

INSTITUTO MEXICANO DE TECNOLOGÍA DEL AGUA
COORDINACIÓN DE HIDRÁULICA
SUBCOORDINACIÓN DE HIDRÁULICA AMBIENTAL

PROYECTO INTERNO HC- 1209.1

**ACOPLAMIENTO DE MECANISMOS DE DBO EN UN MODELO
CFD PARA CUERPOS DE AGUA**

Participantes:

Dr. Víctor Manuel Arroyo Correa
M.I Cecilia Millán Barrera
M.I. Armando Laurel Castillo
Dr. Ariosto Aguilar Chávez

México, 2012.

ÍNDICE GENERAL

	<i>Página</i>	
1	INTRODUCCIÓN	1
1.1	PROCESOS FÍSICOS EN CUERPOS DE AGUA	1
1.2	JERARQUIZACIÓN DE LOS PROCESOS QUÍMICOS, BIOQUÍMICOS y BIOLÓGICOS	2
1.3	MODELACIÓN DE OXÍGENO DISUELTO (OD).	4
1.3.1	Fuentes de Oxígeno en Ambientes Acuáticos	5
1.3.2	Efecto Factores Abióticos sobre la Solubilidad de Oxígeno	7
1.3.2.1	<i>Temperatura</i>	7
1.3.2.2	<i>Salinidad</i>	8
1.3.2.3	<i>Distribución vertical de oxígeno en cuerpos de agua estratificados</i>	9
1.4	MODELACIÓN DEL FOSFORO	14
1.4.1	Análisis Químico	16
1.4.1.1	<i>Concentración de fósforo total en aguas naturales</i>	17
1.4.1.2	<i>Fósforo y Productividad</i>	17
1.4.2	Fósforo Orgánico	17
1.4.3	Fósforo inorgánico	18
1.4.3.1	<i>Efecto de metales en la distribución del fósforo</i>	18
1.4.3.2	<i>Efecto de absorción a material arcilloso en la disponibilidad del fósforo</i>	19
1.4.3.3	<i>Efecto de oxígeno en la solubilidad del fósforo</i>	19
1.4.4	Fósforo en el Sedimento	19
1.5	MODELACIÓN DEL NITRÓGENO	22
1.5.1	Generales	22
1.5.1.1	<i>Microorganismos que fijan Nitrógeno Molecular</i>	25
1.5.1.2	<i>Factores que afectan la actividad de la nitrogenasa</i>	25
1.5.1.3	<i>Fijación abiótica del nitrógeno gaseoso</i>	27
1.5.2	Asimilación del Amoniaco	27
1.5.3	Nitrificación	28
1.5.3.1	<i>Distribución de bacterias nitrificantes</i>	29
1.5.3.2	<i>Factores abióticos que afectan el proceso de nitrificación</i>	29
1.5.3.3	<i>Efectos del proceso de nitrificación sobre actividad agrícola</i>	32
1.5.3.4	<i>Efectos del proceso de nitrificación sobre salud humana</i>	33
1.5.4	Denitrificación	34

1.5.4.1	<i>Factores abióticos que afectan el proceso de desnitrificación</i>	35
1.5.5	Amonificación	35
1.5.5.1	<i>Efecto de factores abióticos sobre la amonificación</i>	36
1.5.5.2	<i>Distribución del amoniaco en agua y suelos</i>	36
1.5.5.3	<i>Amonificación de nitrato (trayecto asimilativo de nitrato)</i>	37
1.5.6	Entrada de Nitrógeno a Ambientes Naturales	38
1.5.7	Pérdida de Nitrógeno en Ambientes Naturales	39
1.5.8	Reciclaje del Nitrógeno: Consideraciones Ambientales	39
1.5.8.1	<i>Deposición de nitrógeno y liberación de gases del efecto invernadero</i>	39
1.5.8.2	<i>Razón N:P y calidad del agua</i>	39
1.5.8.3	<i>Ciclo acuático del nitrógeno</i>	40
1.5.8.4	<i>Concentraciones del nitrógeno en condiciones estancadas</i>	41
1.5.9	Nitrificación	42
1.5.10	Denitrificación	42
1.5.11	Fijación del Nitrógeno	43
1.5.12	Implicaciones de las Limitantes de Nutrientes	44
1.5.13	Modelo Hidrobiológico para el Nitrógeno	45
1.6	MODELACIÓN DE FITOPLANCTON	47
1.6.1	Variación temporal del fitoplancton	47
1.7	MODELACIÓN DEL ZOOPLANCTON	49
1.7.1	Componentes del Zooplancton	50
1.7.2	Zooplancton y Estado Trófico de los Sistemas Acuáticos Lénticos	51
1.7.3	Estructura de las comunidades de Zooplancton: Interacciones Planctónicas	53
1.7.4	Desarrollo de las Poblaciones Zooplanctónicas y Limitación de Nutrientes	53
1.7.4.1	<i>Interacciones entre Poblaciones Zooplanctónicas</i>	54
1.7.4.2	<i>Biodiversidad</i>	55
2	MODELACIÓN MATEMÁTICA DE PARÁMETROS DE CALIDAD DEL AGUA	57
2.1	INTRODUCCIÓN	57
2.1.1	Simulación Numérica	57
2.1.2	Optimización	59
2.1.3	Diseño Asistido por Computadora	59
2.1.4	Recopilación de datos	60
2.2	MODELACIÓN DE CINÉTICAS O REACCIONES	60

2.2.1	Cinéticas de Procesos Químicos y Físicos	61
2.2.1.1	<i>Solución en equilibrio</i>	61
2.2.1.2	<i>Cinéticas químicas</i>	62
2.2.1.3	<i>Sistemas homogéneos</i>	62
2.2.1.4	<i>Sistemas heterogéneos</i>	68
2.2.1.5	<i>Reacciones enzimáticas</i>	70
2.2.1.6	Cinéticas de Crecimiento	71
2.3	TEORÍA DEL REACTOR	74
2.3.1	Tipos de Reactor	74
2.3.2	Reactores con Entradas de Flujo Tipo Pistón	76
2.3.3	Reactores de Mezcla Completa	77
3	APLICACIÓN DE LA MODELACIÓN DE CINÉTICAS A UN CUERPO DE AGUA SOMERO	82
3.1	VERIFICACIÓN DEL SOFTWARE UTILIZADO	83
3.1.1	Modelación Unidimensional de dos Cinéticas sin crecimiento de biomasa de primer orden	83
3.1.2	Modelación Unidimensional del acoplamiento de dos Cinéticas sin crecimiento de biomasa linealmente dependientes	85
3.1.3	Modelación Unidimensional del acoplamiento de dos Cinéticas sin crecimiento de biomasa con dependencia no lineal	
3.2	MODELACIÓN BIDIMENSIONAL DEL OXÍGENO DISUELTO Y CARBONO ORGÁNICO EN UN LAGO ARTIFICIAL	91
4	RESULTADOS Y CONCLUSIONES	99
5	REFERENCIAS	99

ÍNDICE DE FIGURAS

	<i>Página</i>	
Figura 1.1	Procesos físicos en lagos	2
Figura 1.2	Aproximación esquemática de un modelo hidrobiológico Nutrientes- Fitoplancton-Zooplancton-Detritus (NPZD).	3
Figura 1.3	Efecto de la temperatura sobre las concentraciones de oxígeno disuelto en agua	8
Figura 1.4	Perfiles de distribución de oxígeno en cuerpos de agua estratificados	9
Figura 1.5	Ciclo del Fósforo	15
Figura 1.6	Reacciones bioquímicas que regulan la distribución de compuestos	24
Figura 1.7	Ciclo redox del nitrógeno	24
Figura 1.8	Ciclo de fijación del nitrógeno	25
Figura 1.9	Reacciones de asimilación de amoníaco	28
Figura 1.10	Proceso de nitrificación	29
Figura 1.11	Efecto del pH sobre el proceso de nitrificación.	31
Figura 1.12	Efecto de la temperatura sobre la actividad de nitrificación	33
Figura 1.13	Trayecto disimilativo de nitrato (denitrificación).	34
Figura 1.14	Disociación de amoníaco en agua.	36
Figura 1.15	Metabolismo de nitrógeno.	38
Figura 1.16	Ciclo general del nitrógeno	41
Figura 1.17	Proceso de nitrificación y denitrificación	43
Figura 1.18	Ejemplos de rotíferos (<i>Brachionus plicatilis</i> y <i>Keratella cochlearis</i>), cladóceros (<i>Daphnia magna</i>) y copépodos (<i>Acanthocyclops vernalis</i>) comunes en sistemas acuáticos.	51
Figura 1.19	Esquema general de las interacciones biológicas que implican al zooplancton (las flechas con mayor grosor indican un mayor efecto relativo).	53
Figura 2.1	Cinéticas de Reacción (la forma de la curva depende del orden de la reacción).	63
Figura 2.2	Gráfica semi-logarítmica de una reacción de primer orden.	64
Figura 2.3	Relación entre la tasa de crecimiento de las bacterias y la concentración de los alimentos.	71
Figura 2.4	Distribución de la salida de los reactores de un trazador. conservativo en flujo pistón y de flujo completamente mezclado.	75
Figura 2.5	Movimiento de material a través de un reactor de flujo tipo pistón.	76
Figura 2.6	Cinéticas en un sistema por lotes.	77
Figura 2.7	Modelo de balance de masa de un reactor con flujo	78

