro tipo 13 se utiliza NREACH veces para el soluto 1). En forma similar, el registro 13 se repite NREACH veces para los solutos restantes.

Tabla 8. El fichero de parámetros - registro tipo 13

Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
LAMHAT	D	1-13	/segundo	Coefficiente de tasa de sorción en canal principal
LAMHAT2	D	14-26	/segundo	Coefficiente de tasa de sorción en zona de almacenamiento
RHO	D	27-39	CU	Masa de sedimento accesible/volumen de agua
KD	D	40-52	/CU	Coefficiente de distribución
CSBACK	D	53-65	CU	Concentración base ambiental de la zona de almacenamiento

D - Doble precisión

Nota: Para cada soluto, el registro Tipo 13 se repite una vez por cada tramo (NREACH veces).

Registro tipo 14 y 15 - Puntos de impresión

Mientras que los registros tipo 2 y 3 especifican intervalos de tiempo y tipo de impresión de salida, los registros tipo 14 y 15 controlan los puntos (lugares) a lo largo de la corriente para los cuales se imprimen resultados (tabla 9). La aproximación descrita aquí permite al usuario solicitar concentraciones de solutos en varios lugares o número de puntos a lo largo de la corriente. El registro 14 especifica el número de puntos de impresión, NPRINT, y la opción de interpolación, IOPT. El registro 15 especifica la distancia de un punto de impresión dado, PRTLOC, y se repite NPRINT veces.

Si la opción de interpolación (IOPT) se fija en 1, la concentración en cada punto de impresión se determina mediante interpolación lineal utilizando los centros de los dos segmentos más cercanos al punto de impresión. Si a IOPT se le asigna un valor 0, la concentración en cada punto de impresión se fija en un valor igual a la concentración del segmento de aguas arriba más cercano. En varias aplicaciones, la especificación de IOPT tiene un efecto insignificante en los resultados de la simulación. La selección de la opción de interpolación (IOPT=1) puede ser ventajosa cuando se utilizan segmentos largos (DELTA). La interpolación no es recomendable cuando los puntos de impresión están cerca al extremo de aguas abajo de un tramo y el tramo siguiente está caracterizado por parámetros que difieren considerablemente con los del tramo actual.

Tabla 9. El fichero de parámetros - registro tipos 14 y 15

Registro tipo	Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
14	NPRINT	I	1-5	---	Número de puntos de impresión
14	IOPT	I	6-10	---	Opciones de interpolación
15*	PRTLOC	D	1-13	L	Puntos de impresión

I - Entero
D - Doble precisión

* Nota: El registro tipo 15 se repite para cada punto de impresión (NPRINT veces).

Registro tipo 16 y 17 - Condiciones de frontera (contorno) de aguas arriba

El último tipo de registro en el fichero de parámetros especifica la condición de frontera (contorno) dinámica de aguas arriba. Como se ilustra en la tabla 10, el número de condiciones de frontera, NBOUND, y la opción de condición de frontera, IBOUND, se establecen utilizando el registro 16. Las NBOUND condiciones de frontera (contorno) aguas arriba se caracterizan mediante un tiempo de inicio y un valor de frontera para cada soluto. El momento al cual la condición de frontera se hace efectiva, USTIME, se especifica en el campo uno del registro tipo 17 (tabla 11). El campo dos, USBC, se repite horizontalmente para cada soluto modelado (las columnas 14-26 contienen el valor de frontera para el soluto uno, las columnas 27-39 para el soluto dos, y así sucesivamente). Después de especificar USTIME y USBC, el registro 17 se repite por cada cambio en las concentraciones de frontera (se utiliza NBOUND veces).

Tabla 10. El fichero de parámetros - registro tipo 16

Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
NBOUND	I	1-5	---	Número de condiciones de frontera
IBOUND	I	6-10	---	Opción de condición de frontera

I - Entero

Tabla 11. El fichero de parámetros - registro tipo 17, Condiciones de frontera agua arriba

Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
USTIME	D	1-13	hora	Tiempo de inicio de una condición de frontera
USBC	D	14-26*	CU; CU-L ³ /seg*	Valor de frontera aguas arriba

D - Doble precisión

- * Notas: (1) Si hay mas de un soluto, USBC se repite horizontalmente (el valor del soluto uno se coloca en las columnas 14-26, el calor del soluto 2 en las columnas 27-39 y así sucesivamente)
 (2) El registro 17 se repite una vez para cada condición de frontera (NBOUND veces).
 (3) Las unidades de USBC son dependientes del valor de IBOUND en el registro tipo 16.

La interpretación de USBC depende del tipo de condición de frontera de aguas arriba especificada. Pueden especificarse tres tipos de condiciones de frontera utilizando la opción de condición de frontera, IBOUND, tal como se observa en la figura 12. Un perfil de concentración consistente en un pulso de duración finita se impone en la frontera de aguas arriba para IBOUND igual a 1. Bajo esta opción, USBC corresponde a la concentración de la frontera de aguas arriba, C_{bc} , descrita en la sección 2.6.1. Para un perfil de concentración consistente en un pulso de duración finita C_{bc} se fija inicialmente en el primer valor de frontera ($USBC_j$) y es subsecuentemente actualizada (en $USBC_{j+1}$, $USBC_{j+2}$, ...) a los tiempos correspondientes ($USTIME_{j+1}$, $USTIME_{j+2}$, ...).

Un perfil de flujo de masa de duración finita se impone en la frontera de aguas arriba para IBOUND igual a 2. Bajo esta opción, USBC corresponde a QC_{bc} , donde Q es el caudal en la frontera de aguas arriba ($Q=QSTART$ en la figura 9 y tabla 13). Para un perfil de flujo de masa de duración finita, el primer valor de frontera ($USBC_j$) se divide por Q con el fin de obtener un valor inicial de C_{bc} . La concentración en la frontera de aguas arriba se actualiza subsecuentemente a los tiempos correspondientes ($USTIME_{j+1}$, $USTIME_{j+2}$, ...). Un ejemplo de una condición de frontera (contorno) consistente en un pulso de duración finita de flujo de masa se presenta en la sección 4.4.

Un perfil continuo de concentración se impone en la frontera de aguas arriba para IBOUND igual a 3. Bajo esta opción, C_{bc} se actualiza para cada intervalo de tiempo del modelo. El valor asignado a C_{bc} se determina mediante interpolación lineal utilizando los valores especificados de USBC. Para habilitar la interpolación, el tiempo de la última condición de frontera ($USTIME_{NBOUND}$) debe ser mayor que o igual a, el tiempo de simulación final, TFINAL (registro tipo 6). Un ejemplo de una condición de frontera (contorno) de concentración continua se presenta en la sección 4.5.

3.5.5 Fichero de flujo

El fichero de flujo define los parámetros del modelo que pueden variar potencialmente en el tiempo. Estos parámetros incluyen el caudal (Q , QSTART), los flujos laterales (QLATIN, QLATOUT), el área de la sección transversal del canal principal (AREA), y la concentración del flujo lateral (CLATIN). Estos parámetros se conocen colectivamente como las variables de flujo.

Condiciones de frontera agua arriba

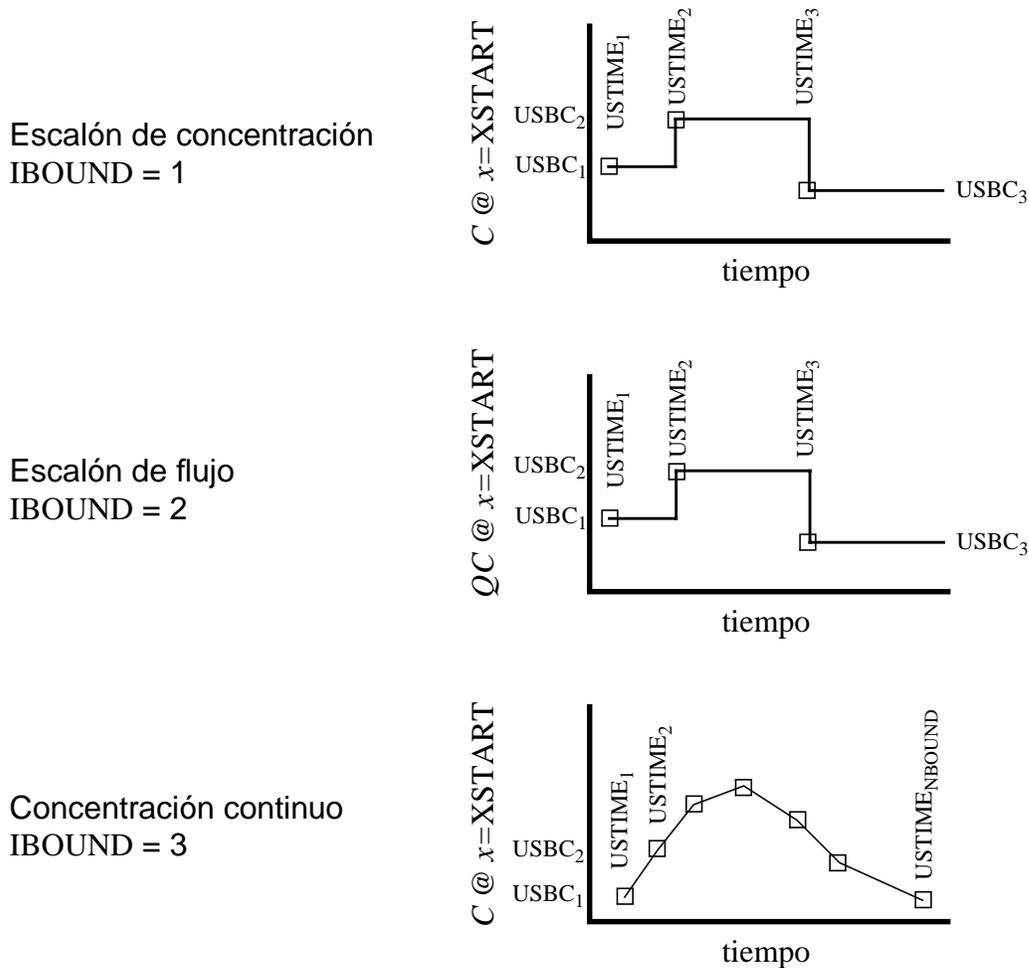


Figura 12. Opciones de la condición de frontera agua arriba. La condición de frontera aguas arriba puede ser establecida en términos de un perfil de un escalón de concentración, un perfil de un escalón de flujo o un perfil de concentración continuo.

El formato del fichero de flujo depende de la naturaleza de los parámetros contenidos dentro de él. Si todas las variables de flujo son constantes con respecto al tiempo, el flujo es estacionario, mientras que si alguna de las variables de flujo cambia en el tiempo, el régimen de flujo es considerado no-estacionario.

Bajo condiciones de flujo estacionario, las variables de flujo se especifican en la base de tramo-por-tramo. Cuando el flujo es no estacionario, las variables de flujo se especifican utilizando puntos de flujo. Los formatos de los ficheros de flujo estacionario y no-estacionario se presentan a continuación.

El fichero de flujo - Flujo estacionario

Cuando las variables de flujo son constantes con respecto al tiempo, se invoca la opción de flujo estacionario. Como se observa en las secciones siguientes, la especificación de un fichero de flujo estacionario es relativamente sencilla.

Registro tipo 1 - Indicador de cambio-en-el-flujo. El primer tipo de registro en el fichero de flujo es el indicador de cambio en el flujo, QSTEP. Este tipo de registro es utilizado para definir el régimen de flujo. Como se indica en la tabla 12, QSTEP es el intervalo de tiempo entre cambios en las variables de flujo. Aquí, estamos interesados en el régimen de flujo estacionario en el cual las variables de flujo son constantes. En este caso, QSTEP, se fija en cero.

Tabla 12. Fichero de flujo estacionario - registro tipo 1

Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
QSTEP	D	1-13	hora	Indicador de cambio en flujo (establecerlo en 0)

D - Doble precisión

Registros tipos 2 y 3 - Variables de flujo. Los restantes tipos de registro en el fichero de flujo estacionario se describen en las tablas 13 y 14. El registro tipo 2 establece el caudal en la frontera de aguas arriba, QSTART. Las restantes variables de flujo se fijan utilizando el registro 3. Como se observa en la tabla 14, los primeros 3 campos de este registro especifican los flujos laterales (QLATIN y QLATOUT) y el área de la sección transversal (AREA) para un tramo particular. El cuarto campo, que se utiliza para indicar la concentración del soluto del flujo lateral (CLATIN), se repite horizontalmente para cada soluto modelado. Dado que las variables de flujo varían de tramo a tramo, el registro tipo 3 debe repetirse para cada tramo en la red.

Tabla 13. Fichero de flujo estacionario - registro tipo 2

Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
QSTART	D	1-13	L ³ /seg	Tasa de flujo en la frontera aguas arriba

D - Doble precisión

Tabla 14. Fichero de flujo estacionario - registro tipo 3

Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
QLATIN	D	1-13	L ³ /seg-L	Tasa de entrada flujo lateral en el tramo j
QLATOUT	D	14-26	L ³ /seg-L	Tasa de salida flujo lateral en el tramo j
AREA	D	27-39	L ²	Área del canal principal en tramo j
CLATIN*	D	40-52*	CU	Concentración de soluto en la entrada de flujo lateral

D - Doble precisión

* Notas: (1) Si hay mas de un soluto, CLATIN se repite horizontalmente (el flujo entrante lateral del soluto uno se coloca en las columnas 40-52, la concentración del soluto dos se coloca en las columnas 53-65, y así sucesivamente).

(2) El registro tipo 3 se repite una vez por cada tramo en la red del arroyo.

El fichero de flujo - Flujo no-estacionario

Con la provisión o introducción de parámetros de flujo variables en el tiempo viene asociado un incremento en la complejidad del modelo. Como resultado, el formato del fichero de flujo no-estacionario difiere notoriamente del formato presentado para el caso estacionario. Adicionalmente, el fichero de flujo no-estacionario es bastante más largo que su contraparte estacionaria, dado que varios tipos de registro deben repetirse para cada cambio en las variables de flujo.

