

XII Simposio Iberoamericano sobre planificación de sistemas de abastecimiento y drenaje

“MODELO DE CALIDAD DEL AGUA DE ECOSISTEMAS LENÍTICOS, CONSIDERANDO LOS EFECTOS DE LA TEMPERATURA Y EL PH EN LOS PROCESOS DE TRANSFORMACIÓN FÍSICOS, QUÍMICOS Y BIOLÓGICOS”

Ramiro V. Marbello Pérez (1), Francisco Mauricio Toro Botero (2), Néstor Jaime Aguirre (3)

- (1) Universidad Nacional de Colombia. Phone: +57 4 4255111. E-mail: rymarbel@unal.edu.co
(2) Universidad Nacional de Colombia. Phone: +57 4 4255123. E-mail: fmtoro@unal.edu.co
(3) Universidad de Antioquia, en Medellín. Phone: +57 4 2196662. E-mail: naguirre@udea.edu.co

RESUMEN

Este artículo describe un modelo de calidad del agua en ecosistemas leníticos estratificados, para el estudio del comportamiento del fitoplancton y sus interrelaciones con las restantes variables determinantes de la calidad del agua, conocidas también con el nombre de variables de estado.

El modelo discretiza el dominio en tres capas (epi, meta e hipolimnio) y, en cada paso de tiempo, resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales que representan los fenómenos de transporte advectivo y difusivo, y los procesos físicos, químicos y biológicos que ocurren en el ecosistema. Está basado en las ecuaciones y el algoritmo de cálculo del Modelo Lake2K, y se complementa con otras ecuaciones del Modelo Qual2K, y con un algoritmo de cálculo de la especiación del equilibrio químico del Sistema Carbonato-Fosfato-Amónico. Entre los aportes novedosos del modelo, se destacan la transferencia de O₂, CO₂ y N₂ con la atmósfera, el cálculo del equilibrio químico entre especies disueltas, la alcalinidad y el pH, y la influencia de éste y de la temperatura del agua en los procesos físicos, químicos y biológicos que ocurren en la columna líquida y en la capa de sedimentos.

El modelo está implementado en la plataforma Microsoft Excel, codificado en Visual Basic for Applications, (VBA) y, previamente calibrado, permitirá simular la calidad del agua de lagos y embalses, bajo distintos escenarios de trabajo, en períodos secos y lluviosos.

Palabras clave: modelo de calidad del agua, lagos, embalses, equilibrio químico, eutrofización.

ABSTRACT

This article describes a water quality model for lentic ecosystems, in order to study the behavior of phytoplankton and its relationship with the remaining variables that determine water quality, which are also known as state variables.

The model discretizes the domain into three layers (epi, meta and hypolimnion), and solve the system of differential equations representing the phenomena of advective and diffusive transport, and biological, physical and chemical processes that occur in the ecosystem. It is based on the equations and calculation algorithm of Lake2K Model, and supplemented with other equations of QUAL2K Model and an algorithm for calculating the chemical equilibrium speciation of the carbonate-phosphate- ammonia system.

Among the model's contributions, it highlights the transfer of O₂, CO₂ and N₂ with the atmosphere, the calculation of chemical equilibrium between dissolved species, alkalinity and pH, and the influence of this and water temperature in physical, chemical and biological processes that occur in the liquid column and in the sediment layer. The model is implemented within the Microsoft Excel platform, coded within Visual Basic for Applications, and, after its calibration, the model will allow to simulate the water quality of lakes and reservoirs, for different work scenarios, in dry and rainy seasons.

Key words: water quality model, lakes, reservoirs, chemical equilibrium, eutrophication

INTRODUCCIÓN

Un modelo es una representación idealizada, simplificada e incompleta de un sistema de la vida real. No obstante ser una abstracción instantánea de la realidad, un modelo identifica las variables que predominan en el sistema a modelar, y las relaciones entre ellas.

Un modelo matemático supone que todas las variables relevantes en el proceso sean cuantificables y estén sujetas a diferentes relaciones que definen, a partir de funciones de tipo matemático, el comportamiento del sistema real.

El recurso hídrico se considera un gigantesco sistema, del cual depende la supervivencia de la humanidad. El hombre perturba este sistema de muchas formas: extrayendo agua para el abastecimiento de poblaciones, la agricultura y la industria, y construyendo estructuras diversas que facilitan el uso de los cursos de agua para la generación de energía eléctrica, la pesca, la navegación y la recreación. Así mismo, emplea los ecosistemas hídricos como medio receptor de residuos sólidos y líquidos, degradando preocupantemente sus calidades física, química y biológica, y elevando progresivamente el estado trófico de ecosistemas leníticos

Los modelos matemáticos de calidad del agua superficiales constituyen poderosas herramientas de cálculo, altamente necesarias para entidades gubernamentales, autoridades ambientales y profesionales comprometidos con la gestión y el uso sostenible del agua, no sólo por su relativo bajo costo y predicción elevada del comportamiento de especies y sustancias contaminantes en el agua, sino, también, por permitir evaluar medidas de control y corrección ejercidas sobre este recurso, frente a posibles escenarios de gestión del agua y de la cuenca hidrográfica a la cual pertenece.

El presente trabajo forma parte esencial de la tesis doctoral, en fase de desarrollo, del autor principal del mismo. Plantea la conceptualización e implementación de un modelo matemático de calidad del agua en ecosistemas leníticos, para el estudio del comportamiento del fitoplancton y sus interrelaciones con otras variables determinantes de la calidad del agua, tales como: temperatura, conductancia, sólidos suspendidos inorgánicos, zooplancton, materia orgánica, oxígeno disuelto, carbono inorgánico, pH, alcalinidad, fósforo orgánico, fósforo soluble reactivo, nitrógeno orgánico, amonio y nitratos, entre otros.

El modelo discretiza el dominio en tres capas (epi, meta e hipolimnion), y resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales que representan los fenómenos de transporte advectivo y difusivo, y los procesos físicos, químicos y biológicos, que afectan a dichas especies determinantes, y sus interacciones en la columna líquida, y con la atmósfera y los sedimentos, permitiendo conocer su evolución temporal.

Este modelo está basado en las ecuaciones y el algoritmo de cálculo del *Modelo Lake2K*, Versión Beta (Chapra, S. and Martin, J., 2004), complementado con otras ecuaciones del *Modelo Qual2K* (Chapra, S. et al), y con un algoritmo de cálculo de la especiación del equilibrio químico del Sistema Carbonato-Fosfato-Amónico.

Como sus antecesores, el presente modelo está programado en el ambiente *Visual Basic for Applications (VBA)*, y emplea la plataforma de *MS Excel*, como medio de interacción con el usuario, para gestionar la entrada y salida de datos, tablas de resultados y gráficas.