	completamente mezclado con alguna reacción.	
Figura 2.8	Efecto de incrementar la tasa de dilución en un reactor con flujo completamente mezclado.	80
Figura 2.9	Efecto del cambio del gasto de entrada en la concentración del sustrato sobre un reactor con flujo completamente mezclado.	80
Figura 2.10	Método gráfico para estimar el rendimiento y la tasa de mortalidad a partir de experimentos continuos de cultivo.	81
Figura 2.11	Método gráfico para estimar la tasa máxima de crecimiento, K_s .	81
Figura 3.1	Desarrollo del comportamiento de la especie C_1 a través del tiempo.	84
Figura 3.2	Desarrollo del comportamiento de la especie C_2 a través del tiempo.	85
Figura 3.3	Desarrollo del comportamiento de la especie C_1 a través del tiempo, en el caso de especies linealmente dependientes, ecuaciones (2.60).	86
Figura 3.4	Desarrollo del comportamiento de la especie C_2 a través del tiempo, en el caso de especies linealmente dependientes, ecuaciones (2.60).	87
Figura 3.5	Desarrollo del comportamiento de la especie C_1 a través del tiempo, en el caso de especies no linealmente dependientes, ecuaciones (2.62).	89
Figura 3.6	Desarrollo del comportamiento de la especie C_2 a través del tiempo, en el caso de especies no linealmente dependientes, ecuaciones (2.62).	90
Figura 3.7	Resultados del desarrollo del comportamiento de las especies C_1 y C_2 en una dimensión, obtenida por Celia et al (1999).	91
Figura 3.8	Figura esquemática del lago artificial con sus fuentes y sumideros.	92
Figura 3.9	Evolución del campo de velocidades en $t=0.72$, $t=1.1281$, $t=2.256$, $t=4.512$, $t=7.897$, $t=9.023$, $t=10.153$, $t=12$ hrs, en el lago.	94
Figura 3.10	Evolución del campo del oxígeno disuelto en $t=0.72$, $t=1.1281$, $t=2.256$, $t=4.512$, $t=7.897$, $t=9.023$, $t=10.153$, $t=12$ hrs, en el lago.	96
Figura 3.11	Evolución del campo del carbono orgánico en $t=0.72$, $t=1.1281$, $t=2.256$, $t=4.512$, $t=7.897$, $t=9.023$, $t=10.153$, $t=12$ hrs, en el lago.	98

ÍNDICE DE TABLAS

		<i>Página</i>
Tabla 1. 1	Abundancia de gases más comunes en aire no-contaminado y su solubilidad en agua.	6
Tabla 1.2	Calidad del agua en función del % saturación de oxígeno.	7
Tabla 1.3	Solubilidad de oxígeno en función de la temperatura y la salinidad.	8
Tabla 1.4	Nivel de productividad del fósforo	17
Tabla 1.5	Efecto del pH en la solubilidad del fósforo	18
Tabla 1.6	Variable de estado para el Fósforo en sedimentos	21
Tabla 1.7	Variable de estado para el Fósforo Detritus	22
Tabla 1.8	Variable de estado para el Fósforo inorgánico disuelto	22
Tabla 1.9	Estados de oxidación de compuestos nitrogenados.	23
Tabla 1.10	Lista parcial de microorganismos que fijan nitrógeno.	26
Tabla 1.11	Efecto de pH en la disociación del NH ₃ en agua.	36
Tabla 1.12	Balance del N, en el lago Mendota.	44
Tabla 1.13	Formulación del modelo para el Fósforo	48
Tabla 1.14	Características generales de los principales grupos del zooplancton de sistemas continentales .	51

1. INTRODUCCIÓN

El conjunto de características físicas, químicas y biológicas en una corriente de agua determina su calidad. En sistemas abiertos, tales componentes no permanecen estáticos tienen una dinámica particular e interactúan de tal forma que favorecen el establecimiento de procesos físicos, químicos y biológicos que dan lugar a cambios en la calidad del agua.

En un sistema equilibrado la magnitud de tales parámetros suelen regularse naturalmente por mecanismos de autorregulación o recuperación que los mantiene dentro de ciertos niveles de variación, lo cual se conoce como equilibrio del sistema acuático.

El equilibrio de un sistema acuático puede ser alterado tanto por factores naturales o por la incorporación de material orgánico/inorgánico debido a la actividad humana. La modelación hidrobiológica pretende reproducir mediante modelos simplificados y coherentes dichas alteraciones, de tal manera que se puedan predecir sus efectos.

Este interés nació en el siglo pasado, en los años veinte se iniciaron los primeros estudios para conocer la dinámica de los procesos mencionados. A partir de esos modelos hidrobiológicos pioneros se ha desarrollado modelos más completos y complejos.

1.1 PROCESOS FÍSICOS EN CUERPOS DE AGUA

Aún con el gran avance que se ha tenido en la formulación de modelos para simular la calidad del agua, sin embargo, el alto grado de complejidad de la estructura y dinámica de los sistemas acuáticos sumado a su carácter estocástico se hace necesario particularizar el modelo a emplear. Aunque la mayoría de los modelos parten del mismo principio, unos son más complejos que otros en cuanto a procesos y formulación matemática. Por otro lado, es muy difícil adaptar modelos que fueron formulados para ciertas condiciones a otro caso, empezando por la carencia de datos (lo cual es común) de entrada que se requiere para usarlos. Por lo tanto, es deseable que los modelos de calidad del agua, se estructuren de acuerdo con la naturaleza del problema a resolver y de la disponibilidad de la información que se tenga para su aplicación.

Por ejemplo, los lagos y embalses son sistemas con una dinámica determinada por características tales como: morfología, profundidad, aportes de ríos y descargas, termodinámica en la superficie (radiación, viento, etc). Los procesos físicos a su vez, también contribuyen y/o establecen procesos químicos y biológicos (figura 1). Ejemplo de

ello es la estratificación que a lo largo de un ciclo anual juega un papel importante en la redistribución de nutrientes y en el desarrollo de algas en los lagos.

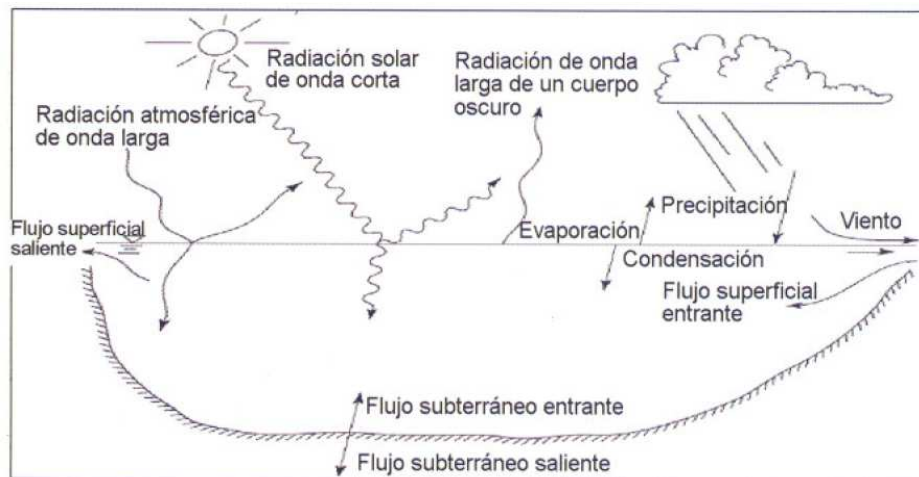


Figura 1. 1 Procesos físicos en lagos

El desarrollo de la estratificación en los lagos y embalses se debe a tres factores importantes (Imboden y Wuest, 1995). Los lagos y embalses son cuerpos de agua comparativamente estancados y poseen velocidades de flujo bajo, a menudo de naturaleza laminar, por lo tanto, la mezcla es controlada por la difusión molecular, la cual permite gradientes estables de temperatura y concentraciones de sólidos disueltos persistentes; tienen tiempos de residencia largos, esto es importante por el calentamiento y enfriamiento, y los procesos químicos son lentos. En tercer lugar, los lagos y embalses se forman por depresiones a veces profundas, que reducen la interacción entre la superficie y el agua del fondo (Socolofsky y Jirka, 2004). Los estudios paleoclimáticos han mostrado que son sensibles a la variabilidad del clima la cual se manifiesta en cambios significativos en su almacenamiento y, en algunos casos en sequía total. En las condiciones actuales el balance de los aportes y las descargas en lagos es frágil debido a la amplia demanda del recurso, por lo tanto, un incremento en la evaporación acentuará la presión del recurso.