El formato que se utiliza aquí es compatible con modelos estándares de tránsito tales como DR3M (Alley y Smith, 1982) y DAFLOW (Jobson, 1989). Como se discute a continuación, los registros tipo 2-8 permiten la especificación de parámetros variables en el tiempo en varios puntos (lugares) a lo largo del canal de la corriente. Estos tipos de registro pueden ser creados mediante la modificación de resultados del modelo de tránsito seleccionado.

Registro tipo 1 - Indicador de cambio-en-el-flujo. Bajo el régimen de flujo no estacionario, las variables de flujo se leen del fichero cuando ocurren cambios en los valores de flujo. Por lo tanto QSTEP define los intervalos de tiempo en los cuales las variables de flujo son actualizadas (tabla 15). Si las variables de flujo cambian cada 15 minutos, por ejemplo, QSTEP debe fijarse en 0.25 horas y las variables se leen en el instante correspondiente.

Tabla 15. Fichero de estado no estacionario - registro tipo 1

Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
QSTEP	D	1-13	hora	Intervalos de tiempo entre cambios en flujo

D - Doble precisión

Registro tipo 2 y 3 - Puntos de flujo. Cuando se dispone de mediciones detalladas de campo, puede ser apropiado especificar variables de flujo variables en el tiempo en varios puntos a lo largo de la corriente. Estos valores pueden estar disponibles como resultados de modelos hidrológicos o hidráulicos de tránsito de caudales. El formato del fichero de flujo permite al usuario definir un número de puntos de flujo en los cuales se especifican las variables de flujo (tabla 16). Estos puntos de flujo frecuentemente corresponden con los tramos que se definen en el fichero de parámetros. (Sin embargo, esta correspondencia no se requiere obligatoriamente.) Utilizando los datos proporcionados en los puntos de flujo, el modelo interpola linealmente valores de caudal y área (Q, AREA) para cada segmento en la red de tramos de la corriente. Flujos laterales y concentraciones (QLATIN, CLATIN) también se fijan utilizando los puntos de flujo.

El registro tipo 2 indica el número de puntos de flujo, NFLOW. El registro tipo 3 especifica la distancia de un punto de flujo dado. Este registro se utiliza NFLOW veces, una vez por cada punto de flujo.

Varios requerimientos deben tenerse en mente al especificar los puntos de flujo. Los requerimientos, listados a continuación, son chequeados internamente por el modelo:

- Los puntos de flujo deben suministrarse en orden ascendente (hacia aguas abajo); el segundo punto debe estar aguas abajo del primero, el tercer punto debe estar aguas abajo del segundo, y así sucesivamente.
- El primer punto de flujo debe localizarse en la frontera de aguas arriba de la red de tramos de la corriente. Esto implica que $FLOWLOC_1$ es igual a XSTART, donde XSTART es la punto inicial en el fichero de parámetros. Nótese que el flujo especificado en este primer punto es análogo al parámetro QSTART en el fichero de flujo estacionario.
- El último punto de flujo debe localizarse en o bajo la frontera de aguas abajo.

Tabla 16. Fichero de estado estacionario - registro tipos 2 y 3

Registro tipo	Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
2	NFLOW	I	1-5	---	Número de puntos de flujo
3*	FLOWLOC	D	1-13	L	Localización del flujo

I - Entero

D - Doble precisión

*Nota: El registro tipo 3 se repite por cada punto de flujo (NFLOW veces)

Registros tipo 4-7 - Flujos laterales, caudales y áreas. En contraste con el fichero de flujo estacionario, flujos laterales y concentraciones (QLATIN, CLATIN) no corresponden necesariamente a tramos específicos. En el fichero de flujo no-estacionario, estos parámetros se especifican para cada punto de flujo. El valor especificado se utiliza para todos los segmentos entre el punto de flujo actual y el punto de flujo inmediatamente aguas arriba (desde el punto $j-1$ al punto j). Nótese que este esquema corresponde con el de flujo estacionario si los puntos de flujo se localizan al final de cada tramo. Como se indicó anteriormente, los valores de caudal y área (Q, AREA) en los puntos de flujo se utilizan para interpolar valores en los segmentos dentro de la red de tramos.

Valores para el flujo lateral, el caudal, el área, y la concentración del flujo lateral se establecen para cada punto de flujo utilizando los registros tipo 4-7, respectivamente. Como se indica en la tabla 17, los campos de entrada en estos registros (QLATIN, Q, AREA, CLATIN) se repiten horizontalmente para cada punto de flujo. Los valores para el punto de flujo uno aparecen en las columnas 1-13, mientras aquellos para el punto de flujo dos aparecen en la columna 14-26 y así sucesivamente. El registro tipo 7 se utiliza una vez por cada soluto (el registro tipo 7 se utiliza NSOLUTE veces).

Nótese que los registros tipo 4-7 se repiten para cada cambio en las variables de flujo. Por ejemplo, si las variables de flujo cambian cada 15 minutos (QSTEP= 0.25 horas), estos registros se repetirán cuatro veces por cada hora de tiempo de simulación. Como resultado de esta repetición, el fichero de flujo no-estacionario puede contener un gran número de registros.

Tabla 17. Fichero de estado no estacionario - registro tipos 4-7

Registro tipo	Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
4*	QLATIN	D	1-13*	L ³ /seg-L	Velocidad de entrada de flujo lateral del punto j-1 a j
5*	Q	D	1-13*	L ³ /seg	Tasa de flujo en el punto de flujo j
6*	AREA	D	1-13*	L ²	Área del canal principal en el punto de flujo j
7*	CLATIN	D	1-13*	CU	Concentración del flujo lateral de entrada de la localidad j-1 a j

D - Doble precisión

- * Notas: (1) QLATIN, Q, AREA y CLATIN se repiten horizontalmente para cada punto de flujo especificado (Los valores para el punto de flujo uno se establecen usando las columnas 1-13, para el punto dos usando las columnas 14-26, y así sucesivamente).
 (2) El registro tipo 7 se repite para cada soluto (NSOLUTE veces).
 (3) El bloque de registro tipos 4-7 se repite para cada cambio en las variables de flujo.

3.5.6 Fichero de datos (OTIS-P únicamente)

El fichero de datos proporciona los datos observados de concentración utilizados dentro de OTIS-P para la estimación de parámetros. El fichero de datos está compuesto por dos tipos de registros. El registro tipo 1 especifica el número de observaciones asociadas con cada tramo, N (tabla 18). El registro tipo 2 especifica los datos de concentración observados (tablas 19 y 20). Dado que OTIS-P puede ser utilizado para simulaciones de estado-estacionario o dinámicas, el formato del registro 2 depende del modo de simulación. Para simulaciones de estado-estacionario, el campo uno del registro tipo 2 especifica la distancia de cada observación, DIST. Para simulaciones dinámicas el campo uno del registro tipo 2 especifica el tiempo asociado con cada observación, TIME. En ambos casos, el campo dos del registro tipo 2 especifica la concentración observada, CONC.

Tabla 18. El fichero de datos - registro tipo 1

Variables de entrada	Formato	Columnas	Descripción
N	I	1-5	Número de observaciones, tramo <i>j</i>

Tabla 19. El fichero de datos - registro tipo 2 (Simulaciones en estado estacionario)

Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
DIST	D	1-15	L	Distancia entre los datos observados
CONC	D	16-30	CU	Concentraciones observadas

Tabla 20. El fichero de datos - registro tipo 2 (Simulaciones variables en el tiempo)

Variables de entrada	Formato	Columnas	Unidades	Descripción
TIME	D	1-15	hora	Tiempo que corresponde a los datos observados
CONC	D	16-30	CU	Concentraciones observadas

I - Entero

D - Doble precisión

Notas: (1) Para cada tramo, el registro tipo 2 se repite para cada observación (N veces).

(2) Repetir el bloque de registros tipo 1 y 2 para cada tramo (tipos 1 y 2 se especifican primero para el tramo uno, seguido por los tipos 1 y 2 para el tramo dos y así sucesivamente).

Dentro del fichero de datos, los registros tipo 1 y tipo 2 se utilizan varias veces. Para el primer tramo, el registro tipo 1 se utiliza con el fin de especificar el número de observaciones, N. El registro tipo 2 se utiliza entonces N veces con el fin de especificar los datos observados para el tramo uno. Este bloque de N+1 registros se repite para los tramos restantes. Nótese que para simulaciones de tiempo-variable, la distancia asociada con cada observación está dada por el correspondiente punto de impresión (sección 3.5.4); por ejemplo, la distancia asociada con cada observación en el tramo uno está determinada por el punto de impresión uno. Ficheros de ejemplo se presentan en las secciones 4.5 y 4.6.

3.5.7 El fichero de entrada STARPAC (OTIS-P únicamente)

El fichero de entrada STARPAC especifica varios parámetros que controlan el algoritmo STARPAC NLS utilizado en OTIS-P. Varios de los parámetros presentados a continuación se discuten con mayor detalle en la Guía del Usuario de STARPAC (Donaldson y Tyron, 1990), un documento que hace parte de la página base de OTIS (<http://co.water.usgs.gov/otis>). Valores típicos de los parámetros se indican en la sección 4.5, donde se presenta un ejemplo de un fichero de entrada STARPAC.

Los registros 1-7 se muestran en la tabla 21. La opción de revisión de ponderación, IWEIGHT (registro tipo 1), determina los factores de ponderación descritos en la sección 2.7. Si IWEIGHT se fija en 0, cada factor de ponderación se fija en 1.0 de tal forma que a cada error se le da la misma importancia (mínimos cuadrados no-lineales no-ponderados). Si IWEIGHT se fija en 1, los factores de ponderación correspondientes a cada observación se asignan con base en la ecuación (41) (Sección 2.7).

Tabla 21. El fichero de entrada STARPAC - registros tipo 1-7

Registro tipo	Variables de entrada	Formato	Columnas	Descripción
1	IWEIGHT	I	1-5	Opción de revisión de peso
2	IVAPRX	I	1-5	Opción de varianza-covarianza
3	MIT	I	1-5	Número máxima de iteraciones
4	NPRT	I	1-5	Opción de impresión STARPAC
5	DELTA	D	1-13	Máximo cambio de escala, primera iteración
6	STOPP	D	1-13	Valor de alto para el parámetro de convergencia
7	STOPSS	D	1-13	Valor de alto para la convergencias de sumas de cuadrados

I - Entero

D - Doble precisión

El registro tipo 2 especifica la opción varianza-covarianza, IVAPRX. Como se describe en la documentación de STARPAC (Donaldson y Tyron, 1990), tres aproximaciones de la matriz de varianza-covarianza están disponibles. La aproximación por omisión (default), basada en la suposición de residuos suficientemente pequeños, se selecciona fijando IVAPRX en 1. Valores adicionales para IVAPRX se describen en Donaldson y Tyron (1990).

El registro tipo 3 especifica el número máximo de iteraciones, MIT, el registro tipo 4 especifica la opción de impresión de STARPAC, NPRT. NPRT es un entero de cinco-dígitos que determina el formato de resultados del fichero STARPAC de salida. Cada dígito de NPRT corresponde a una de las cinco secciones de salida de STARPAC. Al fijar el *i*-ésimo dígito de NPRT en 0 se suprimen resultados de la *i*-ésima sección, y valores de 1 o 2 resultan en resultados de salida resumidos o completos, respectivamente. Un valor de 22222, por ejemplo, produce en resultados completos para todas las secciones.

El registro tipo 5 especifica DELTA, el máximo cambio relativo permitido en los parámetros durante la iteración inicial. DELTA se utiliza como el diámetro inicial de la región de confianza, d_0 (sección 2.7; figura 7). A pesar de que el valor por omisión (default) de DELTA es 100, valores más pequeños pueden justificarse si los estimadores de los parámetros dejan la región de interés durante la primera iteración.

Los registros tipo 6 y 7 especifican los criterios de convergencia, STOPP y STOPSS. Como se establece en las ecuaciones (45) y (46), STOPP y STOPSS se utilizan con el fin de determinar en qué momento la estimación iterativa de parámetros ha convergido a la solución óptima. La solución iterativa ha convergido cuando los valores de los parámetros no continúan cambiando (en relación a STOPP) o cuando la suma de residuos cuadrados no cambia (en relación a STOPSS). STOPP y STOPSS son

independientes de la escala; si STOPP es igual a 10^{-4} , la ecuación (45) se cumplirá si los primeros cuatro dígitos de cada parámetro son iguales en dos iteraciones sucesivas. Similarmente, si STOPSS es igual a 10^{-4} , la ecuación (46) se cumplirá si los primeros cuatro dígitos de la suma de residuos cuadrados son iguales en dos iteraciones sucesivas.

Los parámetros restantes de STARPAC se especifican en el registro tipo 8 (tabla 22). El campo uno del registro tipo 8 especifica IFIXED, la opción que denota si un parámetro se fija (IFIXED=1) o estimado (IFIXED=0). Parámetros fijos no se estiman mediante el algoritmo (NLS) y permanecen constantes en el valor de entrada especificado por el usuario durante el procedimiento de estimación de parámetros. Parámetros estimados se ajustan mediante el algoritmo (NLS) con el fin de obtener una solución óptima; los valores de entrada especificados por el usuario para todos los parámetros estimados se utilizan como estimadores iniciales en el procedimiento de NLS ($\hat{\theta}_0$, fig. 7). El campo dos especifica SCALE, el tamaño típico de cada parámetro. SCALE se utiliza con el fin de normalizar cada parámetro de acuerdo a la ecuación (43). Cuando SCALE se fija en 0.0, se determinan automáticamente valores por omisión (default) en el algoritmo NLS, los cuales son actualizados al inicio de cada iteración.

Tabla 22. El fichero de entrada STARPAC - registro tipo 8

Variables de entrada	Formato	Columnas	Descripción
IFIXED	I	1-5	Opción de parámetro fijo
SCALE	D	6-18	Escala o tamaño tipo del parámetro

I - Entero

D - Doble precisión

Nota:

El registro tipo 8 se repite 10 veces, una por cada uno de los parámetros del modelo que pueden ser estimados. En el registro tipo 8 se presentan los parámetros del modelo en el orden siguiente: DISP, AREA, AREA2, ALPHA, LAMBDA, LAMBDA2, RHO, KD, LAMHAT, LAMHAT2 (la primera presencia del registro tipo 8 se aplica a DISP, la segunda a AREA, y así sucesivamente).