Entre las novedades que aporta el modelo se destacan la transferencia de O_2 , CO_2 y N_2 , con la atmósfera, el cálculo del *pH* de equilibrio, y la influencia de éste y la temperatura del agua en los procesos físicos, químicos y biológicos que ocurren en la columna líquida y en la capa de sedimentos.

Previamente calibrado, el modelo permitirá simular la calidad del agua de lagos, embalses, ciénagas y lagunas, y determinar su estado trófico actual, bajo distintos escenarios de trabajo, tales como variaciones en la magnitud y distribución de los caudales de entrada y salida, y en las concentraciones iniciales de las variables de estado del modelo, en períodos secos o lluviosos.

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

La eutrofización es la fertilización excesiva de un cuerpo de agua que conlleva a una superpoblación exagerada de fitoplancton, debida a su enriquecimiento progresivo por aportes de nutrientes, tales como *P*, *N*, *C* y *Si*.

El fitoplancton es el nombre con el cual se conoce a los organismos vegetales, generalmente diminutos, que flotan y son desplazados pasivamente en aguas dulces y saladas, entre los que sobresalen las algas, las diatomeas y otras plantas acuáticas. Al morir, el fitoplancton se deposita en el fondo de los ríos,

embalses o lagos, generando residuos orgánicos que, al descomponerse, consumen gran parte del oxígeno disuelto, afectando la vida acuática, produciendo la muerte por asfixia de la flora y la fauna acuáticas. Además, imparte color, olor y sabor desagradables al agua, e inadecuadas condiciones para su consumo. El crecimiento de algas también puede afectar el uso recreativo de embalses y lagos, así como la circulación apropiada del agua en ríos y estuarios.

El incremento de la producción de plantas acuáticas, por su parte, tiene varias consecuencias concernientes a los usos del agua:

Interferencias estéticas y recreacionales.

Grandes variaciones diurnas del pH y el oxígeno disuelto (OD), lo cual puede provocar la disminución de la biodiversidad.

El fitoplancton y la maleza se sedimentan en el fondo del cuerpo de agua y originan una demanda del oxígeno disuelto, lo cual, resulta en bajos niveles de OD en el hipolimnio, la capa más profunda de lagos y embalses.

Las diatomeas (fitoplancton que requiere de sílice) y las algas filamentosas pueden atascar los filtros de las plantas de tratamiento de agua, y las turbinas en centrales hidroeléctricas.

El crecimiento extenso de macrófitas acuáticas interfieren con la navegación, la aeración y la capacidad de transporte de las corrientes de agua.

La condición de salud ecológica de un ecosistema lenítico de agua se describe en términos de su estado trófico, es decir, de su grado de eutrofización. Para lagos y embalses, se han empleado cuatro designaciones de su estado:

- Oligotrófico: lagos y embalses claros y poco productivos.
- Mesotrófico: lagos y embalses de productividad intermedia.
- Eutrófico: lagos y embalses de alta productividad, respecto de su estado natural.
- Hipereutrófico: lagos y embalses de extrema productividad, reducida capacidad útil, por acumulación de sedimentos, e inminente conversión a pantano.

La gestión de la calidad del agua de ecosistemas leníticos incluye, entre otras acciones, la toma de decisiones frente a los usos benéficos, manejo, operación y medidas de control sobre el recurso hídrico.

En la actualidad, existen diversos modelos de calidad del agua superficiales, que han surgido con el desarrollo de la informática y de las técnicas

numéricas de solución de sistemas de ecuaciones en derivadas parciales, con los cuales se puede describir, de manera apropiada, la complejidad de los ecosistemas acuáticos.

Sin embargo, la mayoría de los modelos de calidad de agua que existen actualmente no simula el sistema carbonato, ni sus variables asociadas: el dióxido de carbono, $CO_{2(ac)}$, el pH y la *alcalinidad*; variables éstas que están directamente relacionadas con la vegetación acuática, el fitoplancton y su consecuente problema de eutrofización.

En respuesta a la necesidad arriba referida, este trabajo propone la conceptualización, el desarrollo y la aplicación de un modelo matemático, para simular el comportamiento de las especies determinantes de la calidad del agua de ecosistemas acuáticos leníticos, incluyendo los procesos de transformación de especies químicas simuladas y el efecto del pH y la temperatura, en los procesos de transformación bioquímicos que ocurren en dichos ecosistemas.

BASE CIENTÍFICO – TEÓRICA

Los ecosistemas hídricos o cuerpos de agua pueden ser lénticos (*lenis*: calma) o lóticos (*lotus*: arrastre), según que el agua se mueva con poca velocidad (lagos, embalses, ciénagas, lagunas y humedales), o con velocidades comparativamente grandes (estuarios, ríos y corrientes naturales), respectivamente.

Según la necesidad, los embalses se conciben con un solo propósito o con propósito múltiple, entre los cuales se cuentan abastecimiento de agua a poblaciones, suministro de agua para riego, generación de electricidad, navegación, recreación y cultivo de peces.

La producción de energía y la calidad del agua en el embalse están en un continuo reto, en el cual los procesos de producción de energía pueden afectar la calidad del agua del embalse, al tiempo que la calidad del agua del embalse puede limitar la producción de energía.

Las tres herramientas empleadas en gestión de la calidad del agua son: 1) la observación, 2) el análisis teórico, y 3) la modelación matemática; cada una con sus ventajas e inconvenientes.

La observación es la única manera de conocer las características reales de un ecosistema, y suministra las bases para el análisis teórico y el modelamiento numérico. Sólo después de que se hayan hecho

ciertas observaciones, pueden, el análisis teórico y el modelamiento numérico, ayudar a entender la hidrodinámica y los procesos de calidad del agua, y producir resultados confiables para soportar la toma de decisiones con respecto al ecosistema.

En esta sección, se enuncian los principios fundamentales y las funciones matemáticas, sobre los cuales se basan los modelos hidrodinámicos y de calidad del agua. Así mismo, se presentan los fundamentos teóricos y la formulación matemática de las dinámicas de transporte, procesos de reacción/transformación, asentamiento y resuspensión de las especies determinantes de la calidad del agua, objetos de la modelación de calidad.

Modelos Hidrodinámicos

La hidrodinámica estudia el movimiento del agua y las fuerzas que actúan sobre ésta en movimiento, y es la responsable de los mecanismos de transporte de nutrientes, especies disueltas y suspendidas, sedimentos, y sustancias contaminantes y tóxicas presentes en la masa líquida.