1.2 JERARQUIZACIÓN DE LOS PROCESOS QUÍMICOS, BIOQUÍMICOS Y BIOLÓGICOS

Los modelos hidrobiológicos son representaciones matemáticas de sistemas acuáticos, esos modelos describen:

- Transporte de nutrientes tales como nitratos, fosfatos, oxígeno, etc.
- Transporte de organismos (plantas y animales)

- Interacción entre organismos y nutrientes
- Interacción entre diferentes organismos

Los modelos hidrobiológicos describen el comportamiento de los organismos como poblaciones no individualmente. Sus componentes son:

- Temporal: el comportamiento de la especie a través de cierto tiempo.
- Advección: Transporte por el movimiento del fluido
- Difusión turbulenta
- Reacciones químicas: Crecimiento, muerte y decaimiento
- Deposición

Por ejemplo, una aproximación de un modelo hidrobiológico denominado NPZD, Nutrientes-Fitoplancton-Zooplancton-Detritos, en español.

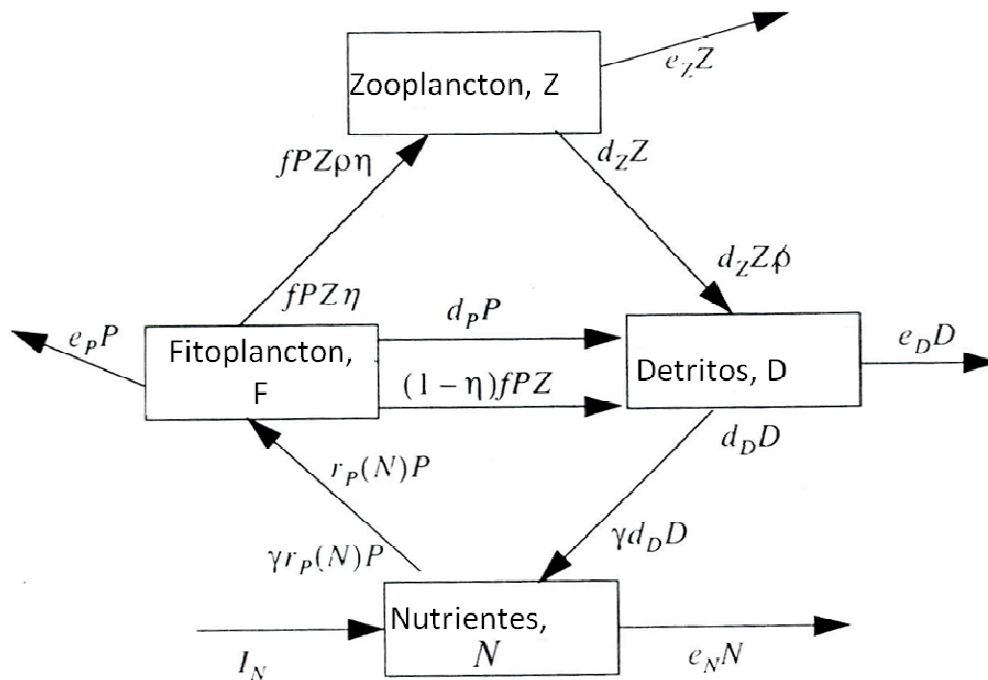


Figura 2. Aproximación esquemática de un modelo hidrobiológico Nutrientes-Fitoplancton-Zooplancton-Detritos (NPZD).

Los **Nutrientes** son elementos tales como nitrógeno, oxígeno, fósforo, carbón, sulfuro, etc, que promueven o constituyen a los seres vivos. Están disponibles en varias formas ya sean orgánicas o inorgánicas. En sistemas acuáticos los nutrientes más importantes son el

nitrógeno y el fósforo.

El **Fitoplancton** es una aglomeración de plantas flotando libremente en cualquier cuerpo natural de agua. Viven cerca de la superficie del agua donde hay suficiente luz para apoyar la fotosíntesis. Consiste de algas, ciertas bacterias y algunos hongos.

El **Zooplancton** es un conjunto de pequeños animales que flotan libremente en el agua. Se alimenta de fitoplancton. Consiste de protozoarios, pequeños crustáceos, algunas medusas y gusanos.

El **Detritus** es materia orgánica muerta, el decaimiento del detritus recicla nutrientes que vuelven al fondo. Forma una fuente importante de nutrientes esenciales como el nitrógeno y el fósforo.

La ecuación del transporte de escalares tridimensional se puede escribir como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_h \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_t \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_v \frac{\partial C}{\partial z} \right) \pm S$$

C, es la concentración de cualquier sustancia o contaminante,
U, V y W, son las velocidades del flujo en los ejes x, y, z, respectivamente.
D_h, D_t, D_v, son los coeficientes de difusión horizontal, transversal y vertical,
S, es el término de reacción fisicoquímica para el contaminante o sustancia respectiva.

El escalar C, en cuestión puede ser cualquier elemento de los componentes de un modelo hidrobiológico. A continuación se expondrá de manera amplia el ciclo de cada uno de los componentes principales de un modelo hidrobiológico

1.3 MODELACIÓN DE OXÍGENO DISUELTO (OD)

El oxígeno disuelto ha sido uno de los constituyentes no-conservativos (su concentración es variable) más estudiados en ecosistemas acuáticos (Packard, et al., 1969). Es un requisito nutricional esencial para la mayoría de los organismos vivos, dada su dependencia del proceso de respiración aeróbica para la generación de energía y para la movilización del carbono en la célula. Además, el oxígeno disuelto es importante en los procesos de: fotosíntesis, oxidación-reducción, solubilidad de minerales y la descomposición de materia orgánica. Los niveles de oxígeno disuelto necesarios para sostener la vida de organismos

acuáticos varían de una especie a otra. La truchas, por ejemplo, requieren concentraciones mayores a 4.0 mg/L para permanecer saludables, mientras que muchas especies de crustáceos pueden vivir y reproducirse en ambientes acuáticos donde la concentración de oxígeno disuelto oscila entre 2.0 y 0.1 mg/L.

Por otro lado, existe una gran variedad de microorganismos (bacterias, hongos y protozoarios) para los cuales el oxígeno no es indispensable (anaerobios facultativos), otros no lo utilizan, siendo indiferentes a su presencia (aerotolerantes) e incluso, para algunos el oxígeno resulta ser tóxico o inhibitorio para el crecimiento (anaerobios estrictos).

La distribución del oxígeno en cuerpos de agua naturales está determinada por el intercambio gaseoso a través de la superficie del agua, la producción fotosintética, el consumo respiratorio y por procesos físicos de advección (movimiento horizontal del aire causado principalmente por variaciones de la presión atmosférica cerca de la superficie) y difusión. Siendo el oxígeno un requisito nutricional esencial para la mayoría de los organismos, es importante medir las variaciones por unidad de tiempo de los procesos bióticos (fotosíntesis y respiración celular) y abióticos que se desarrollan in situ, que afectan su concentración y distribución. Es conveniente conocer dichas variaciones, si el interés es construir modelos dinámicos del funcionamiento de comunidades acuáticas.

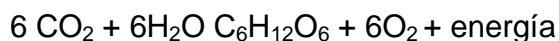
1.3.1 Fuentes de Oxígeno en Ambientes Acuáticos

La entrada de oxígeno al agua envuelve dos procesos: la entrada de oxígeno atmosférico y la generación de oxígeno dentro del cuerpo de agua por la actividad de organismos fotosintéticos. Para el primer proceso es necesario un gradiente apropiado basado en las diferencias entre las presiones parciales de oxígeno en la atmósfera y en el agua. La dirección y velocidad de transferencia del oxígeno al agua dependen de tres factores:

- La magnitud del gradiente de concentración.
- El grosor de la película superficial (la razón de difusión molecular de oxígeno) a 24°C es de sólo 2.3×10^{-5} cm²/segundos, requiriéndose años para que trazas de oxígeno logren penetrar 5 metros a través de la superficie).
- La turbulencia (ej. en áreas de cascadas y represas la alta presión de la corriente de agua lleva a solución los gases atmosféricos).

El aporte de oxígeno al agua a través del proceso de fotosíntesis constituye la otra fuente primaria de oxígeno en el agua. La mayor parte del oxígeno lacustre y de otros cuerpos lóticos proviene de la actividad fotosintética. El oxígeno derivado del proceso de fotosíntesis

se produce como resultado de la fotólisis del agua.



Las diferencias en la concentración de oxígeno disuelto entre diferentes hábitats acuáticos, puede explicarse en base a los siguientes criterios:

- Diferencias en la magnitud de la actividad respiratoria de plantas, animales y microorganismos.
- Influencia de la morfología del fondo en el perfil vertical de oxígeno (mientras mayor es la irregularidad del fondo, mayor es el área superficial de los sedimentos ricos en materia orgánica que demandan oxígeno).
- Diferencias en la penetración de luz y por ende, en la actividad fotosintética.
- Diferencias en la temperatura del agua.
- Entrada de minerales solubles (aumento en salinidad).
- Aumento en concentración de minerales a consecuencia de evaporación de agua.
- Entrada de grandes cantidades de materia orgánica oxidable.