Dado que IFIXED y SCALE dependen de cada parámetro, el registro tipo 8 se repite una vez por cada parámetro del modelo. Como se discutió en la sección 3.2.4, 10 parámetros del modelo pueden ser estimados. Las 10 ocurrencias del registro tipo 8 por lo tanto aplican a DISP, AREA, AREA2, ALPHA, LAMBDA, LAMBDA2, RHO, KD, LAMHAT, y LAMHAT2, respectivamente.

3.6 Ejecución del modelo

Esta sección describe como ejecutar OTIS y OTIS-P bajo los sistemas operacionales UNIX y Windows².

²'Windows', cuando se use aquí, se refiere a Microsoft Windows 3.1, Windows 95 y Windows NT

3.6.1 OTIS

Antes de ejecutar OTIS, los ficheros de entrada requeridos (ficheros de control, parámetros y flujo) deben localizarse en el directorio desde el cual el modelo será ejecutado. Con el fin de ejecutar OTIS, suministre el siguiente comando en la línea de comandos (prompt) de Unix o MS-DOS:³

```
otis
```

Este comando iniciará la simulación de OTIS, con la condición de que el modelo ejecutable otis se encuentre en el directorio actual o en la ruta (path) del usuario (ver sección 5.3). OTIS puede también ejecutarse bajo Windows 95/NT seleccionando mediante el ratón del computador (dos pulsos sucesivos) el modelo ejecutable otis que aparece en Windows Explorer.

Como se discute en la sección 5.5.3, los mensajes de error de OTIS se escriben en la pantalla y el fichero de salida echo.out. Una vez finalizada la simulación, los usuarios pueden inspeccionar el fichero echo.out con el fin de verificar los datos de entrada al modelo y chequear errores de ejecución. Los ficheros de salida de solutos y sorción escritos durante la ejecución del modelo pueden analizarse como se describe en la sección 3.7.

3.6.2 OTIS-P

La ejecución de OTIS-P es muy similar a la de OTIS. Se requieren, sin embargo, varios pasos adicionales tal como se describe en esta sección.

Antes de ejecutar OTIS-P, los ficheros de entrada de control, parámetros, flujo, datos y STARPAC de entrada deben generarse y localizarse en el directorio desde el cual el modelo será ejecutado. Como se discute en la sección 3.5.7, el fichero STARPAC de entrada permite al usuario especificar los parámetros a ser estimados y los parámetros fijos. Estimadores iniciales para todos los parámetros que se estiman se toman de los ficheros de parámetros y de flujo según el caso correspondiente. Parámetros fijos permanecen constantes en el valor inicial especificado por el usuario durante la simulación de OTIS-P.

Con el fin de ejecutar OTIS-P, suministre el siguiente comando en la línea de comandos (prompt) de Unix o MS-DOS:

```
otis-p
```

Este comando iniciará la simulación de OTIS-P, con la condición de que el modelo ejecutable otis-p se encuentre en el directorio actual o en la ruta (path) del usuario. OTIS-P puede también ejecutarse bajo Windows 95/NT seleccionando mediante el ratón del computador (dos pulsos sucesivos) el modelo ejecutable otis-p que aparece en Windows Explorer.

Como en OTIS, los mensajes de error de OTIS-P se escriben en la pantalla y en el fichero de salida echo.out. Una vez finalizada la simulación, los usuarios deben inspeccionar el fichero echo.out con el fin de verificar los datos de entrada al modelo y chequear errores de ejecución.

Adicionalmente a los ficheros de salida de solutos y sorción, OTIS-P crea un fichero de parámetros de salida y un fichero STARPAC de salida. El fichero de parámetros de salida contiene todos los estimadores de parámetros que fueron probados durante el procedimiento de estimación de parámetros y los estimadores finales de dichos parámetros. El fichero de salida STARPAC contiene un resumen del proceso de estimación de parámetros para cada tramo. Este resumen incluye los estimadores de los parámetros, la suma de residuos cuadrados, el tipo de convergencia, e información estadística adicional.

³Como en muchas aplicaciones Unix, otis y otis-p puede hacerse correr colocando el símbolo & después del nombre del comando.

El éxito del proceso de estimación de parámetros para un tramo dado está basado en parte en el tipo de convergencia obtenido. Simulaciones exitosas resultan en convergencia paramétrica o de la suma de residuos cuadrados. Adicionalmente otros dos tipos de convergencia son posibles: falsa convergencia o convergencia singular. Estos tipos de convergencia se discuten en la Guía del Usuario de STARPAC (Donaldson y Tyron, 1990):

Convergencia singular significa que el modelo contiene demasiados parámetros, al menos cerca de la solución, mientras que falsa convergencia puede indicar, bien que STOPSS o STOPP se han fijado muy pequeños para la precisión con la cual el modelo y sus derivadas son calculados, o bien, que existe un error o discontinuidad en la derivada.

Falsas convergencias o convergencias singulares pueden ser eliminadas frecuentemente ejecutando simulaciones adicionales de OTIS-P. Estas simulaciones adicionales utilizan los estimadores finales de los parámetros de la simulación previa de OTIS-P como estimadores iniciales en la simulación actual, (los estimadores de parámetros se toman del fichero STARPAC de salida y se utilizan como los estimadores iniciales en ficheros modificados de parámetros o de flujo). La ejecución de simulaciones múltiples de OTIS-P en forma similar es recomendada en casos de convergencia paramétrica o de suma de residuos cuadrados; las simulaciones de OTIS-P se repiten hasta que los valores finales de los parámetros y la suma de residuos cuadrados sean constantes de una simulación a otra. Un ejemplo de este procedimiento se presenta en la sección 4.5.

3.7 Análisis de resultados

Esta sección describe la mecánica utilizada para interpretar las concentraciones que se escriben en los ficheros de salida de solutos y sorción. La discusión incluye descripciones detalladas de los formatos de los ficheros de resultados (salida) (sección 3.7.1), una utilidad para reformar los ficheros de salida (sección 3.7.2), y alternativas para la graficación de los resultados de simulación (sección 3.7.3).

3.7.1 Los ficheros de salida de solutos y sorción

Como se discute en la sección 3.4, el modelo OTIS de transporte de solutos crea un fichero de solutos de salida por cada soluto modelado. Un fichero de salida de sorción también se crea por cada soluto si se modela sorción (ISORB=1, sección 3.5.4). Los párrafos siguientes describen el formato de los ficheros de resultados de solutos y sorción. En la discusión a continuación, cada línea se describe en términos de un número de campos; cada campo es de 14 caracteres de largo.

El formato de los ficheros de salida de solutos y sorción depende del modo de simulación. Para simulaciones dinámicas, cada fichero de salida de solutos contiene una serie de tiempo de concentración para cada punto de impresión a lo largo de la corriente especificado por el usuario. Como se ilustra en la figura 13, el primer campo de cada línea es el tiempo de simulación, en horas. Los siguientes NPRINT campos proporcionan la concentración del soluto en el canal principal (C) en los NPRINT puntos de impresión (PRTLOC, sección 3.5.4). Si la opción de impresión (PRTOPT, sección 3.5.4) se fija en 2, los restantes NPRINT campos proporcionan la concentración del soluto en la zona de almacenamiento (C_S) en los NPRINT puntos de impresión. El formato del fichero de salida de sorción para simulaciones dinámicas es similar al del fichero de salida de solutos; el campo uno especifica el tiempo de simulación, y los siguientes NPRINT campos proporcionan la concentración en el sedimento del lecho de la corriente (C_{sed}) en los NPRINT puntos de impresión.

Fichero de salida de solutos - Simulación variable en tiempo

tiempo [hora]	Concentración en canal principal, C			Concentración en zona de almacenamiento C_S		
	@PRTLOC1	@PRTLOC2...	@PRTLOC _{NPRINT}	@PRTLOC1	@PRTLOC2...	@PRTLOC _{NPRINT}
8.450000E+00	3.700000E+00	3.700000E+00	3.700000E+00	0.000000E+00	1.850000E+00	3.700000E+00
8.550000E+00	3.700230E+00	3.700000E+00	3.700000E+00	0.000000E+00	1.850000E+00	3.700000E+00
8.650000E+00	4.338749E+00	3.700000E+00	3.700000E+00	0.000000E+00	1.850000E+00	3.700000E+00
8.750000E+00	7.305566E+00	3.700021E+00	3.700000E+00	0.000000E+00	1.850000E+00	3.700000E+00
8.850000E+00	9.607778E+00	3.703966E+00	3.700000E+00	0.000000E+00	1.850005E+00	3.700000E+00
8.950000E+00	1.066443E+01	3.773418E+00	3.700000E+00	0.000000E+00	1.850140E+00	3.700000E+00
9.050000E+00	1.109228E+01	4.108784E+00	3.700000E+00	0.000000E+00	1.851210E+00	3.700000E+00
9.150000E+00	1.126551E+01	4.875030E+00	3.700000E+00	0.000000E+00	1.855119E+00	3.700000E+00

Figura 13. Ejemplo de fichero de salida de solutos para una simulación variable en el tiempo.

Para simulaciones de estado-estacionario, el fichero de salida de solutos contiene una línea por cada segmento en el sistema modelado. El campo uno proporciona la distancia asociada con el segmento dado, mientras que el campo dos proporciona la concentración correspondiente en el canal principal. Si la opción de impresión se fija en 2, la concentración del soluto en la zona de almacenamiento se presenta en el campo tres. El fichero de salida de sorción está organizado en forma similar; el campo uno proporciona la distancia y el campo dos proporciona la concentración del sedimento del lecho de la corriente.

3.7.2 El post-procesador

Los ficheros de salida de solutos y sorción descritos en la sección 3.7.1 pueden ser modificados utilizando un post-procesador simple que está disponible con la versión Unix del modelo OTIS de transporte de solutos. Para simulaciones dinámicas, el post-procesador crea un fichero tiempo-concentración para cada soluto para cada punto de concentración. A su vez, ficheros distancia-concentración son creados para cada soluto cuando se ejecutan simulaciones de estado-estacionario. Los ficheros de salida del post-procesador pueden graficarse al tiempo con los datos observados utilizando utilidades basadas en Unix tales como Xgraph (Harrison, 1989).

Para ver una lista de opciones de post-procesamiento disponibles, teclee lo siguiente en la línea de comandos:

```
postproc -h
```

El post-procesador puede ser utilizado para procesar los resultados de ambos modelos OTIS y OTIS-P. El post-procesador para OTIS se obtiene tecleando:

```
postproc
```

mientras que el post-procesador para OTIS-P se obtiene tecleando:

```
postproc -p
```

Las concentraciones del soluto en la zona de almacenamiento se incluyen en los ficheros post-procesados adicionando las banderas -s a los comandos anteriores (con la condición de que PRTOPT=2).

3.7.3 Alternativas de graficación (ploteado)

Los usuarios del modelo tienen diferentes alternativas para graficar los resultados del modelo OTIS de transporte de solutos. Una alternativa bajo el sistema operacional de Unix es utilizar el post-procesador descrito en la sección 3.7.2 y la utilidad de graficación Xgraph. Un ejemplo de esta alternativa se describe a continuación. Por ejemplo suponga que el nombre del fichero de salida de solutos es `solute.out` y uno de los puntos de impresión está localizado a una distancia de 100. En este caso, el post-procesador crea un fichero de salida llamado `solute.out.100.xgr` (ficheros adicionales `.xgr` se crean para los restantes puntos de impresión). Resultados de simulación y datos observados del punto de impresión a 100 se grafican como sigue:

```
xgraph -bb -tk -m solute.out.100.xgr obs100.dat
```

donde `obs100.dat` contiene los datos observados.

Los usuarios utilizando el modelo OTIS de transporte de solutos bajo Windows pueden graficar resultados de simulación importando los ficheros de salida y/o sorción en una hoja electrónica. Las columnas en la hoja electrónica corresponden al formato de los ficheros de salida descritos en la sección 3.7.1.

4.0 APLICACIONES DEL MODELO

En esta sección se presentan varias aplicaciones del modelo OTIS, de transporte de solutos. Cada aplicación esta diseñada para ilustrar una o mas características únicas del modelo. Se anima al lector a explorar todas las aplicaciones proporcionada para obtener una visión completa de las capacidades del modelo. Aplicaciones adicionales de este se presentan en Broshears y otros (1993), Valett y otros (1996), y Morrice y otros (1997).

Cada aplicación tiene 4 componentes básicos: (a) una descripción de las características del modelo que se ilustran en la aplicación, (b) una breve descripción del problema, (c) una muestra de ficheros de entrada, y (d) los resultados de la simulación. La muestra de ficheros de entrada suplementa la descripción de los requerimientos de entrada presentados en la sección 3.5. Estos ejemplos de ficheros de entrada están comentados para ilustrar como se usan los registros tipo dentro de los diversos ficheros. Debido a limitaciones de espacio, no se muestran todos los ficheros de entrada en cada aplicación. Una colección completa de ficheros de entrada está accesible como parte de la distribución de software. (sección 5.2)

4.1 Aplicación 1: Transporte conservativo (OTIS)

Esta aplicación ilustra el formato de los ficheros de entrada usados en OTIS. La aplicación supone una simulación en tiempo variable de un trazador conservativo, quizás el uso mas común del modelo de transporte de solutos OTIS.

Bencala y Walters (1983) describen un experimento en un cauce en el que se usó cloruro se usó como un trazador conservativo. El experimento se realizó en el arroyo Uvas, una pequeña corriente de saltos y estanques en el norte de California. Durante el experimento, se inyectó cloruro en cantidad constante durante 3 horas y se midieron las concentraciones en 5 puntos agua abajo (38, 105, 281, 433, y 619 metros). Las simulaciones se combinaron con datos experimentales para cuantificar las características hidrodinámicas del arroyo Uvas (Bencala y Walters, 1983).