Los modelos hidrodinámicos se derivan de la aplicación de las leyes de conservación, de Newton, a propiedades conservativas, tales como: momentum lineal, energía calórica, masa de agua y masa de contaminante. Estas leyes son: *Ley de Conservación del Momentum Lineal*, *Ley de Conservación de la masa*, y *Ley de Conservación de la Energía*, las cuales se presentan a continuación:

Ecuaciones de Conservación del Momentum Lineal:

$$\frac{du}{dt} + u \frac{du}{dx} + v \frac{du}{dy} + w \frac{du}{dz} = -g \frac{d\eta}{dx} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{du}{dz} \right) + f_u \quad (1)$$

$$\frac{dv}{dt} + u \frac{dv}{dx} + v \frac{dv}{dy} + w \frac{dv}{dz} = -g \frac{d\eta}{dy} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{dv}{dz} \right) + f_v \quad (2)$$

$$\frac{dw}{dt} + u \frac{dw}{dx} + v \frac{dw}{dy} + w \frac{dw}{dz} = -g \frac{d\eta}{dz} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{dw}{dz} \right) + f_z \quad (3)$$

Ecuación de conservación de la masa de agua:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (4)$$

Ecuación de conservación de la energía térmica:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q_L + Q_K \quad (5)$$

En las ecuaciones (1) a (5), u , v y w son las componentes de la velocidad de la partícula líquida, según las tres direcciones ortogonales, x , y e z , en (m/s); t es el tiempo, en (s); g es la constante gravitacional, en (m/s²); η representa el desplazamiento de la superficie libre de agua, con respecto a la posición de reposo, en (m); ν y ϵ son los coeficientes de viscosidad dinámica y viscosidad turbulenta, respectivamente, en [kg_m/(m·s)]; f_u , f_v , y f_w son las fuerzas máscas de Coriolis, según las direcciones principales x , y e z ; T representa la energía calórica del agua, en (cal); K_x , K_y y K_z son los coeficientes de difusión longitudinal, lateral y vertical, en (m²/s), respectivamente, y; Q_L y Q_K representan las tasas o flujos de entrada/salida externas de energía, en (cal/s).

Los modelos hidrodinámicos robustos resuelven simultáneamente la ecuación de balance de energía, la ecuación de conservación de masa, y las tres ecuaciones de momentum lineal. Se pueden aplicar al modelamiento de ríos, estuarios, lagos, lagunas, ciénagas, embalses y zonas costeras, y, típicamente, tienen las siguientes características: 1) son uni, bi y tridimensionales y dependientes del tiempo; 2) aplican completamente los procesos termodinámicos; 3) consideran la mezcla por turbulencia vertical; 4) calculan las componentes de la velocidad de la partícula, para todo instante y según las tres direcciones; y 5) para todo instante y cualquiera posición, determinan la presión, la temperatura y la salinidad del agua, la profundidad del flujo, y la variación de la superficie libre del agua en movimiento.

Modelos de Calidad del Agua

La Figura 1 esquematiza un ecosistema hídrico lenítico (un lago o un embalse), cuya calidad se puede evaluar empleando un modelo matemático de calidad del agua. En ella, se muestran algunas de las especies determinantes de la calidad del agua, y los procesos físicos, químicos y biológicos que ocurren en el sistema.

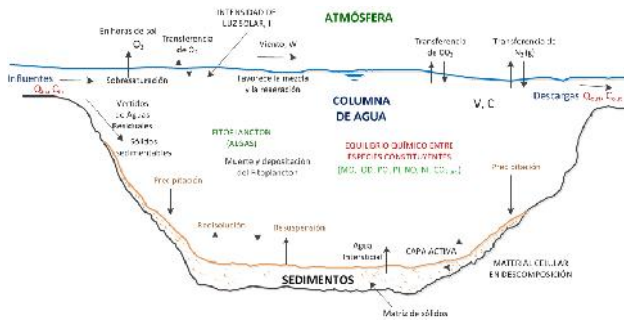


Figura 1. Esquema de un ecosistema lenítico.

Los modelos matemáticos de calidad del agua superficial están conformados por un conjunto de ecuaciones diferenciales que describen el comportamiento de diversas sustancias o especies determinantes de la calidad del agua en el medio acuático. Estas ecuaciones representan los mecanismos, mediante los cuales la concentración de una sustancia disuelta o suspendida en el agua, varía espacial y temporalmente, en función de las entradas y salidas de materia, y de las transformaciones que se produzcan, durante el tiempo de permanencia en el sistema natural.

La expresión matemática de la variación de la concentración de una especie o sustancia, es la ecuación de conservación de la masa de dicha especie, en un elemento de volumen, durante un tiempo determinado, y es la siguiente (Zhen-Gang Ji, 2008, Martin, J. et al. 2007):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(uC) - \frac{\partial}{\partial y}(vC) - \frac{\partial}{\partial z}(wC) + \frac{\partial}{\partial x}\left(E_x \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(E_y \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(E_z \frac{\partial C}{\partial z}\right) + Q + (R + S) \quad (6)$$

donde, C es la concentración de la especie determinante de la calidad del agua, en (mg/l); t es el tiempo, en (s); u , v y w son las componentes de la velocidad de la partícula de agua, según las tres direcciones ortogonales, x , y e z , en (m/s); E_x , E_y , y E_z son los coeficientes de difusión longitudinal, lateral y vertical, en (m²/s); Q representa las cargas de entradas/salidas externas de la especie, en [mg/(l·s)], R representa las tasas de los procesos de reacción/transformación química y bioquímica internos, en [mg/(l·s)]; y S es el término fuente/sumidero, debidos a asentamiento y resuspensión, en [mg/(l·s)].

En algunos modelos, como el presente, los términos ($R + S$) se agrupan en un solo término llamado

fuelle/sumidero, denotado por S_i , donde i representa la i ésima especie determinante de la calidad del agua o variable de estado.

METODOLOGÍA

El presente modelo, al igual que su predecesor, *Lake2K*, modela el cuerpo de agua como un sistema unidimensional, en la dirección vertical, consistente de tres capas verticales: epilimnion, metalimnion e hipolimnion, cada una de las cuales se considera como un tanque reactor completamente mezclado. Véase la Figura 1.

La corriente influente ingresa al cuerpo de agua a través de una de las capas de éste, dependiendo de su densidad y la de la capa, de acuerdo a las siguientes condiciones:

- Si la densidad del influente es menor que el promedio de las densidades del epilimnion y metalimnion, el influente ingresa por el epilimnion.
- Si la densidad del influente es mayor que el promedio de las densidades del epilimnion y metalimnion, el influente ingresa por el hipolimnion.
- En cualquier otro caso, el influente ingresa por el metalimnion.