Aunque la abundancia de oxígeno en la atmósfera es relativamente alta, su solubilidad es baja al compararla con la solubilidad del bióxido de carbono (ver Tabla 1 anexa). A pesar de la naturaleza gaseosa del oxígeno, rara vez se expresa su concentración o solubilidad en centímetros cúbicos u otra medida apropiada de volumen. Generalmente, las medidas de oxígeno disuelto se expresan en mgO_2/L , siendo dicha expresión mayor por un factor de 1.4 a la concentración expresada en volumen (la densidad de oxígeno a 0°C y 1 atmósfera de presión es de 1.4276 mg/L).

Tabla 1.1 Abundancia de gases más comunes en aire no-contaminado y su solubilidad en agua.

GASES	Abundancia Relativa en Aire (%)	Solubilidad * (ml/L)	Contenido Total Gas Disuelto a 0°C (mg/L)
Nitrógeno (N_2)	78.084	23.3	20
Oxígeno (O_2)	0.934	---	---
Argón (Ar)	20.946	49	14.6
Bióxido de Carbono (CO_2)	0.033	1710	1.10

* Datos tomados de Cole (1983).

La concentración de oxígeno disuelto se puede expresar también en términos del por ciento de saturación de oxígeno en agua. A menudo éste parámetro es utilizado para describir cualitativamente la calidad de cuerpos de agua, siempre y cuando no estén presentes compuestos tóxicos, tales como metales pesados y pesticidas.

Tabla 2. Calidad del agua en función del % saturación de oxígeno.

Calidad	% Saturación de Oxígeno (a la temperatura y salinidad prevaecientes en el ambiente)
Buena	90
Regular	89 - 75
Dudosa	74 - 50
Contaminada	< 50

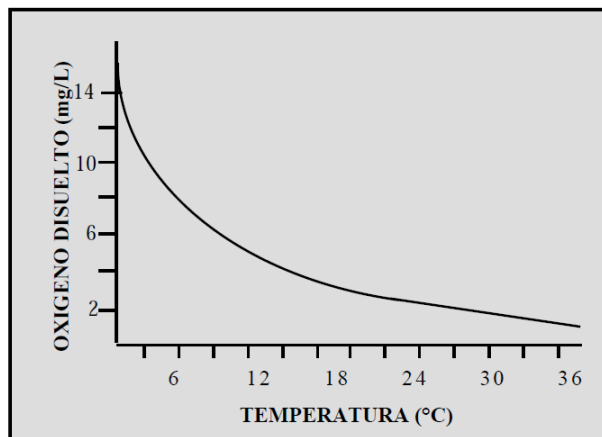
* Datos tomados de Lynch y Poole (1979).

En ocasiones se pueden registrar valores que indiquen que un cuerpo de agua está saturado con oxígeno a una temperatura, salinidad y altitud dadas. En ambientes acuáticos naturales la sobresaturación puede ser producida por una alta tasa de actividad fotosintética. Un signo de la supersaturación es la formación de burbujas sobre superficies sumergidas o dentro del sistema vascular y los tejidos de organismos acuáticos. La supersaturación de gases puede afectar adversamente la vida acuática y puede también interferir con los procesos de tratamiento de aguas usadas. Se han reportado niveles de sobresaturación letales para organismos acuáticos en manantiales, ríos, pozos, lagos, estuarios y agua de mar (áreas de praderas de *Thalassia*) [APHA, 1992]. Por otro lado, las mediciones de oxígeno por debajo del nivel de saturación pueden indicar contaminación con materia orgánica o una alta tasa de actividad respiratoria provocada por procesos naturales (ej. la caída de hojas en cuerpos acuáticos durante el otoño).

1.3.2 Efecto de Factores Abióticos sobre la Solubilidad de oxígeno

1.3.2.1 Temperatura

La cantidad de oxígeno presente en el agua es afectada por la temperatura, la salinidad y la presión atmosférica. La concentración de oxígeno en agua es inversamente proporcional con la temperatura (Figura 1). Si elevamos la temperatura del agua a su punto de ebullición generamos una solución libre de oxígeno. Podemos generalizar que a cualquier presión atmosférica, aguas frías saturadas con oxígeno contienen una mayor cantidad de oxígeno disuelto que aguas tibias o calientes. No obstante, la relación inversa entre temperatura y la concentración de oxígeno disuelto puede verse alterada en ambientes naturales por efecto de los procesos de fotosíntesis y respiración.



* Modificada de Horne y Goldman (1994).

Los valores indicados son representativos de agua pura a nivel del mar a una presión de 760 mm Hg.

Figura 1.3. Efecto de la temperatura sobre las concentraciones de oxígeno disuelto en agua.

Los cambios estacionales generan alteraciones significativas en la temperatura de los cuerpos de agua. Dichas alteraciones en temperatura tendrán, a su vez, un efecto sobre los niveles de oxígeno disuelto. Aumentos en la temperatura del agua traen como consecuencia una disminución en los niveles de oxígeno disuelto. Algunos incidentes de mortandad masiva de peces en cuerpos de agua interiores, durante la época de verano, se pueden relacionar con una reducción en los niveles de oxígeno. De forma inversa, en cuerpos de agua no-contaminados se registran aumentos en los niveles de oxígeno disuelto durante el periodo de invierno.

1.3.2.2 Salinidad

La presencia de algunos minerales en una solución reducen la solubilidad de los gases. Las sales disueltas en agua reducen los espacios intermoleculares disponibles para la disolución del oxígeno. La Tabla 3 ilustra el efecto combinado de la temperatura y la salinidad sobre el oxígeno disuelto. El efecto de la exclusión de oxígeno en función de la concentración de sales disueltas es mínimo excepto en ambientes hipersalinos, tales como los salitrales.

La solubilidad de un gas está determinada por su presión parcial (p) [Ley de Henry]. A su vez, la presión parcial de un gas es afectada por cambios en altitud (cambios en presión atmosférica). Observamos que en cuerpos de agua no contaminados la concentración de oxígeno disminuye con la altitud.

Tabla 1.3 Solubilidad de oxígeno en función de la temperatura y la salinidad.

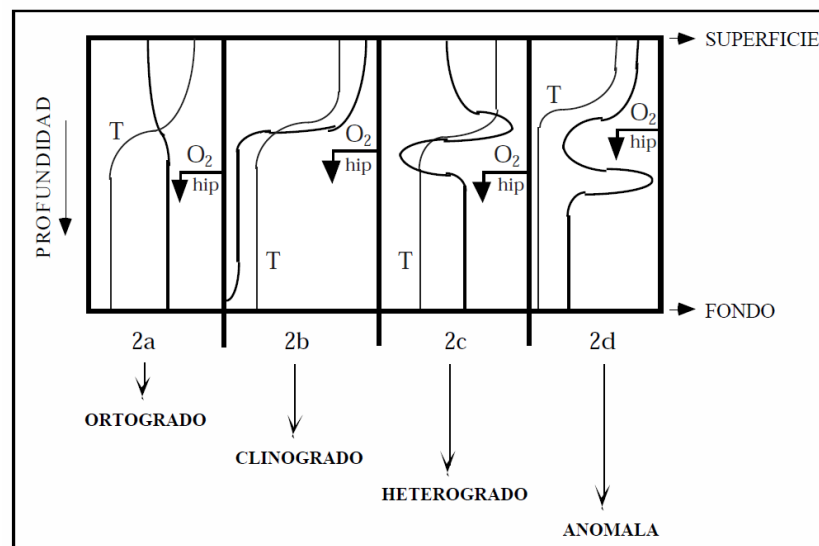
Temperatura °C	Solubilidad De Oxígeno (mg/L)					
	Salinidad (‰)					
	0.030	9.055	18.080	27.105	36.130	45.155
0.0	14.621	13.728	12.888	12.097	11.355	10.657
5.0	12.770	12.024	11.320	10.656	10.031	9.441
10.0	11.288	10.656	10.058	9.493	8.959	8.454
15.0	10.084	9.541	9.027	8.540	8.079	7.642
20.0	9.092	8.621	8.174	7.749	7.346	6.964
25.0	8.263	7.850	7.457	7.083	6.728	6.390
30.0	7.559	7.194	6.845	6.513	6.100	5.806
35.0	6.950	6.624	6.314	6.017	5.734	5.464
40.0	6.412	6.121	5.842	5.576	5.321	5.078
45.0	5.927	5.665	5.414	5.174	4.944	4.724
50.0	5.477	5.242	5.016	4.799	4.591	4.392

* Datos tomados del Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater (APHA, 1992); la salinidad promedio del agua de mar es de 35‰.

Es conveniente aclarar que dicha relación puede ser alterada por los procesos de fotosíntesis y respiración. La relación entre los niveles medidos de oxígeno disuelto, el porcentaje de saturación de oxígeno en agua, la temperatura del agua y la altitud se interpretan tradicionalmente utilizando un nomograma.

1.3.2.3 Distribución vertical de oxígeno en cuerpos de agua estratificados

Se reconocen cuatro (4) patrones de distribución de oxígeno en cuerpos de agua que presentan una estratificación termal (Figura 4).