Mas abajo se muestran parte de los ficheros de entrada correspondientes a la simulación de cloruro en el arroyo Uvas. En los ficheros de entrada las unidades determinadas por el usuario para concentración (CU) y longitud (L) son miligramos por litro y metros respectivamente. La figura 14 dibuja el fichero de control donde esta están especificados los nombres de los ficheros de parámetros, flujo y salida de solutos. Los parámetros invariantes en el tiempo del modelo se leen de `params.inp`, y la información sobre el flujo se lee de `q.inp` (registros tipo 1 y 2). La concentraciones simuladas del cloruro se escriben en `cl.out` (registro tipo 3).

Fichero control para la Aplicación 1

```

#####
#
#           OTIS control file
#
#
# line           name of the:
# ----          -
# 1              parameter file
# 2              flow file
# 3 to 2+NSOLUTE  solute output files
# 3+NSOLUTE to 2+(NSOLUTE*2)  sorption output files (ISORB=1 only)
#
#####
1  params.inp
2  q.inp
3  cl.out

```

Figura 14. Fichero de control para la Aplicación 1.

La figura 15 muestra el fichero de parámetros para la simulación de cloruros. Para cada simulación, las concentraciones en el canal principal y en la zona de almacenamiento se imprimen cada 0.1 horas (registros tipo 2 y 3). El escalón de tiempo de integración es 0.05 horas, comenzando la simulación a las 8.25 horas y finalizando a las 24.0 horas. (registros tipo 4, 5 y 6). La frontera aguas arriba de la red se localiza a 0.0 metros y hay una condición, aguas abajo, de no flujo (registros tipo 7 y 8).

La corriente está dividida en 5 tramos (registro tipo 9). El registro tipo 10 se usa repetidamente para especificar la geometría de cada tramo y los parámetros específicos del tramo (coeficiente de dispersión, área de la zona de almacenamiento, coeficiente de cambio). La longitud de los tramos uno a 4 se especifica de tal manera que los tramos acaban en los puntos de muestreo. El último tramo se extiende un incremento de 50 metros, aguas abajo, para reducir cualquier error introducido por la condición de frontera de aguas abajo (ver sección 2.6.2 y sección 3.5.4).

Sólo se modela un soluto y no se incluyen reacciones químicas (registro tipo 11). Dado que el cloruro se modela como un soluto conservativo ($ISORB=IDECAY=0$), se omiten los registros tipo 12 y 13. Los resultados de la simulación se imprimen en 5 puntos que se corresponden con los puntos de muestreo y no se solicita interpolación (registros tipo 14 y 15)

Como en muchas simulaciones de experimentos de trazadores, la condición de frontera, aguas arriba) está en términos de una función escalonada de entrada representando tres periodos de tiempo (registro tipo 16). La primera y tercera condiciones de frontera representan las concentraciones de cloruro correspondientes a los periodos de preinyección y postinyección; la segunda condición es efectiva durante 3 horas para representar el periodo de inyección (registro tipo 17).

El fichero de flujo para el arroyo Uvas se muestra en la figura 16. Se especifican condiciones de flujo estacionario, y el flujo en la frontera aguas arriba es 0.0125 metros cúbicos por segundo (registros tipo 1 y 2). El registro tipo 3 se usa repetidamente para especificar las variables de flujo en cada tramo. El caudal se incrementa agua abajo debido al flujo lateral ($QLATIN > 0$). El área de la sección transversal del canal principal varía de tramo en tramo, mientras que la concentración de entrada de cloruro es constante en el espacio.

Los resultados de la simulación desde el fichero de salida de solutos (cl.out) se muestran en la figura 17. Las concentraciones simuladas de cloruros en los puntos de impresión segundo y cuarto (105 y 433 metros) se comparan favorablemente con las concentraciones observadas.

Fichero de parámetro, aplicación 1

```

#####
#
#           OTIS parameter file
#
#   1972 Uvas Creek Tracer Injection, Conservative Transport of Chloride
#
#   Parameter Values from:
#
#   Bencala, K.E. and R.A. Walters, 1983, Water Resour.Res.,19(3),718-724.
#
#####
1  Bencala & Walters, Uvas Creek Chloride
2  2                PRTOPT
3  0.10            PSTEP [hour]
4  0.05            TSTEP [hour]
5  8.25            TSTART [hour]
6  24.00           TFINAL [hour]
7  0.0             XSTART [meters]
8  0.0             DSBOUND [(L/sec)CU]
9  5               NREACH
#####
#
#   Physical Parameters for each reach
#
#NSEG RCHLEN      DISP      AREA2      ALPHA
#-----|-----|-----|-----|-----|
10  38  38.0      0.12      0.05      0.0
10  67  67.0      0.15      0.05      0.0
10  176 176.0     0.24      0.36     3.0e-5
10  152 152.0     0.31      0.41     1.0e-5
10  236 236.0     0.40      1.56     4.5e-5
#####
#
#   Number of Solutes and flags for decay and sorption
#
# NSOLUTE (col.1-5) IDECAY(col.6-10) ISORB(col.11-15)
#-----|-----|-----|-----|-----|
11  1    0    0
#####
#   Print Information
#####
14  5    0          NPRINT (col.1-5) IOPT (col.6-10)
15  38.0          (PRTLOC for I = 1, NPRINT)
15  105.0
15  281.0
15  433.0
15  619.0
#####
#   Boundary Conditions
#####
16  3    1          NBOUND (col.1-5) IBOUND (col.6-10)
#####
#           for I = 1,NBOUND
#
#USTIME      USBC (for i=1,NSOLUTE)
#-----|-----|-----|-----|
17  8.25      3.7
17  8.4       11.4
17  11.4      3.7

```

Figura 15. Fichero de parámetro para la aplicación 1.

Fichero de estado estacionario, aplicación 1

```

#####
#
#                               OTIS steady flow file
#
#   1972 Uvas Creek Tracer Injection, Conservative Transport of Chloride
#
#   Parameter Values from:
#
#   Bencala, K.E. and R.A. Walters, 1983, Water Resour.Res.,19(3),718-724
#
#####
1 0.00                               QSTEP [hour]
2 0.0125                             QSTART [L^3/second]
#####
#                               for I = 1, NREACH
#
#QLATIN          QLATOUT          AREA          (CLATIN J=1, NSOLUTE)
#
#####
3 0.00           0.00           0.30           3.7
3 0.00           0.00           0.42           3.7
3 4.545E-6       0.00           0.36           3.7
3 1.974E-6       0.00           0.41           3.7
3 2.151E-6       0.00           0.52           3.7

```

Figura 16. Fichero de estado estacionario para la aplicación 1.

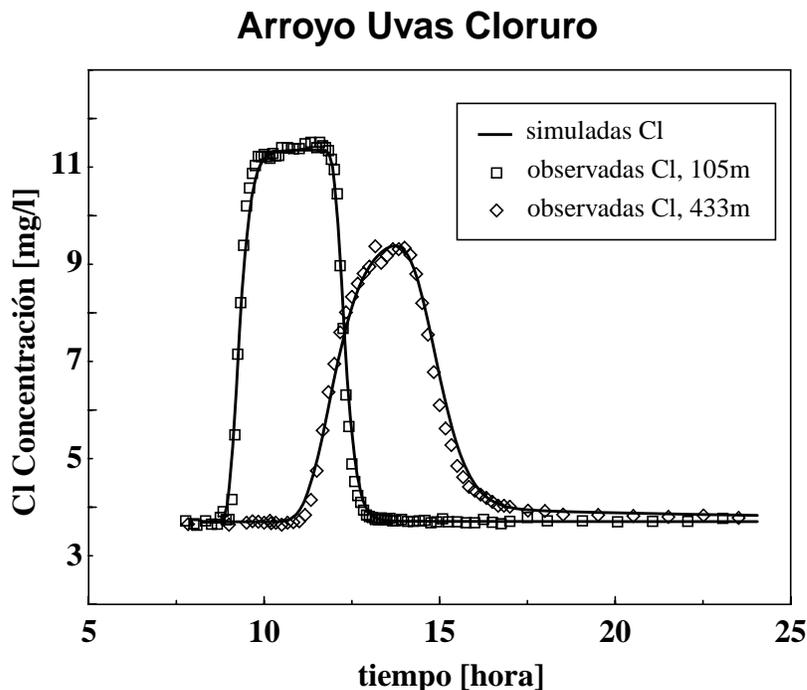


Figura 17. Concentraciones de cloruro simuladas y observadas a 105 y 433 metros.

4.2 Aplicación 2: Transporte con sorción Kd (OTIS)

El propósito de esta aplicación es ilustrar el uso de OTIS con solutos no conservativos. Bengala (1983) describe una inyección de tres horas, de estroncio, que coincide con la inyección de cloruro ya descrita (aplicación 1, sección 4.1). Dado que el estroncio es sorbido por los sedimentos de lecho, no puede ser modelado como un soluto conservativo. Los algoritmos de sorción, dentro de OTIS, se usan para modelar el destino y transporte de estroncio en el arroyo Uvas.

La muestra de ficheros de entrada para la simulación de estroncio en el arroyo Uvas son muy similares a los de la aplicación uno. El fichero de control incluye una línea adicional para especificar el nombre del fichero de sorción de salida (registro 4), y el formato del fichero de flujo es idéntico al de la aplicación uno.

La figura 18 es un listado parcial del fichero de parámetros para la simulación del estroncio. No se muestran los registros tipo 1-10 dado que son idénticos a los de la figura 15. Se usa el registro tipo 11 para especificar el número de solutos y las opciones químicas. La sorción se modela estableciendo ISORB = 1 y usando repetidamente el registro tipo 13 para especificar los parámetros de sorción específicos de cada tramo. El registro tipo 13 viene seguido por los registros tipo 14-17 en una manera similar a lo que se muestra en la figura 15.

Registros tipo 11 y 13 para el fichero de parámetros, aplicación 2

```

#####
#
# Number of Solutes and flags for decay and sorption
#
# NSOLUTE (col.1-5) IDECAY(col.6-10) ISORB(col.11-15)
#
#
#####
11 1 0 1
#####
#
# Sorption Parameters (ISORB=1, only)
#
# for I = 1, NREACH
#
#LAMHAT      LAMHAT2      RHO      KD      CSBACK
#
#####
13 5.6e-5      1.0      4.0e+4      70.0e-6      0.13
13 5.6e-5      1.0      2.0e+4      70.0e-6      0.13
13 5.6e-5      1.0      2.0e+4      70.0e-6      0.13
13 5.6e-5      1.0      2.0e+4      70.0e-6      0.13
13 5.6e-5      1.0      4.0e+4      70.0e-6      0.13

```

Figura 18. Listado parcial del fichero de parámetros para la aplicación 2.

Los resultados de la simulación, a partir de los ficheros de salida de soluto y porción se muestran en las figuras 19 y 20. Las concentraciones de estroncio en el canal principal, simuladas y observadas, se representan para el primer y tercer punto de impresión (38 y 281 metros) en la figura 19. Las concentraciones en los sedimentos del lecho (C_{sed}) en los cinco puntos de impresión se trazan en la figura 20.

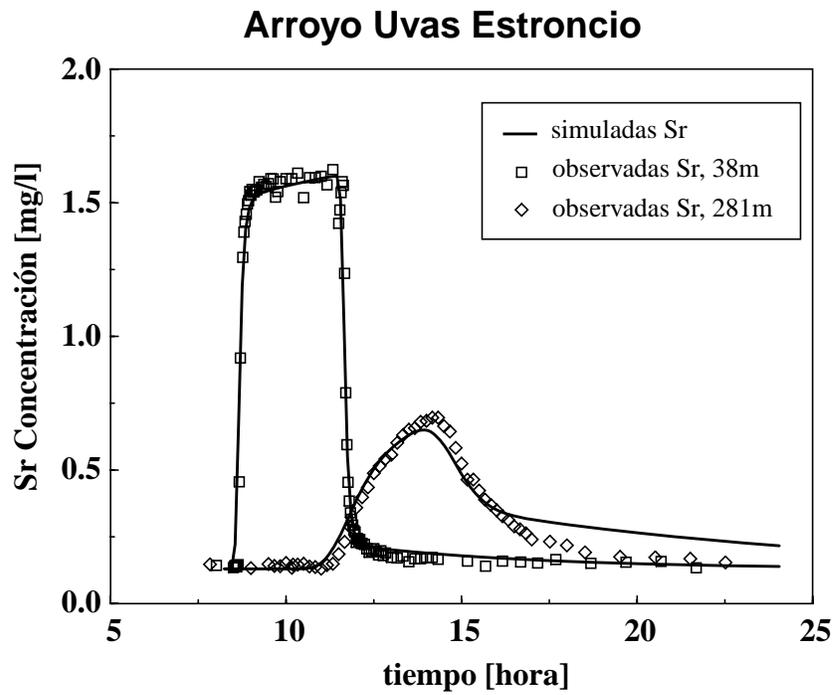


Figura 19. Concentraciones simuladas y observadas de estroncio a 38 y 281 metros.

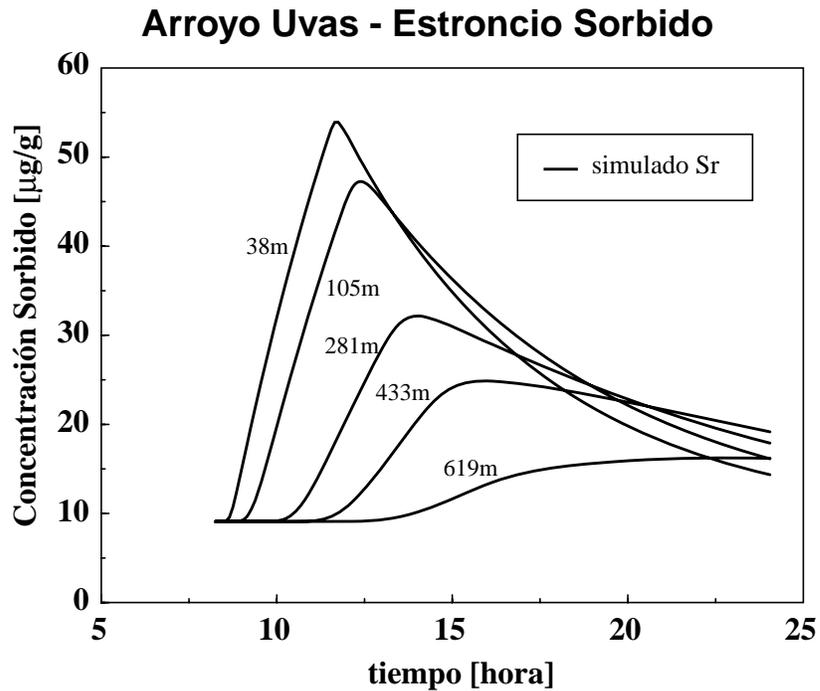


Figura 20. Estroncio sorbido simulado en los 5 puntos de impresión.