La densidad del agua se calcula en función de la temperatura del agua y de la concentración de los sólidos disueltos (salinidad, S), de acuerdo con la siguiente expresión (Millero y Poisson, 1981):

$$\rho = \rho_0 + aS + bS^{\frac{3}{2}} + cS^2 \quad (7)$$

donde ρ_0 representa la densidad del agua dulce, y se obtiene a partir de la expresión (8), en función de la temperatura, T , en (°C); los términos a , b y c son coeficientes obtenidos a partir de ecuaciones empíricas, en función de la temperatura, T ; y S es la salinidad del agua, obtenida por la expresión (9), en función de la concentración de cloruros, $[Cl]$.

$$\rho_0 = 999.842594 + 0.06793952T - 9.09529 \cdot 10^{-3}T^2 + 1.001685 \cdot 10^{-4}T^3 - 1.120083 \cdot 10^{-6}T^4 + 6.536332 \cdot 10^{-9}T^5 \quad (8)$$

La salinidad del agua está relacionada con la concentración de los cloruros, $[Cl]$, de acuerdo con la siguiente expresión (Thomann & Mueller, 1987):

$$S = 1.80655 \cdot 10^{-3}[Cl] \quad (9)$$

A su vez, la concentración de cloruros está relacionada con la conductancia, (*Cond*), en (μmho) por medio de la siguiente ecuación empírica:

$$[\text{Cl}^-] = 0.3091\text{Cond} - 26.021 \quad (10)$$

El presente modelo simula el ecosistema lenítico como un sistema unidimensional en la dirección vertical, conformado por tres capas horizontales: epilimnion, metalimnion e hipolimnion (Figura 2). Las dos últimas capas mantienen constante su volumen, en tanto que el volumen de la primera puede variar.

En cada capa del cuerpo de agua, el modelo plantea y resuelve la ecuación del balance de energía (calor). Por ejemplo, para el epilimnion, y para el caso en que el influente y el efluente pasan a través del epilimnion, dicha ecuación de conservación de energía expresa lo siguiente:

$$\frac{d\text{Heat}_1}{dt} = Q_{in}\rho C_p T_{in} + Q_p\rho C_p T_{aire} - Q_{out}\rho C_p T_1 + E_1'\rho(T_2 - T_1) + J_h A_0 \quad (11)$$

donde Heat_1 es el calor del epilimnion, (cal); t es el tiempo, en (día); ... es la densidad del agua, en (g/cm^3); C_p es el calor específico del agua, en [$\text{cal}/(\text{g}\cdot^\circ\text{C})$]; T_{in} es la temperatura del agua influente, en ($^\circ\text{C}$); T_1 y T_2 son las temperaturas del epilimnion y del metalimnion, respectivamente, en ($^\circ\text{C}$); T_{aire} es la temperatura del aire, en ($^\circ\text{C}$); E_1' es el coeficiente volumétrico de difusión turbulenta, a través de la frontera inferior del epilimnion, en ($\text{m}^3/\text{día}$); A_0 es el área superficial del epilimnion, en (m^2); y J_h es el flujo de calor intercambiado en la interfaz aire-agua, en [$\text{cal}/(\text{cm}^2\cdot\text{día})$].

Asimismo, el modelo plantea y calcula el siguiente balance de agua, en cada paso del tiempo de simulación:

$$\frac{dV}{dt} = Q_{in} + Q_p - Q_e - Q_{out} \quad (12)$$

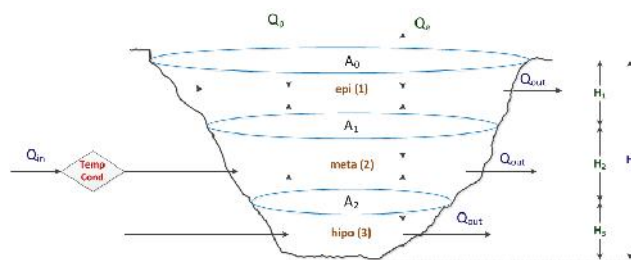


Figura 2. Discretización del dominio del ecosistema.

donde V es el volumen del cuerpo de agua, en (m^3); t es el tiempo, en (día); Q_{in} es el caudal de entrada, en ($\text{m}^3/\text{día}$); Q_p es el caudal debido a precipitaciones, en ($\text{m}^3/\text{día}$); Q_e es el caudal de evaporación, en ($\text{m}^3/\text{día}$); y Q_{out} es el caudal de salida, en ($\text{m}^3/\text{día}$). Véase la Figura 2.

La ecuación (12) se integra para simular el cambio de volumen de agua del ecosistema, en función del tiempo.

Las variables de estado que incluye el presente modelo, con su símbolo y sus unidades de expresión, se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Variables de estado o especies determinantes de la calidad del agua, simuladas en el modelo.

Variable de estado	Símbolo	Unidades
Temperatura	T	$^\circ\text{C}$
Densidad	...	g/l
Conductancia	s	μmho
Sólidos suspendidos inorgánicos	m_i	mgD/l
Oxígeno disuelto	o	mgO_2/l
Carbono orgánico particulado	c_s	mgC/l
Carbono orgánico disuelto	c_f	mgC/l
Nitrógeno orgánico	n_o	$\mu\text{gN}/\text{l}$
Amonio	n_a	$\mu\text{gN}/\text{l}$
Nitrato	n_n	$\mu\text{gN}/\text{l}$
Fósforo orgánico	p_o	$\mu\text{gP}/\text{l}$
Fósforo inorgánico	p_i	$\mu\text{gP}/\text{l}$
Silicio orgánico	s_o	mgSi/l
Silicio inorgánico	s_i	mgSi/l
Fitoplancton	a_p	$\mu\text{gA}/\text{l}$
Zooplancton herbívoro	z_h	mgC/l
Zooplancton carnívoro	z_c	mgC/l
Carbono inorgánico	c_i	mole/l
Alcalinidad	alk	mgCaCO_3/l
pH	pH	unidades

Para cada variable de estado (o especie determinante de la calidad del agua, en cada paso de tiempo de simulación, y para cada una de las capas, el modelo realiza el siguiente balance de masa (ecuación de conservación de masa):

$$V_i \frac{dc_i}{dt} = Q_{in}c_{in} + Q_{out}c_i + E_1'(c_{i+1} - c_i) + V_i S_i \quad (13)$$

donde V_i es el volumen de la capa i ésima, en (m^3); c_i y c_{i+1} son las concentraciones de la especie determinante o variable de estado, en las capas i e $i+1$, respectivamente, en (g/m^3); t es el tiempo, en (día), Q_{in} y Q_{out} son los caudales de entrada (influyente) y de salida (efluente), en ($\text{m}^3/\text{día}$),

respectivamente; c_{in} es la concentración, en (g/m^3) de la variable de estado contenida en el caudal influente, Q_{in} ; E'_1 es el coeficiente volumétrico de difusión turbulenta, de la capa 1, en $(m^3/día)$; y S_i es la tasa de cambio o término fuente/sumidero de la especie determinante, debida a procesos de reacción y de transformación, y a transferencia de masa, en $[g/(m^3 \cdot día)]$.