* Modificada de Horne y Goldman (1994).
T=temperatura; O₂=oxígeno; hip=hipolimnion

Figura 1.4 Perfiles de distribución de oxígeno en cuerpos de agua estratificados.

En cuerpos de agua oligotróficos (presentan una baja actividad fotosintética y por ende, una baja productividad), la distribución del oxígeno a lo largo de la columna de agua varía en función de la temperatura. Este patrón se conoce como distribución ortogrado (Figura 4a). No se observan cambios apreciables en la concentración de oxígeno disuelto a lo largo del perfil de profundidad.

La curva clinogrado (Figura 4b) se caracteriza por un contenido relativamente mayor de oxígeno cerca de la superficie, donde se desarrolla la actividad fotosintética. Este patrón de distribución vertical de oxígeno se observa en cuerpos de agua estratificados, con una alta productividad. Se produce una reducción significativa de oxígeno en el hipolimnion, como resultado de la descomposición aeróbica de la materia orgánica generada por los fototrofos.

La curva heterogrado (Figura 4c) exhibe una pendiente irregular a lo largo del perfil de profundidad. Se puede producir una distribución heterogrado negativa (disminución O_2 disuelto) como resultado de la acumulación de organismos heterotróficos que lleve a que la respiración domine sobre la actividad fotosintética. De igual forma se podría producir una distribución heterogrado positiva como resultado de la acumulación de organismos fototróficos.

Se pueden producir patrones anómalos en la distribución vertical del oxígeno disuelto como resultado del asentamiento de aguas superficiales frías, ricas en oxígeno (Figura 4d). El mismo fenómeno puede también producirse por la estratificación a profundidades intermedias de afluentes que tienen una concentración de oxígeno diferente.

Se considera que el agua bien oxigenada es de buena calidad dado que soporta procesos aeróbicos tales como la respiración, la cual da como resultado la absorción de bióxido de carbono. En contraste, una baja o nula concentración de OD lleva a la anaerobiosis en la cual, la fermentación es el principal mecanismo de producción de energía. Es un proceso en que se liberan al agua gases reducidos tales como el metano (CH_4), anhídrido sulfúrico (H_2S) y amoniaco (NH_3). Estos gases también pueden ser tóxicos, por lo tanto, el ecosistema del cuerpo de agua puede ser dañado drásticamente.

El fitoplancton, el perifitom y las plantas (macrofitas), a través de la fotosíntesis y la respiración, pueden afectar significativamente los niveles de oxígeno disuelto en la columna de agua. Debido a que el crecimiento del fitoplancton requiere de luz solar y nutrientes, la cuantificación de la producción de oxígeno fotosintética necesitará estar relacionada con la dinámica fitoplancton-nutrientes. Esto es, el fitoplancton y los nutrientes deben ser modelados en conjunto para resolver este problema.

En general, el oxígeno se extrae o adiciona al agua por varias reacciones físicas, químicas y biológicas. Si el oxígeno se extrae de la columna de agua y la concentración cae abajo del nivel de saturación, hay una tendencia a reponer este déficit por la transferencia de gas desde la atmósfera a través de la superficie al agua a una cierta tasa. Si se añade oxígeno y la columna de agua tiene una concentración superior a la de saturación, la super saturación se reducirá por la transferencia de oxígeno al aire. Tales interacciones entre la fase gaseosa y la fase líquida están dominadas por el gradiente de presión en la fase gaseosa y el gradiente de concentración en la fase líquida. En general, la transferencia de oxígeno dependerá de:

- El mezclado interno y la turbulencia debida a los gradientes de velocidad y las fluctuaciones.
- La temperatura.
- El mezclado por el viento.
- Las capas superficiales.
- La profundidad de la columna del agua.

La descomposición bentónica del material orgánico se define como la estabilización del material sólido suspendido volátil que se ha asentado al lecho del cuerpo de agua. Esos depósitos son estabilizados por la actividad biológica de muchos organismos diferentes incluyendo las bacterias.

Después de un período de tiempo, los materiales orgánicos pueden acumularse, dado que la tasa de deposición del material particulado es más grande que las tasas de descomposición y pérdida física. La demanda de oxígeno por los sedimentos (SOD) y los organismos bentónicos puede ser, en algunos casos, una fracción importante de la demanda total de oxígeno. Esto puede ser especialmente importante en cuerpos de agua profundos y en condiciones de temperaturas altas. La descomposición de la materia orgánica y la respiración de invertebrados bentónicos son las principales formas de la demanda de oxígeno del sedimento. Además de la descomposición biológica y la respiración bentónica, la producción fotosintética neta de oxígeno de algas bentónicas puede ser un componente significativo de la SOD. Debido a su complejidad, es difícil estimar la SOD analíticamente e independientemente. Deben llevarse a cabo mediciones in situ para cuantificarla. Se pueden obtener dichas tasas de consumo de oxígeno si se llevan a cabo mediciones continuas durante un cierto periodo de tiempo.

El mezclado vertical es generalmente causado por la acción del viento sobre la superficie a través de la cual la turbulencia es transmitida a las capas inferiores por la acción de los

esfuerzos cortantes. La magnitud de este mezclado vertical es controlado por el grado de estratificación en el cuerpo de agua. Así en las capas superiores es mayor que en las capas inferiores a la termoclina. Cuando existe una inestabilidad térmica se presenta un mezclado por convección debido al enfriamiento de las capas superiores que, aunado al mezclado por viento producen una homogenización de las concentraciones del oxígeno disuelto y de la temperatura.

El siguiente modelo está basado en una formulación semejante a la del programa Minlake (Riley 1988), modificado en su cálculo del efecto fotosintético para tomar en cuenta las variaciones horarias de la intensidad lumínica. En donde S es un término fuente o sumidero que involucra todas las reacciones fisicoquímicas que se presentan para el oxígeno disuelto.

$$S = P - R - S_{SOD} - S_{DBO} + F_S - S_N$$

donde, P es la producción fotosintética de oxígeno, R la respiración de oxígeno por las algas, S_{SOD} es la demanda de oxígeno por los sedimentos, S_{DBO} es la demanda bioquímica de oxígeno, F_S es el intercambio de oxígeno con la atmósfera y S_N es el término de la demanda de oxígeno por nitrificación. La estimación de la producción fotosintética es una componente fundamental en el desarrollo de modelos matemáticos para estimar el oxígeno disuelto, carbono orgánico y la dinámica del fitoplancton. La producción fotosintética es regulada por la curva fotosíntesis-luz. Para la estimación de la producción de oxígeno por fotosíntesis:

$$P = P_{\text{máx}} f(I) \text{ Chl-a} \quad (1.1)$$

donde Chl-a es la concentración de clorofila-a, $f(I)$ es un factor de limitación de luz el cual es variable tanto en el tiempo como en el espacio y la máxima producción específica de oxígeno por fotosíntesis:

$$P_{\text{máx}} = 9.6 * 1.036^{(T-20)} \quad (1.2)$$

T es la temperatura en °C.

Para la limitación por efecto de la luz a través de la columna de agua, se puede usar una que toma en cuenta la variación en la profundidad como en el tiempo:

$$f(I) = \frac{e}{k_d z} \left[\exp \left\{ -\frac{I_t}{I_s} \exp(-k_d [H_s + z]) \right\} - \exp \left\{ -\frac{I_t}{I_s} \exp(-k_d [H_s]) \right\} \right] \quad (1.3)$$

donde $e = 2.7183$, k_d es el coeficiente de extinción o atenuación, z es la profundidad, H_s la distancia desde la superficie hasta la parte superior de la capa, I_s es la intensidad de radiación solar óptima e I_t es la radiación solar al tiempo t:

$$I_t = I_a \left(\frac{24}{t_d - t_u} \right) \frac{\pi}{2} \text{sen} \left(\pi \frac{t - t_u}{t_d - t_u} \right) \quad \text{sí } t_u < t < t_d \quad (1.4)$$

$$I_t = 0 \quad \text{sí } t < t_u \text{ o } t > t_d$$

I_a es la radiación solar total diaria, t_u y t_d son los tiempos (en horas) de salida y puesta del sol, respectivamente.

La respiración es el proceso contrario al de la fotosíntesis y contribuye a la reducción de la biomasa de las algas. La tasa de respiración a la cual las algas oxidan el carbono orgánico para producir CO_2 se expresa en función de la temperatura y de la clorofila-a:

$$R = \frac{1}{Y_{\text{CHO}_2}} k_r \theta^{T-20} \text{Chla} \quad (1.5)$$

donde Y_{CHO_2} es la relación de clorofila-a al oxígeno utilizado en la respiración, k_r es la tasa de respiración, θ es el coeficiente de ajuste por temperatura T .