4.3 Aplicación 3: Transporte con decaimiento de primer orden (OTIS)

Esta aplicación ilustra el uso de OTIS para un soluto que experimenta un decaimiento de primer orden. Runkel (1996) presenta un problema hipotético en el cual una sustancia que se degrada entra en una corriente de agua durante un periodo de dos horas. La concentración de soluto en la frontera aguas arriba es de 100 unidades de concentración y se asume un flujo estacionario y uniforme. Los únicos mecanismos de transporte físico son advección y dispersión (no se considera almacenamiento transitorio, ALPHA = 0.0).

Los ficheros de control y flujo para esta aplicación son similares a los presentados previamente y no se presentan aquí. La figura 21 es un listado parcial del fichero de parámetros para el problema hipotético. El registro 11 se usa para especificar el número de solutos y para indicar que se considera un decaimiento de primer orden (IDECAY =1). Las velocidades de decaimiento para el primero y único tramo se especifican usando el registro tipo 12. (Notar que para aplicaciones con múltiples tramos, el registro tipo 12 se repite NREAC veces.)

Registros tipo 11 y 12 para el fichero de parámetros Aplicación 3

```
#####
#
# Number of Solutes and flags for decay and sorption
#
# NSOLUTE (col.1-5) IDECAY(col.6-10) ISORB(col.11-15)
#
#
#
#####
11 1      1      0
#####
#
# Decay Coefficients (IDECAY=1, only)
#
#LAMBDA      LAMBDA2
#
#
#####
12 1.E-4      0.0
```

Figura 21. Listado parcial del fichero de parámetros para la aplicación 3.

Las simulaciones resultantes se comparan con una solución analítica (Runkel 1996) en la figura 22. La apretada correspondencia entre los resultados de OTIS y la solución analítica indica que a solución numérica (Sección 2.4) es adecuada para el presente problema. El efecto del decaimiento de primer orden puede verse a 2,000 metros, donde el pico de concentración (10) es mucho menor que la concentración en la frontera de agua arriba (100).

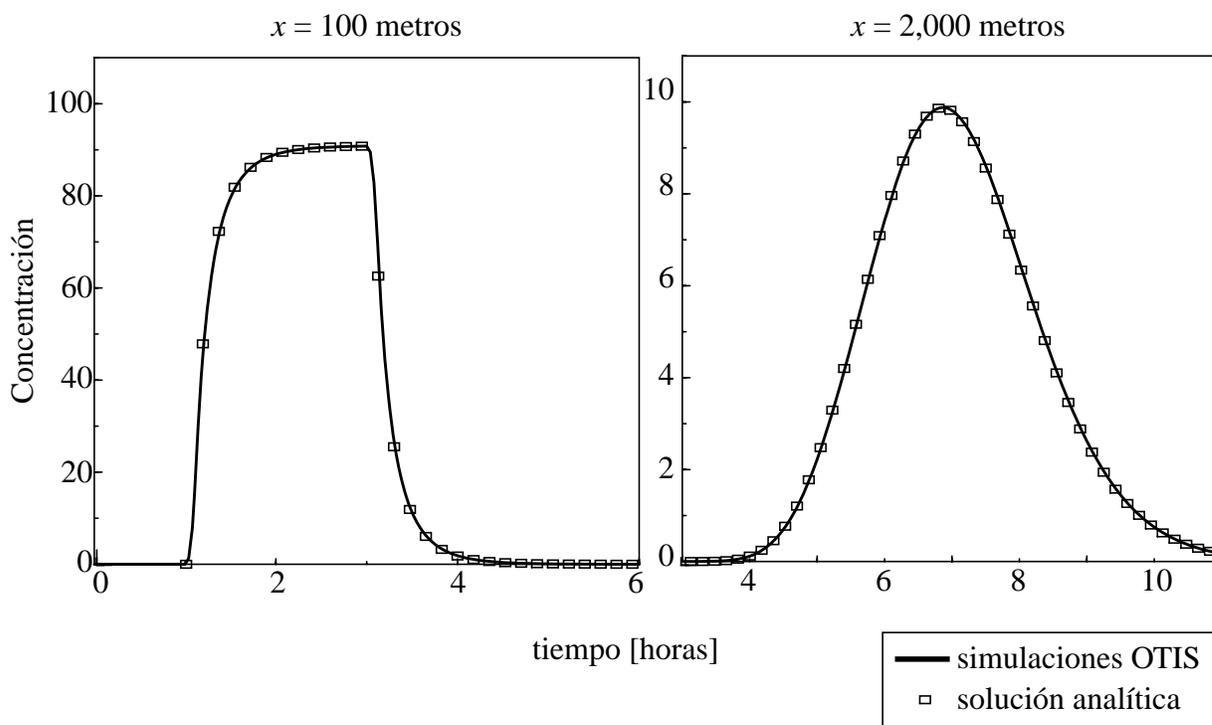


Figura 22. Las OTIS resultantes comparan con una solución analítica.

4.4 Aplicación 4: Transporte conservativo con flujo inestable (OTIS)

Esta aplicación ilustra el uso de OTIS para simular el transporte de solutos bajo un régimen de flujo inestable. McKnight y Andrews (1993) describen un experimento de transporte de solutos realizado en Huey Creek, una corriente de agua de fusión glaciario en McMurdo Dry Valleys (Valles secos, cerca de la base polar McMurdo) de la Antártida. En enero de 1992, un trazador de litio se inyectó en Huey Creek, durante un periodo de 3.75 horas. Se recogieron muestras en varios puntos, aguas abajo, y el caudal se midió en continuo. Durante el experimento, el caudal varió desde menos de 1 pie cúbico por segundo hasta aproximadamente 4 pies cúbicos por segundo.

Un análisis del experimento de Huey Creek requiere una consideración sobre la amplia variación de flujo arriba descrita. La variabilidad del caudal se considera preparando un fichero de flujo inestable, como se escribe en la sección 3.5.5. Se creó un fichero de flujo inestable mediante el reformateo de un módulo de ruta de una onda cinemática dentro del Sistema de modelización modular MMS (Modular Modeling System (MMS, Leavesley y otros, 1996). Los datos de entrada usados por el modelo de ruta incluyeron un hidrograma del flujo de entrada, estimaciones de la rugosidad del canal, pendiente y anchura del canal (Runkel y otros, 1995).

Un listado parcial del fichero de flujo inestable para Huey Creek se muestra en la figura 23. El registro tipo 1 especifica QSTEP, el intervalo de tiempo en el que las variables de flujo cambian. En este ejemplo, QSTEP es equivalente al intervalo de salida del módulo de ruta. Seis puntos de flujo se definen usando los registros 2 y 3. Los puntos de flujo se entran en orden ascendente (aguas abajo), con el primer punto en el extremo aguas arriba de la red de corriente. Después de definir los puntos de flujo, se usan los registros tipo 4-7 para establecer la velocidad del flujo lateral, la velocidad del flujo volumétrico, el área de sección transversal del canal principal y la concentración del flujo lateral para cada punto de flujo. Los registros tipo 4-7 se repiten para cada QSTEP horas de tiempo de simulación.

Fichero de flujo inestable para la Aplicación 4

```

Registro tipo #####
#
#           OTIS unsteady flow file
#
#   1/7/1992 Huey Creek, Antartica
#   Conservative Transport of Lithium
#
# #####
1 1.66666667e-2      QSTEP [hour]
#####
#   Flow Locations
#####
2 6                 NFLOW
3   0.00            (FLOWLOC for I = 1, NFLOW)
3   9.00
3  213.00
3  457.00
3  610.00
3  762.00
#####
#   Flow Data from DR3M/MMS
#####
#
# starting time, 11.30
#
4   0.00            0.00            0.00            0.00            0.00            0.00
5   0.061573        0.061472        0.059380        0.056964        0.055279        0.053600
6   0.109640        0.109532        0.098029        0.089586        0.095372        0.092534
7   0.00            0.00            0.00            0.00            0.00            0.00
#
# time = 11.3 + QSTEP
#
4   0.00            0.00            0.00            0.00            0.00            0.00
5   0.062194        0.062093        0.060010        0.057605        0.055927        0.054242
6   0.110300        0.110193        0.098650        0.090189        0.096041        0.093197
7   0.00            0.00            0.00            0.00            0.00            0.00
#
# time = 11.3 + 2 QSTEP
#
4   0.00            0.00            0.00            0.00            0.00            0.00
5   0.062814        0.062714        0.060639        0.058246        0.056576        0.054891
6   0.110958        0.110852        0.099269        0.090788        0.096707        0.093863
7   0.00            0.00            0.00            0.00            0.00            0.00
#
# time = 11.3 + 3 QSTEP
#
4   0.00            0.00            0.00            0.00            0.00            0.00
5   0.063435        0.063335        0.061269        0.058887        0.057225        0.055545
6   0.111613        0.111508        0.099885        0.091385        0.097370        0.094531
7   0.00            0.00            0.00            0.00            0.00            0.00
#
# continued.....
#

```

(Registro tipos 4-7 se repiten para cada cambio de flujo.)

Figura 23. Fichero de flujo inestable para la Aplicación 4

Aunque no se muestra el fichero de parámetros para la simulación de litio en Huey Creek, es necesario hacer dos comentarios. Primero, el escalón de tiempo de integración se selecciona de tal manera que divide a partes iguales al escalón de tiempo del enrutado ($QSTEP/TSTEP$ es un valor entero). Segundo, la especificación de la condición de frontera aguas arriba se simplifica ampliamente imponiendo una condición de frontera de flujo ($IBOUND=2$, Sección 3.5.4). Mientras que la concentración de frontera aguas arriba cambia con el flujo, el flujo inyectado es constante. La especificación de un flujo constante permite una condición de frontera de un solo paso mientras que los tres valores especificados corresponden a los periodos de preinyección, inyección y postinyección.

La simulación resultante del experimento de Huey Creek se dibuja en la figura 24. Como muestra la figura, las concentraciones de litio varían durante el periodo de inyección (12 a 15 horas) debido a cambios en el caudal de la corriente. Un fracaso en reconocer esta variabilidad de caudales pudiera producir un perfil de simulación plano durante el periodo de inyección.

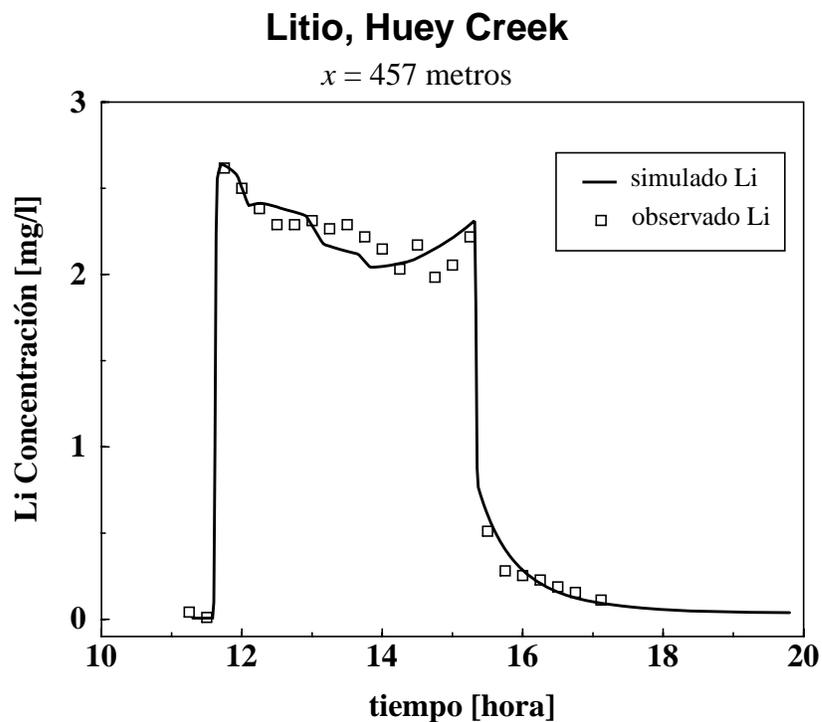


Figura 24. Concentraciones simuladas y observadas de litio, a 457 metros.

4.5 Aplicación 5: Condición de frontera continua y estimación de parámetros (OTIS-P)

El propósito inicial de esta aplicación es mostrar como puede ser usado OTIS-P para estimar parámetros del modelo usando mínimos cuadrados no lineales. Un propósito secundario es presentar un ejemplo de la opción de condición de frontera continua.

Laenen y Risley (1997) describen varios estudios donde se usó colorante rhodamina para caracterizar ríos y corrientes de agua en Oregón. En julio de 1992 se añadió un vertido instantáneo (slug) de rhodamina al río Clackamas. Se tomaron muestras de agua en tres puntos aguas abajo: millas del río 11.0, 9.5 y 8.0. Estos datos se usaron para estimar el tiempo de viaje y las características de mezcla para los dos tramos que acaban en las millas del río 9.5 y 8.0.

Fichero de control para la Aplicación 5

```

#####
#
#           OTIS-P control file
#
#
#   line           name of the:
#   ----           -
#   1             parameter file
#   2             flow file
#   3             data file
#   4             STARPAC input file
#   5             parameter output file
#   6             STARPAC output file
#   7             solute output file
#   8             sorption output file (ISORB=1 only)
#
#####
1  params.inp
2  q.inp
3  data.inp
4  star.inp
5  params.out
6  star.out
7  solute.out

```

Figura 25. Fichero de control para la Aplicación 5.