Como se puede apreciar en la ecuación (13), el modelo aplica el fenómeno de difusión turbulenta, para simular la mezcla de agua entre dos capas adyacentes, representado por el término E'_1 . Este coeficiente, a su vez, es función del coeficiente volumétrico de difusión vertical turbulenta, a través de la frontera inferior de la capa i , E_i , en $(m^2/día)$, del área superficial, A_i , de la capa i , en (m^2) , y de los espesores H_i y H_{i+1} , de las capas i e $i+1$, en (m) , respectivamente, de acuerdo con la siguiente expresión:

$$E'_1 = \frac{E_i A_i}{(H_i + H_{i+1})/2} \quad (14)$$

Los términos fuentes/sumideros, S , en la ecuación (13), para las variables de estado del modelo, se esquematizan en la Figura 3.

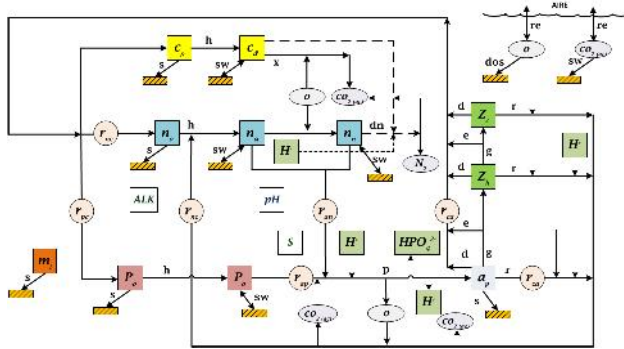


Figura 3. Procesos cinéticos y de transferencia de masa para las variables de estado del modelo.

En la Figura 3, los procesos cinéticos son: hidrólisis, h ; oxidación, x ; nitrificación, n ; desnitrificación, dn ; fotosíntesis, p ; respiración, r ; muerte, d ; pastoreo, g ; y eyección, e . Los procesos de transferencia de masa son: reaeración, re ; asentamiento, s ; demanda de oxígeno del sedimento, sod ; e intercambio sedimento-agua, sw .

A continuación, para algunas de las variables de estado del modelo, sucintamente se presentan las formulaciones matemáticas que, sustituidas en la ecuación (13), conforman el conjunto de ecuaciones diferenciales simultáneas que resuelve el modelo, en

cada paso de tiempo, Ut , a lo largo del tiempo de simulación, Ts :

Fitoplancton, a_p : la biomasa del fitoplancton aumenta por medio de la fotosíntesis, y disminuye vías respiración, muerte, pastoreo y asentamiento. El balance de masa para el fitoplancton se plantea por medio de la siguiente expresión:

$$S_{a_p} = \text{FotoFitop} - \text{RespFitop} - \text{MuerteFitop} - \text{AsentaFitop} \quad (15)$$

donde S_{a_p} es la tasa de cambio de la concentración másica de fitoplancton, en $[gA/(m^3 \cdot día)]$, y A representa la Clorofila A del fitoplancton. Cada uno de los restantes términos fuentes/sumideros de la ecuación (15) tiene su respectiva expresión cinética, las cuales no se presentan aquí, por razones de limitación de espacio.

Zooplancton herbívoro, z_h : la biomasa del zooplancton herbívoro crece por ingesta del fitoplancton, y disminuye por respiración, por muerte y debido al pastoreo del zooplancton carnívoro.

$$S_{z_h} = r_{ca} \epsilon_h \text{PastoZoopHerb} - \text{RespZoopHerb} - \text{MuerteZoopHerb} - \text{PastoZoopCarn} \quad (16)$$

donde r_{ca} es el factor de conversión de la masa de carbono contenida en el fitoplancton, a masa de fitoplancton, expresada ésta como clorofila A; y h es la eficiencia de pastoreo del zooplancton herbívoro sobre el fitoplancton.

Zooplancton carnívoro, z_c : la biomasa del zooplancton carnívoro crece por ingesta del zooplancton herbívoro, y disminuye por respiración y por muerte.

$$S_{z_c} = \epsilon_c \text{PastoZoopCarn} - \text{RespZoopCar} - \text{MuerteCarn} \quad (17)$$

donde c es la eficiencia de pastoreo del zooplancton carnívoro sobre el zooplancton herbívoro.

Carbono orgánico particulado, c_p : El carbono orgánico particulado (COP) aumenta debido a las eyecciones y muerte del fitoplancton y zooplancton, y disminuye por hidrólisis y asentamiento.

$$S_{c_p} = r_{ca} (1 - \epsilon_h) \text{PastoZoopHerb} + (1 - \epsilon_c) \text{PastoZoopCarn} + r_{ca} \text{MuerteFitop} +$$

$$\text{MuerteZoopHerb} + \text{MuerteZoopCarn} - \text{HidrCOP} - \text{AsentFitop} \quad (18)$$

Carbono orgánico disuelto, c_d : El carbono orgánico disuelto aumenta debido a la hidrólisis del *COP*, y disminuye a causa de los procesos de oxidación y desnitrificación.

$$S_{c_d} = \text{HidrCOP} - \text{OxidCOD} - r_{cndn} \text{Desnitr} \quad (19)$$

donde r_{cndn} es el factor de conversión del carbono orgánico que reacciona con el nitrato, en el proceso de desnitrificación.

Nitrógeno orgánico, n_o : El nitrógeno orgánico se incrementa por medio de eyecciones del zooplancton herbívoro y del zooplancton carnívoro, por muerte del fitoplancton y del zooplancton herbívoro y carnívoro, y por respiración endógena del fitoplancton. Disminuye a causa de su hidrólisis y asentamiento.

$$S_{n_o} = r_{n_a}(1 - \varepsilon_h) \text{PastoZoopHerb} + r_{n_c}(1 - \varepsilon_c) \text{PastoZoopCarn} + r_{n_a} \text{MuerteFitop} + r_{n_c} \text{MuerteZoopHerb} + r_{n_c} \text{MuerteZoopCarn} + r_{n_a} f_{org} \text{RespFitop} - \text{HidrNOP} - \text{AsentNOP} \quad (20)$$

donde f_{org} es la fracción del nitrógeno orgánico contenido en el fitoplancton, convertida a clorofila A; y r_{n_a} es el factor de conversión de dicha fracción a masa de fitoplancton, expresada ésta como clorofila_A.

Nitrógeno amoniacal, n_a : El nitrógeno amoniacal aumenta debido a la hidrólisis del nitrógeno orgánico y a la respiración del fito y zooplancton, y disminuye por su nitrificación y por fotosíntesis del fitoplancton.

$$S_{n_a} = \text{HidrNO} + r_{n_a}(1 - f_{org}) \text{RespFitop} + r_{n_c} \text{RespZoopHerb} + r_{n_c} \text{RespZoopCarn} - \text{NitrifNH}_4 - r_{n_a} P_{ap} \text{FotoFitop} \quad (21)$$

donde P_{ap} es el coeficiente de preferencia del fitoplancton por el nitrógeno amoniacal, frente al nitrato.