La demanda bioquímica de oxígeno incluye tanto a la demanda de oxígeno por carbono como a la demanda bioquímica por nitrógeno, es decir aquella demanda de oxígeno para que se produzcan las reacciones del ciclo del nitrógeno, que hasta este momento no han sido modeladas:

$$S_{\text{DBO}} = k_b \theta_b^{T-20} \text{DBO} \quad (1.6)$$

donde k_b es la tasa de decaimiento de primer orden, θ_b es el coeficiente de ajuste por temperatura y DBO es la demanda bioquímica de oxígeno. La absorción de oxígeno por los sedimentos depende del área en contacto con el lecho y es conocida como demanda de oxígeno de los sedimentos:

$$S_{\text{SOD}} = \frac{S_b}{z_f} \quad (1.7)$$

donde z_f es el espesor de la capa inferior del lago y S_b es el coeficiente de demanda de oxígeno sedimentaria:

$$S_b = 0.00935 T^{1.74} (\text{g O}_2 \text{ m}^{-2} \text{ día}^{-1}) \quad (1.8)$$

Corrección por temperatura del coeficiente de demanda de oxígeno por los sedimentos:

$$S_b = S_{b20} \theta_s^{T-20} \quad (1.9)$$

donde S_{b20} es el valor de S_b a 20°C y es θ_s un coeficiente de ajuste por temperatura. El intercambio con la atmósfera conocida como re-aireación superficial:

$$F_s = \frac{k_e}{z_s} (C_{SAT} - C) \quad (1.10)$$

donde z_s es el espesor de la capa superior del lago, k_e es el coeficiente de re-aireación calculado con la relación de Banks para re-aireación de lagos (Bowie 1985), C_{SAT} es la concentración de saturación de oxígeno disuelto y C la concentración de oxígeno existente. La concentración de saturación puede ser calculada con la ecuación de Benson y Krause (Bowie, et. a/1985) modificada:

$$C_{SAT} = -139.3411 - \frac{1.575701^5}{T} - \frac{6.642308^7}{S T^2} - \frac{1.2438^{10}}{T^3} - \frac{8.621949^{11}}{T^4} - \frac{1.80655 (3.1929^{-2} - \frac{19.428}{T} + \frac{3.8673^3}{T^2})}{T} \quad (1.11)$$

donde S es la salinidad y T la temperatura.

La transformación de formas reducidas de nitrógeno a otras más oxidadas consume oxígeno, este fenómeno es conocido como nitrificación. Para determinar la demanda bioquímica por nitrificación S_N necesita de la modelación del ciclo del nitrógeno, debido a que es un modelo muy complejo este valor se considera nulo.

Finalmente la ecuación del transporte de oxígeno disuelto (OD) en la vertical queda de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + W \frac{\partial C}{\partial z} \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_h \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_t \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_v \frac{\partial C}{\partial z} \right) \pm \frac{1}{Y_{CH_2O_2}} k_r \theta^{T-20} Chla \\ - P_{\max} f(I) Chla + k_b \theta_b^{T-20} DBO + \frac{S_b}{z_f} - \frac{k_e}{z_s} (C_{SAT} - C) = 0 \end{aligned} \quad (1.12)$$

1.4 MODELACIÓN DEL FOSFORO

Contrario a las numerosas formas de nitrógeno en ecosistemas acuáticos, la única forma significativa de fósforo inorgánico es el ortofosfato (PO_4^{-3}). Una proporción elevada (>90%) del fósforo en lagos está unida a materia orgánica formando fosfatos orgánicos y constituyentes celulares en la materia particulada viva del seston o asociado en varias formas a materiales inorgánicos y materia orgánica particulada muerta.

El fósforo inorgánico y orgánico ha sido separado en varias formas o fracciones. Dichas fracciones no guardan relación con el metabolismo del fósforo. La fracción más importante, a la luz de las actividades metabólicas que se producen en un lago, es el contenido de fósforo total en agua no filtrada, que consiste en el fósforo

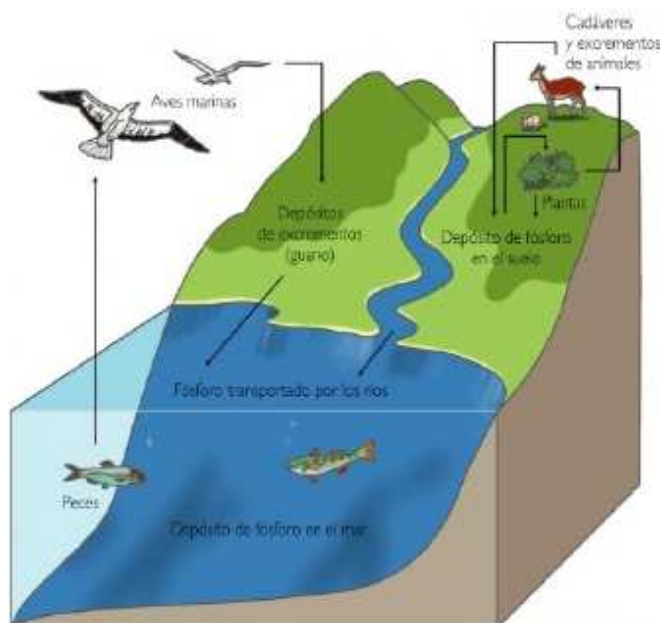


Figura 1.5 Ciclo del Fósforo.

en suspensión en materia particulada y el fósforo en forma disuelta. Ambas fracciones se subdividen, a su vez, en varias fracciones:

I - Fósforo particulado

1. Fósforo en organismos
 - a. ácidos nucleicos (ADN y ARN) - éstos no están envueltos en un reciclaje rápido de fósforo.
 - b. fosfo - proteínas
 - c. nucleótidos fosfatados - ADP y ATP ligados a los procesos de respiración y asimilación de CO_2 .
2. Fase mineral de rocas y suelos
 - a. Apatita $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3^+ \text{X}^-$ (ej. Hidroxy Apatita y Fluoro Apatita, esta última es la principal fuente mineral en material ígneo). Estas representan fases mixtas, en la cual el fósforo se absorbe a complejos inorgánicos, tales como:

- (i). arcillas
- (ii). carbonatos
- (iii). hidróxidos férricos

3. Fósforo absorbido a materia orgánica particulada muerta o asociaciones macroorgánicas

II - Fósforo inorgánico disuelto

1. Ortofosfato
2. Polifosfatos - principalmente originados de detergentes sintéticos
3. Coloides orgánicos o fósforo combinado a coloides adsorbidos

1.4.1 Análisis Químico

Los análisis químicos están centrados alrededor de la reactividad del fósforo en el molibdato y los cambios en reactividad de las formas complejas de fósforo, durante hidrólisis enzimática y acídica, según éstas son convertidas a ortofosfato.

Análisis químicos detallados reconocen ocho formas de fósforo, cada una de las cuales se diferencian a base de reactividad con molibdato, facilidad de hidrólisis y tamaño de las partículas. No obstante, hoy día se han establecido cuatro categorías operacionales para simplificar el análisis del fósforo. Las categorías son las siguientes:

1. Fósforo soluble reactivo
2. Fósforo soluble no-reactivo
3. Fósforo particulado reactivo
4. Fósforo particulado no-reactivo

Estas categorías no necesariamente corresponden a las especies químicas de compuestos de fosfato o a su rol en el reciclaje biótico de fósforo. De hecho, la mayoría de los datos publicados sobre concentraciones de fósforo en aguas frescas es reportada como: fósforo-total y como fósforo inorgánico soluble (orto-fosfatos).

En algunos estudios más sofisticados se presentan los datos de fósforo en términos de otras cuatro categorías:

1. Fósforo soluble
2. Fósforo suspendido soluble en ácido (sestónico) [ej. fosfato férrico, fosfato de

calcio].

3. Fósforo orgánico soluble y fósforo coloidal
4. Fósforo orgánico suspendido (sestónico)

1.4.1.1 Concentración de fósforo total en aguas naturales

Los niveles de fósforo total en cuerpos de agua naturales han sido utilizados para caracterizar el grado de contaminación de dichos hábitats. Los siguientes rangos han sido utilizados con dicho fin:

1. Aguas no contaminadas → $1 \text{ g/L} > 200 \text{ g/L}$ (en lagos salinos)
2. Aguas superficiales no contaminadas → 10 - 50 g P/L (la variación es grande dependiendo de la estructura geoquímica de la región)

Los niveles de fósforo son generalmente menores en regiones montañosas de geomorfología cristalina. La concentración de fósforo aumenta en tierras bajas derivadas de depósitos rocosos sedimentarios. Lagos ricos en materia orgánica, tales como pantanos y ciénagas tienden a exhibir concentraciones de fósforo más altas.

1.4.1.2 Fósforo y productividad

Estudios detallados de la productividad de lagos y su relación con fósforo y nitrógeno (Vollenweider, 1968), han demostrado, por varios criterios, que la cantidad de fósforo total aumenta en productividad del lago. Aunque hay sus excepciones, esto demuestra un principio general que es útil cuando se aplica a estudios de eutroficación.

Tabla 1.4 Nivel de productividad del fósforo.

NIVEL DE PRODUCTIVIDAD	FOSFORO TOTAL ($\mu\text{g/L}$)
ULTRA - OLIGOTROFICO	< 5
OLIGO - MESOTROFICO	5 - 10
MESO - EUTROFICO	10 - 30
EUTROFICO	30 - 100
HIPER - EUTROFICO	> 100

* Datos tomados de Wetzel (1992).