La figura 25 presenta el fichero de control OTIS-P para el río Clackamas. Al igual que el fichero de control de OTIS, el fichero de control de OTIS-P especifica los nombres de los diversos ficheros de entrada y salida como se describe en la sección 3.5.3.

Los ficheros de parámetros y flujo estacionario para el río Clackamas son muy similares a los presentados en otras aplicaciones (Secciones 4.1-4.4) y no se muestran aquí. Debe notarse, sin embargo, que esta aplicación hace uso de la opción de condición de frontera continua (IBOUND=3, Sección 3.5.4). Dado que la rhodamina se introduce como un vertido instantáneo (slug) (en forma opuesta a una inyección continua), los datos del primer punto de muestreo (milla del río 11.0) se usa para definir la condición de frontera de aguas arriba. Esto se cumple estableciendo NBOUND igual al número de puntos de datos observados, estableciendo IBOUND igual a 3, y usando los datos observados tiempo-concentración para especificar USTIME y USBC (registros tipo 16 y 17 del fichero de parámetros). Los datos observados usados como condiciones de frontera se representan frente a los resultados de la simulación al final de esta aplicación (fig. 28).

Dos fichero adicionales de entrada se requieren para OTIS-P. La figura 26 es un listado parcial para el fichero de datos para la simulación del río Clackamas. El fichero de datos contiene los datos tiempo-concentración para estimar los parámetros del modelo. En este ejemplo, hay dos tramos que terminan en los puntos de muestro segundo y tercero (millas del río 9.5 y 8.0). El registro tipo 1 se usa para especificar N, el número de puntos de datos observados para el primer tramo. El registro tipo 2 se usa entonces N veces para especificar los datos tiempo-concentración para la milla de río 9.5. Se repiten, entonces, los registros tipos 1 y 2 para el segundo tramo, usando datos de la milla del río 8.0).

Un fichero final de entrada, el fichero de entrada STARPAC se dibuja en la figura 27. Los registros tipo 1-7 se usan para especificar varias opciones STARPAC como se describe en la sección 3.5.7. El registro tipo 8 se usa entonces para indicar que parámetros del modelo tienen que ser estimados usando los datos de concentración observadas a partir del fichero de datos. Los parámetros estimados (IFIXED=0) en este ejemplo incluyen el coeficiente de dispersión (D), las áreas de las secciones transversales del canal principal y de la zona de almacenamiento (A , A_S) y el coeficiente de intercambio de la zona de almacenamiento (α). Los restantes parámetros del modelo se fijan (IFIXED=1) en sus valores de entrada especificados.

Fichero de datos para la Aplicación 5

```

#####
#
#           OTIS-P data file
#
#   line      for J = 1, NREACH
#   ----
#   1         N - Number of observations for reach J.
#   2-N+1     TIME (time-variable) or DIST (steady-state) associated
#             with each observation (col. 1-15).
#
#           Clackamas River Rhodamine - July 1992
#           Data from Laenen and Risley (1997)
#
#####
#   Site 1, 2414 m (River Mile 9.5)
#
1 27
2 11.00      0.00
2 11.25      0.23
2 11.33      1.10
2 11.42      4.41
2 11.50      8.19
2 11.58     11.00
2 11.67     12.35
2 11.70     12.88
2 11.75     12.49
2 11.83     12.06
2 11.92     11.38
2 12.00      9.56
2 12.08      8.38
2 12.17      7.45
2 12.25      6.59
2 12.33      5.70
2 12.42      5.11
2 12.50      4.32
2 12.58      3.72
2 12.67      3.23
2 12.75      2.88
2 12.83      2.50
2 12.92      2.15
2 13.00      1.86
2 13.25      1.20
2 13.50      0.89
2 14.50      0.00
#
#   Site 2, 4828 m (River Mile 8.0)
#
1 18
2 12.75      0.00
2 13.03      0.37
2 13.47      4.07
Continued.....

```

Figura 26. Listado parcial del fichero de datos para la Aplicación 5.

Fichero de entrada STARPAC para la Aplicación 5

```

#####
#
#
#           STARPAC Parameter Input File
#
#                                     Rob Runkel 3/11/95
#
#####
#
# Record Types 1-4, Integer values in Columns 1-5
# -----
# IWEIGHT  Weight Revision Option
# IVAPRX   Variance/Covariance Option
# MIT      Maximum Number of Iterations
# NPRT     STARPAC Print Option
#
#
1  0
2  1
3  100
4  22222
#
# Record Types 5-7, Double precision values in Columns 1-13
# -----
# DELTA    Maximum Scaled Change, First Iteration
# STOPP    Stopping Value for Parameter Convergence
# STOPSS   Stopping Value for Sum of Square Convergence
#
5  1.0
6  1.D-5
7  1.D-5
#
# For each of the ten model parameters, enter IFIXED (Integer, Col. 1-5)
# and SCALE (Floating Point, Col 6-18).
#
#IFXD SCALE
# |           | IFIXED and SCALE for:
#-----|-----|-----
8  0  0.0D0   | Dispersion Coefficient, DISP
8  0  0.0D0   | Main Channel Cross-Sectional Area, AREA
8  0  0.0D0   | Storage Zone Cross-Sectional Area, AREA2
8  0  0.0D0   | Storage Zone Exchange Coefficient, ALPHA
8  1  0.0D0   | Main Channel First-Order Decay Coefficient, LAMBDA
8  1  0.0D0   | Storage Zone First-Order Decay Coefficient, LAMBDA2
8  1  0.0D0   | Mass of Accessible Sediment/Volume Water, RHO
8  1  0.0D0   | Distribution Coefficient, KD
8  1  0.0D0   | Main Channel Sorption Rate Coefficient, LAMHAT
8  1  0.0D0   | Storage Zone Sorption Rate Coefficient, LAMHAT2

```

Figura 27. Fichero de entrada STARPAC para la Aplicación 5.

Como se describe en la sección 3.6.2, OTIS-P debe ser ejecutado varias veces para determinar el óptimo conjunto de los valores de parámetros para cada tramo. En este ejemplo, se hacen tres pasadas de OTIS-P para obtener el conjunto final de parámetros. Este proceso se resume en la tabla 23, donde se muestran los valores de parámetros para el tramo 2 (contenidos similares son relevantes para el tramo 1). Para la primera pasada del programa, las estimaciones iniciales de los parámetros D , A , A_S , y α se especifican por el usuario del modelo. Estos estimados iniciales se toman directamente de los ficheros de parámetros (D , A_S , α) y flujo (A). Al final de la primera pasada, las estimaciones de parámetros se toman del fichero de salida de STARPAC y se usan como estimados iniciales de parámetros para la segunda pasada de programa. Este proceso se repite para la tercera y última pasada. Como muestra la tabla 23,

las estimaciones de parámetros y los residuos de las sumas de cuadrados (RSS) de las segunda y tercera pasadas son casi idénticas. Esta observación y el hecho que RSS y/o la convergencia de parámetros (no una convergencia falsa o singular) se obtiene para ambos tramos indicando que no se requiere una cuarta pasada. La estimación de parámetros finales para el tramo 2 y los cocientes asociados se presentan en la última fila de la tabla. El bajo cociente para D indica que la estimación del parámetro es altamente incierta.⁴

Tabla 23. Estimación de parámetros para el tramo 2

Parámetros estimados desde....	D [m ² /seg]		A [m ²]		A_S [m ²]		α [/seg]		RSS
	Valor	Cociente	Valor	Cociente	Valor	Cociente	Valor	Cociente	
Estimación inicial	0.20		50.0		25.0		5.00×10^{-5}		
Pasada 1	1.74	SC	50.2	SC	13.1	SC	9.59×10^{-5}	SC	1.658
Pasada 2	0.40	0.44	48.2	110.0	14.4	20.0	1.67×10^{-4}	11.6	0.3415
Pasada 3	0.41	0.44	48.1	111.0	14.4	20.0	1.67×10^{-4}	11.6	0.3412

SC - Convergencia Singular, Cociente no disponible

El proceso de estimación de parámetros descrito arriba, produce un conjunto de parámetros para los tramos 1 y 2 que proporcionan una fuerte correspondencia entre las concentraciones observadas y simuladas de rodamina. Esta correspondencia se muestra en la figura 28, donde se muestran los resultados de simulación en la milla del río 9.5 (2414 metros) y milla del río 8.0 (4828 metros).

4.6 Aplicación 6: Simulación de estado estacionario y estimación de parámetros (OTIS-P)

Como se anota en la sección 3.2.1, el modelo OTIS de transporte de solutos puede ser usado para determinar las concentraciones de soluto en estado estacionario que resultan de un escenario de carga constante. En esta aplicación, OTIS-P se usa en forma de estado estacionario para modelar el perfil de concentración espacial de hierro disuelto en una pequeña corriente. Esta corriente es St. Kevin Gulch, una corriente de primer orden en las Rocky Mountains de Colorado, que está afectado por un drenaje ácido de una mina.

Kimball y otros (1991) describen un estudio sinóptico realizado en agosto de 1986. Durante el estudio, se tomaron muestras de agua en numerosos puntos a lo largo de la corriente y se analizaron para determinar la concentración de metal disuelto. Se tomaron muestras adicionales de una serie de manantiales que aflúan al cauce a lo largo del tramo estudiado. La figura 29 muestra el perfil observado de la concentración de hierro disuelto. Son de interés dos aspectos del perfil espacial. Primero, un gran incremento de hierro ocurre a, aproximadamente 400 metros; un segundo aspecto es el abrupto descenso en la concentración de hierro disuelto hacia 525 metros. El propósito de esta aplicación es cuantificar los procesos responsables de los cambios en la concentración de hierro disuelto.

⁴El cociente es igual a la estimación del parámetro dividido por su desviación típica (standard).

Río Clackamas

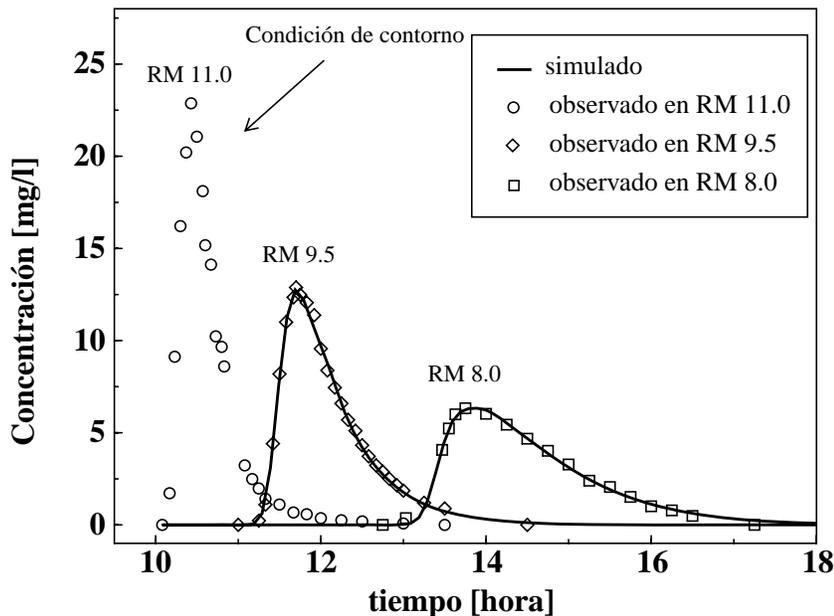


Figura 28. Condición de frontera, aguas arriba, (milla del río 11.0) y concentraciones simuladas y observadas en las millas del río 9.5 y 8.0.

El primer paso en el análisis es definir la hidrología del sistema. Broshears y otros (1993) describen la adición de un trazador conservativo que coincidió con el estudio sinóptico. Los datos de la adición del trazador se usan para determinar las velocidades de flujo y los parámetros físicos (D , A , A_S , α). Esta información se combina entonces con las concentraciones observadas de flujo lateral para desarrollar un perfil espacial bajo la hipótesis que el hierro disuelto es conservativo (no reactivos). Los resultados de la simulación en OTIS de este conservativo en estado estacionario se muestran en la figura 29. La cerrada correspondencia entre las concentraciones de hierro, observadas y simuladas, en la parte superior de St. Kevin Gulch (0-500 metros) indica que el incremento inicial en hierro se debe a factores intrínsecamente hidrológicos. Esto es la carga del hierro de los manantiales ricos en hierro que proceden de la escombrera de una cercana mina. Las concentraciones simuladas de hierro descienden aguas abajo, después de los 500 metros, debido a la adición de un afluente relativamente diluido, pero esto no concuerda con el descenso en los datos observados. Esta discrepancia indica que reacciones químicas y/o biológicas afectan a la concentración de hierro disuelto mas allá de los 500 metros.

Una aproximación simple para cuantificar las reacciones químicas/biológicas es determinar la velocidad de decaimiento de primer orden a la cual el hierro se pierde del sistema. Esto se cumple fijando los parámetros físicos y estimando una velocidad de decaimiento de primer orden usando OTIS-P. Los ficheros de entrada y los procedimientos de estimación de parámetros son, generalmente, los mismos que los presentados en la Aplicación 5. Los datos observados de los manantiales se usan para establecer las concentraciones de flujo lateral en el fichero de flujo. Dentro del fichero de parámetros, el escalón de tiempo se establece en 0.0 para invocar la opción de estado estacionario, y se especifican estimaciones iniciales para la velocidad de decaimiento de primer orden. Los ficheros de datos se describen en la figura 30, donde se especifican, para cada tramo, los datos observados de distancia-concentración. Como en la aplicación 5 hacen falta tres pasadas de OTIS-P para obtener los estimados finales de parámetros. En el canal principal, constantes de decaimiento de primer orden, en un rango entre 8.0×10^{-6} y 5.8×10^{-4} por segundo, conducen al perfil simulado que se muestra en la figura 29.