Nitrógeno nitrato, n_n : El nitrógeno como nitrato aumenta debido a la nitrificación del nitrógeno amoniacal, y disminuye por los procesos de desnitrificación y de fotosíntesis del fitoplancton.

$$S_{n_n} = \text{NitrifNH}_4 - \text{Desnitrif} - r_{n_a}(1 - P_{ap}) \text{FotoFitop} \quad (22)$$

Fósforo orgánico, p_o : El fósforo orgánico aumenta por eyecciones del zooplancton herbívoro y del zooplancton carnívoro, por muerte del fitoplancton y del zooplancton herbívoro y carnívoro, y por respiración endógena del fitoplancton. Disminuye a causa de su hidrólisis y asentamiento.

$$S_{p_o} = r_{p_o}(1 - \varepsilon_h) \text{PastoZoopHerb} + r_{p_c}(1 - \varepsilon_c) \text{PastoZoopCarn} + r_{p_a} \text{MuerteFitop} + r_{p_c} \text{MuerteZoopHerb} + r_{p_c} \text{MuerteZoopCarn} + r_{p_a} f_{org} \text{RespFitop} - \text{HidrPOP} - \text{AsentPOP} \quad (23)$$

donde r_{p_a} es la relación de fósforo a clorofila_A, r_{p_c} es la relación de fósforo a carbono.

Fósforo inorgánico, p_i : El fósforo inorgánico (fósforo soluble reactivo) aumenta debido a la hidrólisis del fósforo orgánico y a la respiración del fito y zooplancton, y disminuye por fotosíntesis del fitoplancton.

$$S_{p_i} = \text{HidrPO} + r_{p_a}(1 - f_{org}) \text{RespFitop} + r_{p_c} \text{RespZoopHerb} + r_{p_c} \text{RespZoopCarn} - r_{p_a} \text{FotoFitop} \quad (24)$$

Sólidos suspendidos inorgánicos, m_i : Los sólidos suspendidos inorgánicos disminuyen por decantación.

$$S_{m_i} = -\text{AsentSSI} \quad (25)$$

Oxígeno disuelto, o : El oxígeno disuelto se incrementa por fotosíntesis de las plantas, y decrece por los procesos de oxidación del *COD*, nitrificación y respiración. Además, dependiendo de que el agua esté insaturada o sobresaturada, el sistema acuático gana o pierde oxígeno por reaeración en la interfaz agua-aire, respectivamente.

$$S_o = r_{oca} [r_{oca} P_{ap} + r_{ocn}(1 - P_{ap})] \text{FotoFitop} - r_{oca} \text{OxidCOD} - r_{ocn} \text{NitrifNH}_4 - r_{oca} r_{oca} \text{RespFitop} - r_{oca} \text{RespZoopHerb} - r_{oca} \text{RespZoopCarn} + \text{ReaerOxig} \quad (26)$$

donde r_{oca} representa la tasa de oxígeno generado por el carbono orgánico producido a través de la fotosíntesis, cuando se consume nitrógeno amoniacal; r_{ocn} es la tasa de oxígeno generado por

el carbono orgánico producido por medio de la fotosíntesis, cuando se consume nitrato; y r_{ON} es la relación oxígeno a nitrógeno consumido en el proceso de nitrificación/desnitrificación.

Carbono inorgánico total, C_{IT} : El carbono inorgánico total (C_{IT}) aumenta a través de la oxidación del carbono orgánico disuelto y de la respiración del fitoplancton y plantas acuáticas, y disminuye por medio de la fotosíntesis de éstos. Según que el medio acuático esté insaturado o sobresaturado de dióxido de carbono acuoso ($CO_{2(ac)}$), éste se gana o se pierde, respectivamente.

$$S_{eIT} = r_{ccc}OxidCOD + r_{ccc}RespFitop + \frac{r_{ccc}RespAlgasFondo}{H} - r_{ccc}FotoFitop - \frac{r_{ccc}FotoAlgasFondo}{H} + ReaerCO_2 \quad (27)$$

donde r_{ccc} es la proporción de carbono inorgánico que se libera en forma de $CO_{2(ac)}$, a través de la oxidación rápida del COD ; r_{ccc} es la proporción de carbono inorgánico que se libera en forma de $CO_{2(ac)}$, a través de la fotosíntesis del fitoplancton; y $AlgasFondo$ son las algas que viven en el fondo del ecosistema acuático.

Potencial hidronio, pH : El pH del agua es la medida de la concentración del ion hidronio (moles/l), en una disolución en equilibrio químico entre las especies disueltas en ella, como ocurre en un ecosistema lenítico. El pH resulta de la solución numérica de la ecuación de electroneutralidad del sistema carbonato-fosfato-amoniacal, en la que participan la *alcalinidad* del agua y las especies disueltas del carbono inorgánico, del fósforo inorgánico, como fosfatos, y del nitrógeno inorgánico, como amonio. Dicha ecuación expresa lo siguiente:

$$Alc = [HCO_3^-] + 2[CO_3^{2-}] + [NH_3] - [H_3PO_4] + [HPO_4^{2-}] + 2[PO_4^{3-}] + [OH^-] - [H^+] \quad (28)$$

Flujos de metano y nutrientes, y demanda de oxígeno de los sedimentos: Los flujos de nutrientes, metano y demanda de oxígeno de los sedimentos se basan en un modelo desarrollado por Di Toro (Di Toro and Fitzpatrick, 1993, Di Toro, 2001).

Véase la representación gráfica de dicho modelo en la Figura 4.

En esta figura, los sedimentos se dividen en dos capas: una aeróbica y delgada y ($\cong 1.0$ mm), subyacente por otra, anaeróbica y de mayor espesor ($\cong 1.0$ mm). El modelo calcula los flujos de oxígeno y nutrientes en la interfaz sedimentos-agua, con base en el flujo descendente de la materia orgánica particulada, desde la columna de agua.

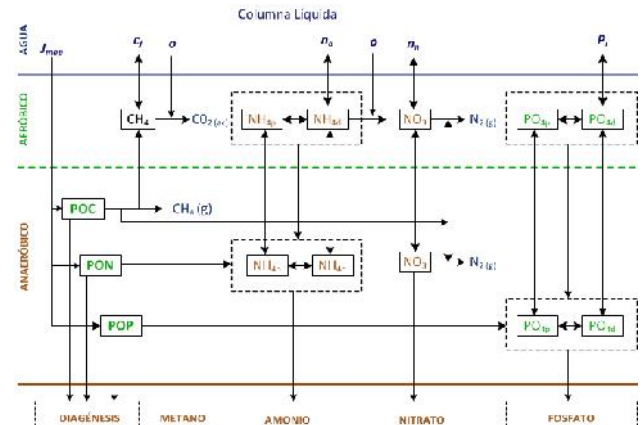


Figura 4. Esquema de procesos y flujos en la interfaz sedimento-columna líquida.
(Di Toro, 2001)

PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

En su fase actual de desarrollo, el presente modelo se ha ejecutado preliminarmente, obteniéndose resultados satisfactorios, pese a no haberse calibrado y validado completamente, en razón del alto número de constantes biocinéticas, coeficientes empíricos y relaciones estequiométricas que contiene el modelo.