1.4.2 Fósforo orgánico

La separación del fósforo total en fracciones inorgánica y orgánica en un gran número de

lagos, indica que la mayoría del fósforo total está en la fase orgánica. El fósforo orgánico total se encuentra distribuido de la siguiente forma:

- 70% - dentro de material orgánico particulado (sestónico)
- 30% - fósforo disuelto y fósforo orgánico coloidal

La razón de fósforo inorgánico soluble a otras formas de fósforo es de 1:20 (<5%). El porcentaje de fósforo total en forma de ortofosfato es considerablemente bajo (< 5%) en la mayoría de los cuerpos de agua naturales.

1.4.3 Fosforo Inorgánico

La disponibilidad de las formas inorgánicas de fósforo para sostener la productividad en orden descendente es la siguiente: ortofosfato > pirofosfato > trifosfato > aniones polifosfatos mayores. Estas formas químicas del fósforo forman complejos quelados y sales insolubles cuando se asocian con iones de metales. El grado de formación de los quelados mencionados en cuerpos de aguas naturales dependerán del: pH y de la presencia de otros ligandos (SO₄, carbohidratos, fluoruro, especies orgánicas).

1.4.3.1 Efecto de metales en la distribución del fósforo

Dado que la concentración de ortofosfatos [PO₄³⁻] es usualmente baja, la formación de complejos con cationes mayores tendrá poco efecto en la distribución de iones de metales, pero sí tiene un efecto marcado en la distribución de fosfato. Iones de metales tales como: Fe³⁺, Mn, Zn⁺, Cu²⁺, Ca⁺; están presentes en concentraciones comparables o más bajas que las concentraciones de fosfatos inorgánicos. Para dichos iones la formación de complejos puede afectar significativamente la distribución del ión metálico, la distribución de fosfato o ambos. La solubilidad de complejos como el de FePO₄ es mínima a pH 6, pero aumenta a medida que el pH aumenta. La concentración de calcio afecta la formación de hidroxyapatita Ca₅(PO₄)₃⁺. La tabla 5 presenta el efecto de aumentos en la concentración de calcio en la solubilidad del fósforo.

Tabla 1.5 Efecto del pH en la solubilidad del fósforo.

Concentración de calcio (mg/L)	Efecto en la solubilidad de fósforo a pH 7
40	Se reduce solubilidad de fósforo a 10 µg/L
100	Se reduce la solubilidad de fósforo a 1 µg/L

La elevación del pH en aguas conteniendo concentraciones típicas de calcio conduce a la formación de apatita. Al mismo tiempo el aumento en el pH promueve la formación de carbonato de calcio, el cual co-precipita el fosfato con el carbonato.

1.4.3.2 Efecto de absorción a material arcilloso en la disponibilidad del fósforo

Es bien conocida la absorción de fosfatos y polifosfatos a superficies inanimadas, particularmente a mineral arcillosos mediante ligamiento de los aniones a zonas cargadas positivamente en la arcilla y la sustitución de fosfatos por silicatos presentes en la estructura arcillosa. En general se observa que una alta absorción a arcillas ("clays") es favorecida por pH bajos (pH 5-6).

1.4.3.3 Efecto de oxígeno en la solubilidad del fósforo

En lagos oligotróficos con curvas de oxígeno ortogrado (no hay cambios con la profundidad) se observa poca variación en el contenido de fósforo a lo largo del perfil de profundidad. Los metales oxidados, tales como el hierro y los cationes mayores, particularmente calcio, pueden inducir la precipitación de fósforo. Los lagos que exhiben una curva de oxígeno clinogrado durante los períodos de estratificación, demuestran una mayor variabilidad vertical en la distribución de fósforo.

Las observaciones comunes demuestran un marcado incremento en el contenido de fósforo en el hipolimnio bajo, especialmente durante las fases tardías de estratificación termal.

Mucho del aumento hipolimnético es en fósforo soluble cerca de los sedimentos. El fósforo sestónico es altamente variable con la profundidad. El fósforo sestónico en el hipolimnio fluctúa ampliamente con oscilaciones en poblaciones de plancton mientras que en el metalimnio e hipolimnio varía con :

1. Sedimentación de plancton
2. Razón de descomposición por profundidad
3. Densidad de bacterias y otro tipo de plancton en la profundidad

1.4.4 Fósforo en el Sedimento

El intercambio de fósforo entre sedimentos y la columna de agua es el componente mayor del ciclo de fósforo en cuerpos de agua naturales. Hay poca correlación entre la cantidad de fósforo en los sedimentos y la productividad de la columna de agua. Son de importancia en el intercambio los siguientes factores físicos, químicos y metabólicos.

1. Capacidad de los sedimentos para retener fósforo
2. Condiciones particulares de la columna de agua
3. Biota de los sedimentos

Estos factores alteran el equilibrio de intercambio y el transporte de fósforo de vuelta a los sedimentos. Es importante el establecimiento de una microzona oxidada para los intercambios químicos, especialmente de fósforo en los sedimentos. El factor crítico es la ausencia de oxígeno y la capacidad del sedimento para retener el fósforo. Sedimentos calcáreos (ricos en CaCO_3) tienen menor capacidad para absorber fósforo inorgánico y fósforo total que los sedimentos no calcáreos. Ello implica que la absorción a CaCO_3 es menos importante que la formación de complejos de hierro - fósforo.

La razón de intercambio de absorción a liberación de los sedimentos a aguas intersticiales, puede ser tan rápido como unos pocos minutos. La razón de transferencia depende del estado de oxidación de la microzona.

En el caso del fósforo, la variable de estado que se debe de considerar es la inorgánica disuelta (ortofosfatos PO_4^{3-}) ya que es la forma en que el fitoplancton lo consume; todos los modelos que incluyen fitoplancton cuentan con la simulación de fósforo con esta variable de estado, existen modelos cuyo sistemas de ecuaciones se reduce a esta sola variable, incluyendo en su formulación términos de los demás procesos involucrados y simplificando el manejo a una sola ecuación.

Riley y Stefan (1988) presentan un modelo con formulaciones para fósforo reactivo soluble (forma inorgánica disuelta) y modela indirectamente fósforo orgánico como detrito. La formulación maneja estequiometría variable para la dinámica de nutrientes, con tres diferentes grupos de algas, esto hace al modelo complicado en el sentido que son más las constantes que maneja y más específicas con lo que sería más difícil contar con estos datos obtenidos de campo.

Pastres et al. (1994), utilizan un modelo para la laguna de Venecia con formulación para una sola variable de estado, obviamente el fósforo inorgánico disuelto; sería ideal el uso de este modelo si consideramos la simplicidad en la formulación, pero ésta se desarrolla en función del fitoplancton y zooplancton, que aunque se tienen jerarquizados como procesos importantes en el desarrollo del modelo, falta aún la inclusión de su formulación en una primera etapa. Una vez que se tenga el modelo de fitoplancton y zooplancton, la integración de esta formulación pudiese integrarse, depende de la información con que se cuente, el que se pueda hacer uso de un modelo más o menos sofisticado o cuyas formulaciones

están con base en las de modelos en desarrollo como sería el caso de fitoplancton y zooplancton.

Solidoro et al. (1995), desarrollaron un modelo de calidad del agua también para la laguna de Venecia, utilizando un modelo de fósforo definido por una sola variable de estado para este nutriente, sin embargo, la formulación del modelo de calidad del agua desarrollado es más compleja ya que incluye fitoplancton y un grupo específico de algas (ulva), zooplancton, nitrógeno en varias formas incluyendo en los sedimentos y detritos, OD y fosfatos. Al igual que el caso anterior, este modelo de fosfatos depende de las formulaciones del fitoplancton y zooplancton, además de las de detritos y sedimentos, por lo que la aplicación, además que requiere mayor información y más específica, es más compleja.

El modelo de Shanahan y Harleman (1982) maneja tres diferentes variables de estado para el fósforo: en el fitoplancton, detrito y fósforo inorgánico disuelto, el modelo, aunque con tres variables de estado que implica que la formulación sea más compleja, no está desarrollada en base a formulaciones de fitoplancton y/o zooplancton; aunque una variable de estado sea fósforo en el fitoplancton, esta se presenta explícitamente con las ecuaciones de crecimiento. La formulación de este modelo se presenta a continuación.