Hierro, estado estacionario, St. Kevin Gulch

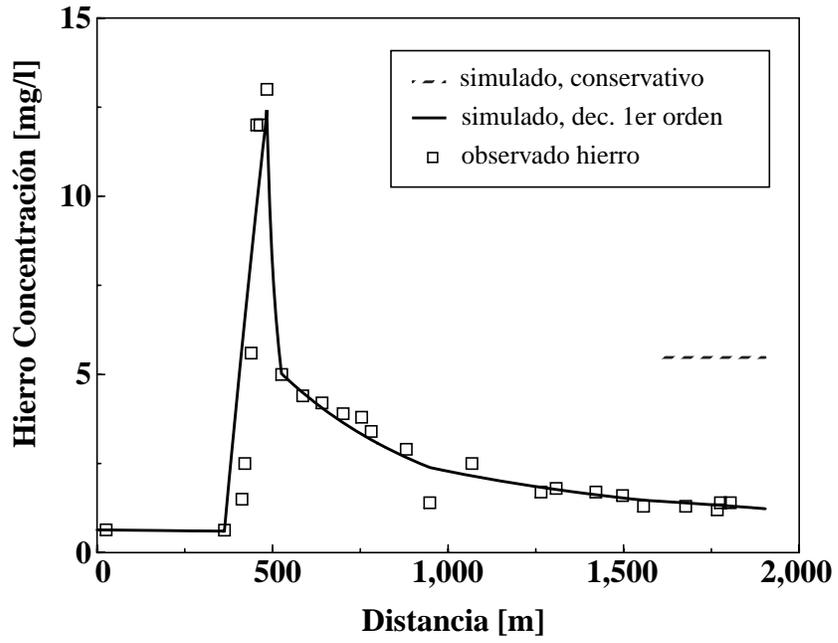


Figura 29. Perfil espacial de la concentración de hierro disuelto en St. Kevin Gulch.

Fichero de datos para la Aplicación 6

```

#####
#
#           OTIS-P data file
#
#   line      for J = 1, NREACH
#   ----
#       1      N - Number of observations for reach J.
#       2-N+1  TIME (time-variable) or DIST (steady-state) associated
#              with each observation (col. 1-15) and CONC (col. 16-30)
#
#   1986 St. Kevin Steady-State Iron.  Data from Kimball et al.(1991)
#
#####
#
#   Reach 1 0-26m
#
1 0
#
#   Reach 2 26-363m
#
1 2
2 26.0          0.64
2 363.0         0.63
#
#   Reach 3 363-484m
#
1 7
2 363.0         0.63
2 413.0         1.5
2 421.0         2.5
2 439.0         5.6
2 455.0         12.0
2 464.0         12.0
2 484.0         13.0
#
#   Reach 4 484-526m
#
1 2
2 484.0         13.0
2 526.0         5.0
#
#   continued.....(data for Reaches 5-7)
#

```

Figura 30. Listado parcial del fichero de datos para la Aplicación 6.

5.0 GUÍA DE SOFTWARE

Esta sección proporciona información sobre como obtener e instalar el modelo de transporte de solutos OTIS (sección 5.1-5.4). Aspectos adicionales del software se describen en la sección 5.5.

5.1 Plataformas soportadas

Ficheros ejecutables en binario son accesibles tanto para computadoras personales (Personal Computer) y estaciones de trabajo (Workstation) que funcionan como sistemas operativos Windows⁵ y Unix. Un resumen de los sistemas operativos soportados y las plataformas de hardware se presentan en la tabla 24. Los usuarios con otros sistemas de ordenador necesitarán compilar los códigos fuente, como se describe en la Sección 5.4.

Tabla 24. Sistemas soportados

Hardware	Sistema Operativo	ARC
Personal computer (Intel x86)	Windows 3.x / DOS	31
Personal computer (Intel x86)	Windows 95 / NT	95
Personal computer (Intel x86)	Linux	LIN
Unix workstation (DEC)	Digital Unix 3.x	DEC
Unix workstation (DG)	DG-UX 5.x	DG
Unix workstation (IBM)	IBM AIX 3.x	AIX
Unix workstation (SUN)	Solaris 2.x	SOL
Unix workstation (SUN)	SunOS 4.x	SUN

La columna 3 de la tabla 24 contiene ARC, la notación usada a través del resto de esta sección para denominar genéricamente a la arquitectura del sistema. Los usuarios de computadoras personales que usen Windows 95, por ejemplo, deben reemplazar las letras “ARC” por “95” cuando sigan las instrucciones específicas que se dan en las secciones 5.2-5.4.

5.2 Distribución del Software

El modelo de transporte de solutos OTIS puede ser obtenida de la World Wide Web (www) o por Protocolo de Transferencia de ficheros (ftp). Ambos métodos permiten a los usuarios potenciales del

⁵Windows' se usa aquí refiriéndose a Microsoft Windows 3.1, Windows 95, y Windows NT.

modelo el descargar códigos fuente, ejecutables específicos para el hardware y ejemplos de ficheros de entrada. La mayoría de los usuarios querrán descargar un ejecutable en binario y el conjunto de ficheros de entrada. Estos ficheros están almacenados en los lugares www y ftp como ficheros comprimidos tar (Unix) y ficheros autoextraíbles zip (Windows). Un resumen de los ficheros descargables se presenta en la tabla 25.

Tabla 25. Ficheros a descargar para sistemas Unix y Windows

Contenido del fichero	UNIX (tar comprimido)	Windows (zip autoextraíble)
OTIS/OTIS-P Ejecutables	otis.ARC.tar.Z	otisARC.exe
OTIS/OTIS-P Código fuente	otis.source.tar.Z	otissrc.exe
Muestra de ficheros de entrada	otis.examples.tar.Z	otisexam.exe
Instalación Fichero batch	no aplicable	instalARC.bat

World Wide Web (www)

La página principal de OTIS (<http://webserver.cr.usgs.gov/otis>) incluye una página de distribución de software que permite a los usuarios de Internet el descargar los ficheros listados en la tabla 25. Los usuarios del modelo pueden obtenerlo a través de la World Wide Web accediendo a la página principal y siguiendo las instrucciones que se proporcionan.

Fichero de Transferencia de Protocolos (ftp)

A los ficheros que se muestran en la tabla 25 también se pueden acceder usando un protocolo estándar de transferencia de protocolos. El procedimiento ftp es como sigue:

- (1) Log en el depósito ftp como anonymous:

<code>ftp ftpdcolka.cr.usgs.gov</code>	(ftp al depósito)
<code>anonymous</code>	(teclear anonymous a la petición de login)
<code>cualquierpassword</code>	(entrar cualquier password)
- (2) Preparar la descarga de los ficheros:

<code>cd pub/otis</code>	(ir a directorio apropiado)
<code>type binary</code>	(pedir transferencia fichero binario)
- (3) Descargar la muestra de ficheros de entrada:

<code>get otis.examples.tar.Z</code>	(sólo UNIX)
<code>get otisexam.exe</code>	(sólo Windows)
- (4) Descargar un fichero ejecutable, si es necesario:

<code>get otis.ARC.tar.Z</code>	(sólo UNIX)
<code>get otisARC.exe</code>	(sólo Windows)
- (5) Descargar el código fuente, si es necesario:

<code>get otis.source.tar.Z</code>	(sólo UNIX)
<code>get otissrc.exe</code>	(sólo Windows)
- (6) Descargar el fichero de instalación batch, si es necesario:

<code>get instalARC.bat</code>	(sólo Windows)
--------------------------------	----------------

5.3 Instalación

Los ficheros descritos en la Sección 5.2 pueden ser usados para instalar el modelo OTIS de transporte de solutos como se describe aquí. El proceso de instalación está diseñado para crear la estructura de directorios que se muestra en la figura 31. Para empezar el proceso de instalación, mover los ficheros descargados (Sección 5.2) en el *directorio-base*. El *directorio-base* es un directorio seleccionado por el usuario bajo el cual se colocará el árbol de directorios OTIS (fig 31). Después de mover los ficheros, siga las instrucciones para los sistemas Unix y Windows que siguen.

OTIS/OTIS-P Estructura de directorios

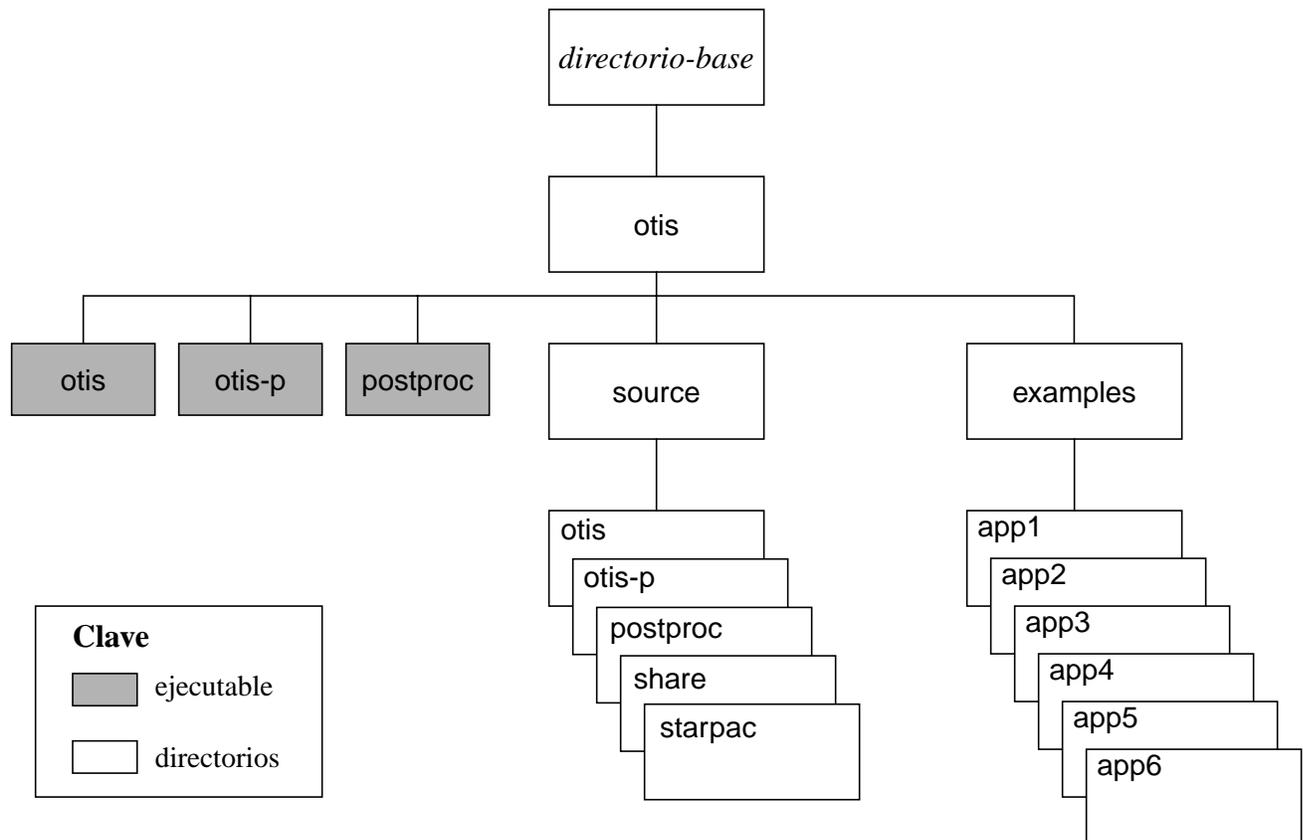


Figura 31. Estructura de directorios de OTIS/OTIS-P.

Instrucciones de instalación para Unix

La instalación sobre sistema Unix consiste en descomprimir el fichero tar y extraer la estructura de directorios. Esto se realiza siguiendo las siguientes órdenes:

(1) Descomprimir los ficheros:

uncompress otis.examples.tar.Z

uncompress otis.source.tar.Z

uncompress otis.ARC.tar.Z

(si es oportuno)

(si es oportuno)

(2) Extraer la estructura de directorios:

tar -xovf otis.examples.tar

tar -xovf otis.source.tar

(si es oportuno)

tar -xovf otis.ARC.tar

(si es oportuno)

Instrucciones de instalación para Windows

La instalación sobre sistema Window se realiza dando el siguiente la siguiente orden en el aviso MS-DOS:

instalARC

Actualización del path del usuario (opcional)

Después de completar el proceso de instalación, los ejecutables otis, otis-p, y postproc residirán en *directorio-base/otis/*. En esta situación todas las pasadas del modelo se iniciarán desde el *directorio-base/otis/*. Para iniciar pasadas del modelo desde cualquier directorio, hay que añadir *directorio-base/otis/* al path del usuario.

5.4 Compilación

Como se discute en la Sección 5.1, los ficheros binarios ejecutables para el modelo OTIS de transporte de solutos están disponibles para varias plataformas de hardware y sistemas operativos. Por ello, puede que no haga falta compilar el código fuente. La compilación se requiere en las siguientes situaciones:

- Cuando los ejecutables en binario no estén disponibles para su hardware específico o sistema operativo.
- Las dimensiones del sistema modelado exceden las dimensiones máximas especificadas en los ficheros incluidos (Sección 5.5.2).
- Cuando se hayan hecho modificaciones en el código esencial de la computadora.

No se trata aquí sobre el procedimiento de compilación para el sistema Windows porque depende del tipo de compilador utilizado. Bajo Unix, el modelo se compila usando la utilidad `make` como se describe a continuación.

Instrucciones de compilación Unix

(1) Editar los makefiles (opcional). Los makefiles usados para compilar OTIS y OTIS-P están configurados para invocar al compilador `f77 Fortran-77` con la opción `-O` (optimización por defecto). Los usuarios que requieran otros compiladores y flags de optimización necesitarán editar adecuadamente los makefiles.

(2) Modificar los ficheros `include` (opcional). Cambios en las dimensiones máximas o en las tareas del mecanismo lógico pueden hacerse editando los ficheros incluidos descritos en la Sección 5.5.2.

(3) Desde el directorio *directorio-base/otis/*, entrar:

`make`

Una vez completada la compilación, los ejecutables otis, otis-p, y postproc residirán en *directorio-base/otis/*.

5.5 Visión general del Software

5.5.1 Desarrollo del Modelo

El modelo OTIS de transporte de solutos está escrito en ANSI standard Fortran-77. El modelo ha sido compilado y probado sobre diversas plataformas de hardware y sistemas operativos (Sección 5.1). La tabla 26 presenta los ambientes de desarrollo específico usados para compilar el código fuente.