Resultados parciales de las ejecuciones del modelo, correspondientes a algunas de las variables de estado, se presentan gráficamente en la Tabla 2.

ANÁLISIS DE RESULTADOS

En la Tabla 2, se presentan las gráficas correspondientes a los resultados obtenidos preliminarmente, tras ejecuciones de prueba del modelo de calidad del agua. Dichas gráficas corresponden a variaciones estacionales de Temperatura, pH , Alcalinidad, Oxígeno Disuelto, Fitoplancton, Nitrógeno Amoniaco, Nitrógeno como Nitrato, Carbono Orgánico Disuelto, Fósforo Orgánico y Fósforo Inorgánico, entre otras que, por limitación de espacio, no se pudieron adjuntar.

Los resultados preliminares obtenidos en la fase actual de desarrollo del modelo, son bastante

satisfactorios, en virtud de que, sin estar fina y completamente calibrado y validado, el modelo reproduce variaciones estacionales coherentes y cualitativamente aceptables.

CONCLUSIONES

Se ha presentado aquí un modelo matemático aplicable al estudio del comportamiento de 20 variables determinantes de la calidad del agua de ecosistemas leníticos, tales como lagos, embalses, ciénagas, lagunas y humedales.

El presente modelo matemático de calidad del agua permite conocer el estado trófico de ecosistemas leníticos, en función de la productividad de los mismos.

El modelo permite simular el comportamiento del fitoplancton y su interrelación con otras especies determinantes de la calidad del agua, tales como fósforo orgánico e inorgánico, nitrógeno orgánico e inorgánico, carbono orgánico e inorgánico, silicio, oxígeno disuelto, entre otras.

Así mismo, el modelo permite conocer los efectos que la temperatura y el pH del agua ejercen en los procesos de reacción y transformación química y bioquímica internos.

El modelo es válido para lagos y embalses, estratificados o no, en donde la mezcla vertical y los

procesos de difusión y el asentamiento son los principales procesos de transporte de masa.

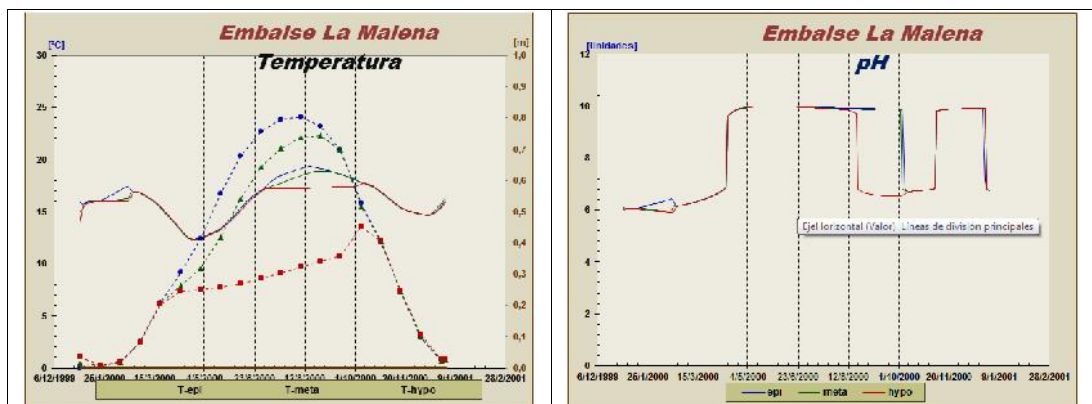
El modelo aquí propuesto servirá como instrumento de gestión ambiental sobre el agua de lagos y embalses, y en la toma de decisiones y medidas de operación y control sobre los mismos.

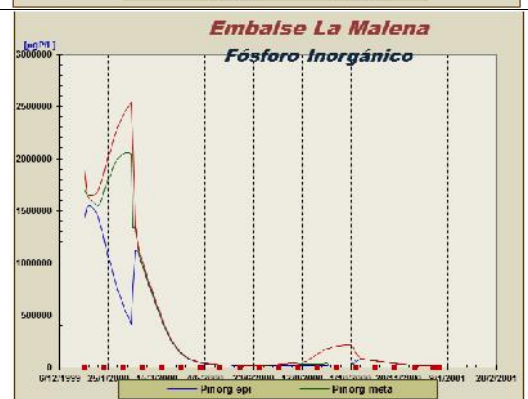
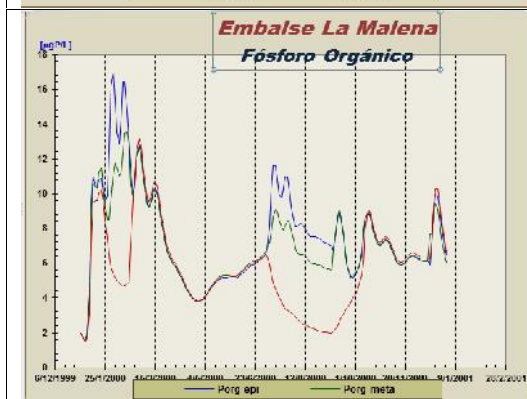
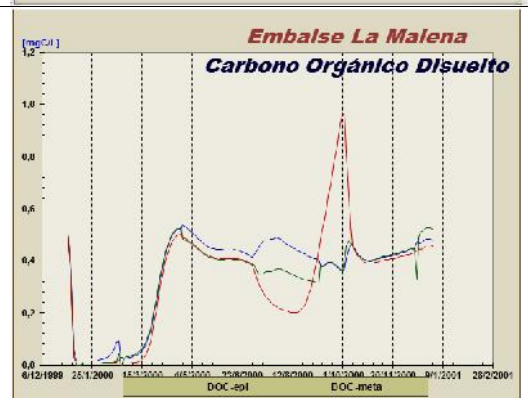
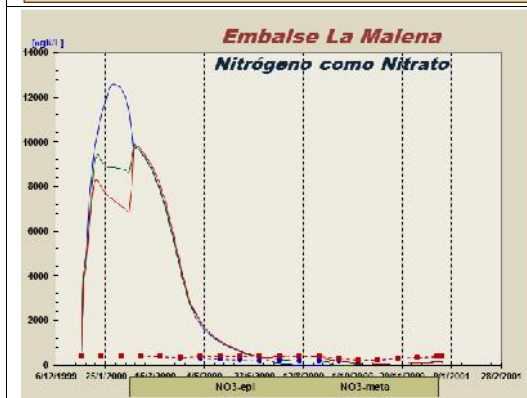
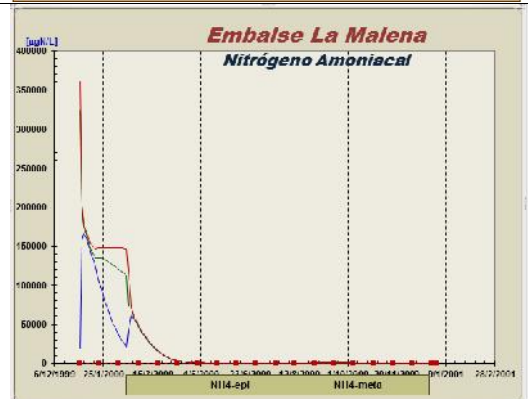
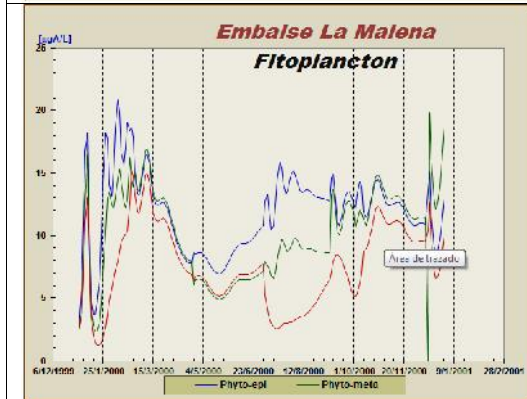
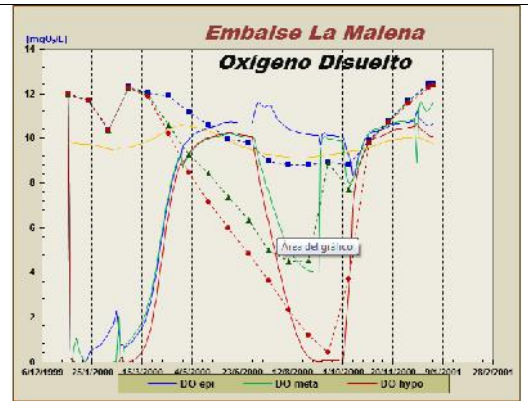
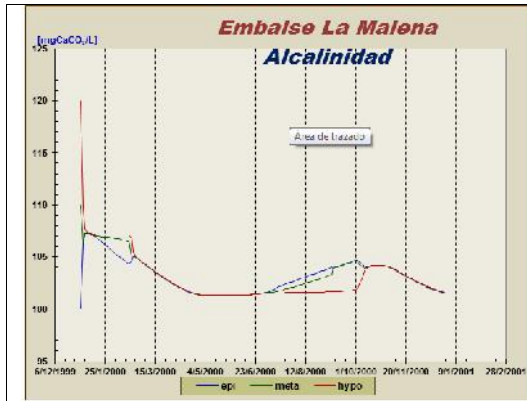
Diferentes escenarios de trabajo podrán simularse empleando el presente modelo, tales como: variaciones estacionales de caudales de entrada y concentraciones de especies constituyentes del agua, y variaciones estacionales de caudales de salida (descargas de embalses), en períodos climatológicos normales, secos o lluviosos.

RECOMENDACIONES Y TRABAJOS FUTUROS

Se recomienda seguir desarrollando el modelo actual, incorporándole nuevas variables determinantes de la calidad del agua, tales como detritos, patógenos y otro tipo de fitoplancton (diatomeas, por ejemplo).

Tabla 2. Resultados parciales de la aplicación del modelo a un cuerpo de agua lenítico, para algunas variables de estado.





BIBLIOGRAFÍA

- Barnwell, T.O. y col., (1985). Rates, Constants, and Kinetics Formulations in Surface Water Quality Modeling. U.S. Environmental Protection Agency, Athens, Georgia. EPA/600/3-85/040.
- Chapra S.C., (1997). Surface Water-Quality Modeling, University of Colorado at Boulder, McGraw-Hill Series in Water Resources and Environmental Engineering, New York, USA. 844 pp.
- Chapra, S.C. and Pelletier, G.J., (2003). QUAL2K: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality: Documentation and Users Manual. Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, Medford, MA.
- Di Toro, D. M., J. J. Fitzpatrick, and R. V. Thomann., (1983). Documentation for water quality analysis simulation program (WASP) and model verification program (MVP). U.S.EPA Ecological Research Series
- Di Toro, D. M. (2001). Sediment Flux Modeling. Ed. John Wiley and Sons, Inc. USA.
- Friedman J.H., (1973). "Eutrophication: A Mathematical Model", University of Arizona, Tucson Arizona, Reports on Natural Resource Systems, pp 49.
- James A., (1993). "Modeling Water Quality in Lakes and Reservoirs", In: An Introduction to Water Quality Modeling, 2Ed, John Wiley and Sons, England.
- Margalef R., (1983). Limnología, Ediciones Omega, Barcelona España.
- Martin, J. L., R. A. Ambrose, and T. A. Wool, (2006). WASP7 Benthic Algae-Model Theory and User's Guide.
- Martin M., Miguel, (1998). Modelación de la Calidad de Aguas Superficiales. Aplicación al caso de La Albufera de Valencia. Tesis Doctoral. Universidad Politécnica de Valencia.
- Martin, J., Edinger, J., Higgins, J., and Gordon, J. (2007). Energy Production and Reservoir Water Quality. A Guide to the Regulatory, Technical and Theoretical Basis for Required Studies. ASCE, USA.
- Martin, J.; Edinger J.; Higgins J. and J. Gordon. (2007). Energy Productions and Reservoir Water Quality. American Society of Civil Engineers, Virginia, U.S.A.
- O'Connor, D.J. (1981). Modeling of eutrophication in estuaries. Humana Press. pp 183-223.
- Orlob, G. T., (1983). Mathematical modeling of water quality. Mathematical Modeling of Water Quality.
- Pelletier, G. J. and Chapra, S. C. (2005). QUAL2Kw Theory and Documentation. A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality.
- Stumm, W. y Morgan, J.J., (1981). Aquatic Chemistry. Wiley-Interscience. New York.
- Thomann R.V. and Mueller J.A., (1987). Principles of Surface Water Quality Modeling and Control. Manhattan College, Harper International Edition, New York, U.S.A.
- Zhen-Gang, Ji, (2008). Hydrodynamics and Water Quality. Modeling Rivers, Lakes, and Estuaries. Ed. John Wiley and Sons, Inc., New Jersey, U.S.A. 626 p.