Tabla 26. Ambientes de desarrollo específico

Procesador	Sistema operativo	Compilador	Opciones compilador	ARC
Pentium 75	Windows 3.1	Microsoft Fortran PowerStation, Version 1.0a	Optimización para tiempo, Mejora consistencia punto flotante	31
Pentium 133	Windows 95	Microsoft Fortran PowerStation, Version 4.0	Optimización total, inlining automático, Mejora consistencia punto flotante	95
Pentium II	Red Hat Linux 2.0.3	GNU Fortran 0.5.18	-O	LIN
DEC Alpha	Digital Unix V3.2C	Digital Fortran 77	-O4	DEC
DG AViiON	DG/UX 5.4R3.10	Green Hills Ftn-88000 1.8.6.1	-OLM	DG
IBM RS/6000	AIX 3.2	XL Fortran Compiler 6000	-O3	AIX
SUN SPARC 10	Solaris 2.4	SPARCompiler Fortran 3.0	-fast -O3	SOL
SUN4	SunOS 4.3.1	SPARCompiler Fortran 2.0.1	-fast -O3	SUN

5.5.2 Ficheros Include

El código fuente usado para desarrollar OTIS y OTIS-P consiste en muchas pequeñas subrutinas. Para facilitar la modificación del programa se usan tres ficheros include. El uso de los ficheros include permite que la información del programa sea compartida entre subrutinas. Esta información puede ser modificada editando los ficheros include en lugar de cada rutina individual.

Dimensiones máximas - fmodules.inc, fmodules2.inc

Bajo Fortran-77, la dimensión de cada vector y matriz tiene que se fijada antes de la ejecución del programa. Esto requiere algún conocimiento de la dimensión máxima de cada parámetro del modelo. La selección de un tamaño apropiado para cada parámetro es una tarea importante dado que valores excesivamente pequeños limitan la aplicabilidad del programa y valores excesivamente grandes desperdician la memoria del programa.

Para atender este problema, la dimensiones máximas de todo el modelo se definen usando dos ficheros include: fmodules.inc y fmodules2.inc. Los aumentos o disminuciones en las dimensiones máximas se hacen editando los ficheros include y compilando el modelo como se describe en la Sección 5.4.

Los valores por defecto para las dimensiones máximas se dan en las tablas 27 y 28. En general, cada una de los dimensiones corresponde a una variable de entrada proporcionada por el usuario. Esta correspondencia se muestra, a modo de explicación, en la tercera columna de la tabla.

Cuando se hace una pasada del modelo, las variables de entrada pueden no exceder los valores máximos valores. El número de puntos de impresión (ver Sección 3.5.4 – Registro tipo 14), por ejemplo, no puede exceder al valor máximo valor dado por MAXPRINT. Cuando un valor de entrada excede el máximo dado, la ejecución del programa se termina y se emite un mensaje de error. En este momento, el usuario debe incrementar el correspondiente valor máximo (editando fmodules.inc o fmodules2.inc) y recompilando el programa.

Tabla 27. Máximas dimensiones y valores por defecto de fmodules.inc

Dimensión	Máximo por defecto	Máximo número de
MAXREACH	30	Tramos de la corriente (NREACH)
MAXPRINT	30	Lugares de impresión (NPRINT)
MAXBOUND	200	Condiciones de frontera aguas arriba (NBOUND)
MAXSEG	5,000	Segmentos de corriente ($\sum NSEG_j$, j=1 hasta NREACH)
MAXSOLUTE*	3, 1	Solutos modelados (NSOLUTE)
MAXFLOWLOC	30	Lugares de flujo (NFLOW)

* Nota: MAXSOLUTE=3 para OTIS; MAXSOLUTE=1 para OTIS-P.

Tabla 28. Máximas dimensiones y valores por defecto para fmodules2.inc (solo OTIS-P)

Dimensión	Máximo por defecto	Máximo número de
MAXOBS	200	Observaciones para un tramo (N)
MAXPAR	10	Parámetros de modelo

Dispositivos lógico (Logical Devices) - lda.inc

En Fortran-77 se asigna una unidad de número a cada fichero usado para entrada y/o salida. Estas unidades de número, también conocidas como asignaciones de dispositivo número (*ldas*), deben ser asignadas en cada operación de lectura y escritura. Las variables del programa usadas para almacenar las unidades número se comparten entre las subrutinas de entrada y salida usando un bloque común de Fortran. Este bloque común se define en el fichero incluye lda.inc.

5.5.3 Búsqueda de errores

Las subrutinas de entrada del modelo realizan varios test para validar los datos de entrada. Si se detectan errores fatales, un mensaje de error se escribe en `echo.out` y se termina la ejecución del programa. Las capacidades de búsqueda de errores se resumen a continuación.

Errores Fatales, OTIS y OTIS-P

- El número de tramos, NREACH, no debe exceder del máximo, MAXREACH.
- El número de segmentos, IMAX, no debe exceder del máximo, MAXSEG.
- El número de localidades de impresión, NPRINT, no debe exceder del máximo MAXPRINT.
- El número de solutos, NSOLUTE, no debe exceder del máximo, MAXSOLUTE.
- El número de condiciones de contorno aguas arriba, NBOUND, no debe exceder del máximo, MAXBOUND.
- El número de puntos de flujo, NFLOW, no debe exceder del máximo, MAXFLOWLOC.
- El área de la sección transversal de la zona de almacenamiento, AREA2, debe ser mayor que cero.
- Un punto dado de impresión, PRTLOC_{*j*}, debe de estar dentro de la red modelada.
- Los puntos de flujo, FLOWLOC, deben ser entrados en orden ascendente (hacia aguas abajo).
- El primer punto de flujo, FLOWLOC₁, debe ser colocado en la frontera de aguas arriba. El último punto de flujo debe estar en, o por debajo, de la frontera aguas abajo.
- Para una condición de frontera de concentración en continuo (IBOUND = 3), el tiempo de la última condición de frontera (USTIME_{NBOUND}) debe ser mayor o igual que el tiempo final de la simulación, TFINAL.
- La opción de impresión, PRTOPT, debe ser igual a 1 o 2.
- La opción de interpolación, IOPT, debe ser igual a 0 o 1.
- La opción de condición de contorno, IBOUND, debe ser igual a 1, 2, o 3.
- La opción de decaimiento, IDEAY, debe ser igual a 0 o 1.
- La opción de sorción, ISORB, debe ser igual a 0 o 1.

Errores Fatales, OTIS-P

- El número de observaciones para un tramo, N, no puede exceder del máximo, MAXOBS.
- El tiempo de la primera observación debe ser mayor que el tiempo de inicio de la simulación más el escalón de integración de tiempo ($TIME_1 > TSTART + TSTEP$).
- Las observaciones tienen que entrarse en orden de tiempo ascendente ($TIME_{j+1} > TIME_j, j=1,N$).
- El tiempo entre observaciones sucesivas tiene que ser mayor que el escalón de tiempo ($TIME_{j+1} - TIME_j > TSTEP, j=1,N$).
- La distancia especificada, DIST, debe de encontrarse dentro de la red modelada.
- La opción de revisión de peso, IWEIGHT, debe ser igual a 0 o 1.

REFERENCIAS

- Alley, W.M., and Smith, P.E., 1982, Distributed routing rainfall-runoff model, Version II, Computer program documentation, User's manual: U.S. Geological Survey Open-File Report 82-344, 205 p.
- Bencala, K.E., 1983, Simulation of solute transport in a mountain pool-and-riffle stream with a kinetic mass transfer model for sorption: *Water Resources Research*, v. 19, no. 3, p. 732-738.
- Bencala, K.E., and Walters, R.A., 1983, Simulation of solute transport in a mountain pool-and-riffle stream—A transient storage model: *Water Resources Research*, v. 19, no. 3, p. 718-724.
- Broshears, R.E., Bencala, K.E., Kimball, B.A., and McKnight, D.M., 1993, Tracer-dilution experiments and solute-transport simulations for a mountain stream, Saint Kevin Gulch, Colorado: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 92-4081, 18 p.
- Chapra, S.C., and Canale, R.P., 1988, *Numerical methods for engineers* (2d ed.): New York, McGraw-Hill, 812 p.
- Dennis, J.E., Jr., Gay, D.M., and Welsh, R.E., 1981, An adaptive nonlinear least-squares algorithm: *Association for Computing Machinery, Transactions on Mathematical Software*, v. 7, no. 3, p. 348-368.
- Donaldson, J.R., and Tryon, P.V., 1990, User's guide to STARPAC—The standards, time series, and regression package: National Institute of Standards and Technology Internal Report NBSIR 86-3448.
- Draper, N.R., and Smith, H., 1981, *Applied regression analysis* (2d ed.): New York, John Wiley and Sons, 709 p.
- Fischer, H.B., List, E.J., Koh, R.C.Y., Imberger, J., and Brooks, N.H., 1979, *Mixing in inland and coastal waters*: San Diego, Academic Press, 483 p.
- Harrison, D., 1989, Xgraph Version 11.3.2: University of California, Berkeley.
- Harvey, J.W., Wagner, B.J., and Bencala, K.E., 1996, Evaluating the reliability of the stream tracer approach to characterize stream-subsurface exchange: *Water Resources Research*, v. 32, no. 8, p. 2441-2451.
- Henderson, F.M., 1966, *Open channel flow*: New York, Macmillan, 522 p.
- Jackman, A.P., Walters, R.A., and Kennedy, V.C., 1984, Transport and concentration controls for chloride, strontium, potassium and lead in Uvas Creek, a small cobble-bed stream in Santa Clara County, California, U.S.A., 2. Mathematical modeling: *Journal of Hydrology*, v. 75, p. 111-141.
- Jobson, H.E., 1989, Users manual for an open-channel streamflow model based on the diffusion analogy: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 89-4133, 73 p.
- Kimball, B.A., Broshears, R.E., Bencala, K.E., and McKnight, D.M., 1991, Comparison of rates of hydrologic and chemical processes in a stream affected by acid mine drainage, *in* U.S. Geological Survey Toxic Substances Hydrology Program—Proceedings of the technical meeting, Monterey, California, March 11-15, 1991, Mallard, G.E., and Aronson, D.A., eds.: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 91-4034, p. 407-412.
- Laenen, Antonius, and Risley, J.C., 1997, Precipitation-runoff and streamflow-routing model for the Willamette River Basin, Oregon: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 95-4284, 252 p.
- Leavesley, G.H., Restrepo, P.J., Markstrom, S.L., Dixon, M., and Stannard, L.G., 1996, *Modular Modeling System (MMS)—User's manual*: U.S. Geological Survey Open-File Report 96-151.
- McKnight, D.M., and Andrews, E.D., 1993, Hydrologic and geochemical processes at the stream-lake interface in a permanently ice-covered lake in the McMurdo Dry Valleys, Antarctica: *Verhandlungen der Internationalen Vereinigung fuer Limnologie*, v. 25, p. 957-959.

- Morrice, J.A., Valett, H.M., Dahm, C.N., and Campana, M.E., 1997, Alluvial characteristics, groundwater-surface water exchange and hydrological retention in headwater streams: *Hydrological Processes*, v. 11, p. 253-267.
- Nordin, C.F., and Troutman, B.M., 1980, Longitudinal dispersion in rivers—The persistence of skewness in observed data: *Water Resources Research*, v. 16, no. 1, p. 123-128.
- Runkel, R.L., 1996, Solution of the advection-dispersion equation—Continuous load of finite duration: *Journal of Environmental Engineering, American Society of Civil Engineers*, v. 122, no. 9, p. 830-832.
- Runkel, R.L., and Bencala, K.E., 1995, Transport of reacting solutes in rivers and streams, *in* *Environmental Hydrology*, Singh, V.P., ed.: Dordrecht, The Netherlands, Kluwer, p. 137-163.
- Runkel, R.L., and Broshears, R.E., 1991, One-dimensional transport with inflow and storage (OTIS)—A solute transport model for small streams: Boulder, Colo., University of Colorado, CADSWES Technical Report 91-01, 85 p.
- Runkel, R.L., and Chapra, S.C., 1993, An efficient numerical solution of the transient storage equations for solute transport in small streams: *Water Resources Research*, v. 29, no. 1, p. 211-215.
- Runkel, R.L., and Chapra, S.C., 1994, Reply to Comment on “An efficient numerical solution of the transient storage equations for solute transport in small streams” by W.R. Dawes and David Short: *Water Resources Research*, v. 30, no. 10, p. 2863-2865.
- Runkel, R.L., McKnight, D.M., and Andrews, E.D., 1995, Transient storage in an Antarctic stream, 1995 Fall Meeting of the American Geophysical Union, San Francisco, Calif., December 11-15, 1995: *EOS*, v. 76, no. 46, p. 226.
- Rutherford, J.C., 1994, *River mixing*: Chichester, England, John Wiley and Sons, 347 p.
- Thackston, E.L., and Krenkel, P.A., 1967, Longitudinal mixing in natural streams: *Journal of the Sanitary Engineering Division, American Society of Civil Engineers*, v. 93, no. SA5, p. 67-90.
- Thackston, E.L., and Schnelle, K.B., 1970, Predicting effects of dead zones on stream mixing: *Journal of the Sanitary Engineering Division, American Society of Civil Engineers*, v. 96, no. SA2, p. 319-331.
- Valentine, E.M., and Wood, I.R., 1977, Longitudinal dispersion with dead zones: *Journal of the Hydraulics Division, ASCE*, v. 103, no. HY9, p. 975-990.
- Valett, H.M., Morrice, J.A., Dahm, C.N., and Campana, M.E., 1996, Parent lithology, surface-groundwater exchange, and nitrate retention in headwater streams: *Limnology and Oceanography*, v. 41, no. 2, p. 333-345.
- Wagner, B.J., and Gorelick, S.M., 1986, A statistical methodology for estimating transport parameters—Theory and applications to one-dimensional advective-dispersive systems: *Water Resources Research*, v. 22, no. 8, p. 1303-1315.