Tabla 1.6 Variable de estado para el Fósforo en sedimentos

Fósforo del Fitoplancton	
$\frac{dP_1}{dt} = R_{41} \left(\frac{P_2 P_1}{K_4 + P_2} \right) - R_{13} P_1$	
Haciendo:	
$A_1 = R_{41}, \quad B_1 = \left(\frac{P_2 P_1}{K_4 + P_2} \right), \quad C_1 = R_{13} P_1$	
$A_1 = R_{41, \text{máx}} * \left\{ \frac{e}{k_e h} \left[\exp \left\{ -\frac{I}{I_s} \exp(-k_e h) \right\} - \exp \left(-\frac{I}{I_s} \right) \right] \right\} *$	$R_{41, \text{máx}}$ = Tasa máxima de crecimiento K_e = Coeficiente de extinción K_o = Coeficiente de extinción natural K_s = Factor de extinción por autosombreado. I = Radiación incidente I_s = Radiación óptima I_{sm}, I_{se} = Coeficientes T = Temperatura T_{cl} = Temperatura crítica T_{op} = Temperatura óptima
$K_e = K_o + K_s (P_1 + P_2)$	
$f_1(T) = \left(\frac{T_{cl} - T}{T_{cl} - T_{op}} \right) \exp \left(1 - \frac{T_{cl} - T}{T_{cl} - T_{op}} \right), \text{ para } T < T_{cl}$	
$f_1(T) = 0, \text{ para } T \geq T_{cl}$	
$I_s = I_{sm} + I_{se} T$	

$B_1 = \left(\frac{P_4 P_1}{K_4 + P_4} \right)$	K_4 = Constante de saturación media P_4 = Fósforo inorgánico disuelto
$C_1 = R_{13,20} \theta_{13}^{(T-20)} P_1$	$R_{13,20}$ = Tasa mortalidad a 20 °C θ_{13} = Factor detemperatura

Tabla 1.7 Variable de estado para el Fósforo Detritus

Fósforo Detritus	$R_{34,20}$ = Tasa de mineralización a 20 °C Θ_{34} = Factor de temperatura V_{s3} = Velocidad de sedimentación de detritus γ_3 = Fracción disuelta de detritus h = Profundidad del agua
$\frac{dP_3}{dt} = R_{13,20} \theta_{13}^{(T-20)} P_1 - R_{34,20} \theta_{34}^{(T-20)} P_3 - \frac{V_{s3}(1-\gamma_3)}{h} P_3$	

Tabla 1.8 Variable de estado para el Fósforo inorgánico disuelto

Fósforo inorgánico disuelto	$R_{4,b}$ = Relación de formación biogénica de limo relacionada a las tasa de crecimiento de algas. $Is_{4,20}$ = Relación de liberación del sedimento a los 20 °C Θ_{s4} = Factor de temperatura R_{4s} = Tasa de absorción/desabsorción de primer orden P_{4eq} = Concentración de equilibrio de fósforo inorgánico disuelto
$\frac{dP_4}{dt} = -R_{41} \frac{P_4 P_1}{K_4 + P_4} + R_{34,20} \theta_{34}^{(T-20)} P_3 - R_{4s} (P_4 - P_{4eq})$ $-R'_{4b} \left(-R_{41} \frac{P_4 P_1}{K_4 + P_4} \right) P_4 + \frac{L_{s4,20} \theta_{s4}^{(T-20)}}{h} P_4$	

Para el cálculo del crecimiento del fitoplancton utiliza, como función para temperatura como factor limitante una curva de temperatura óptima; para calcular el factor limitante por luz se utiliza la función de Steele y para la variación diaria y para el cálculo del factor por nutriente limitante utiliza una formulación de Michaelis-Menten.

1.5 MODELACIÓN DEL NITRÓGENO

1.5.1 Generales

El nitrógeno es un elemento biogénico que encontramos incorporado en moléculas orgánicas que desempeñan funciones vitales en toda las células. Este elemento es un

constituyente básico de aminoácidos, ácidos nucleicos, azúcares aminadas y los polímeros que estas moléculas forman. El nitrógeno existe en la naturaleza en varias formas químicas que presentan diferentes estados de oxidación.

Tabla 1.9. Estados de oxidación de compuestos nitrogenados.

COMPUESTO	ESTADO DE OXIDACION
Nitrógeno orgánico ----- (R-NH ₂)	-3
Amoniaco ----- (NH ₃)	-3
Nitrógeno gaseoso ----- (N ₂)	0
Oxido nitroso ----- (N ₂ O)	+1
Oxido de nitrógeno ----- (NO)	+2
Nitrito ----- (NO ₂ ⁻)	+3
Dióxido de nitrógeno ----- (NO ₂)	+4
Nitrato ----- (NO ₃ ⁻)	+5

* Modificado de Brock y otros (1994).

En términos termodinámicos, el nitrógeno gaseoso (N₂) es la forma más estable del nitrógeno. Las otras formas químicas del nitrógeno revierten a N₂ bajo condiciones de equilibrio. Esto explica el hecho de que el nitrógeno molecular es el principal depósito de nitrógeno para los organismos vivos. No obstante, muy pocos organismos tienen la capacidad para fijar el nitrógeno gaseoso. De hecho, solo un reducido grupo de eubacterias (fototróficas y heterotróficas) y arqueobacterias exhibe dicha capacidad.

El reciclaje del nitrógeno depende entonces de las transformaciones químicas de compuestos nitrogenados más disponibles, a través de reacciones de óxido-reducción. (Figura 6). El conjunto de esas transformaciones integran el ciclo biogeoquímico del nitrógeno (Figura 7).

Los procesos de transformación química que intervienen en el ciclo de nitrógeno son varios: (1) fijación (reducción) de nitrógeno molecular a amoniaco, (2) asimilación de amoniaco, (3) nitrificación, (4) reducción disimilativa de nitrato (denitrificación), (5) reducción asimilativa de nitrato y (6) amonificación.

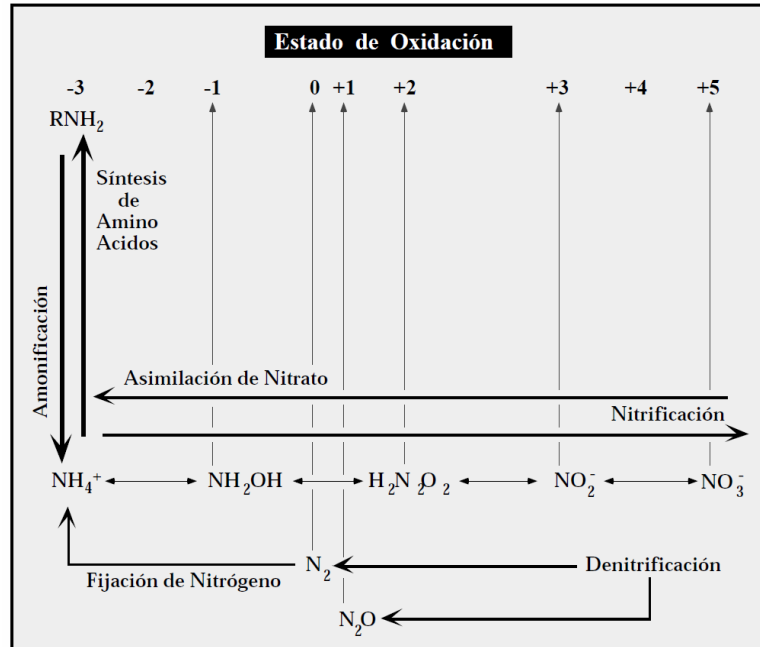


Figura 1.6. Reacciones bioquímicas que regulan la distribución de compuestos

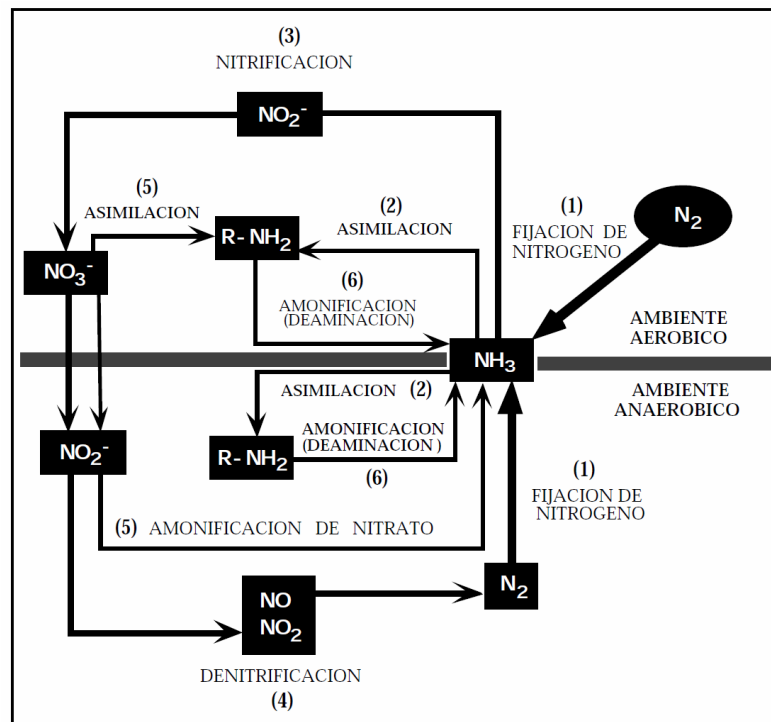


Figura 1.7 Ciclo REDOX del nitrógeno

La fijación del nitrógeno puede ser resumida utilizando las siguientes reacciones mostradas en la siguiente figura:

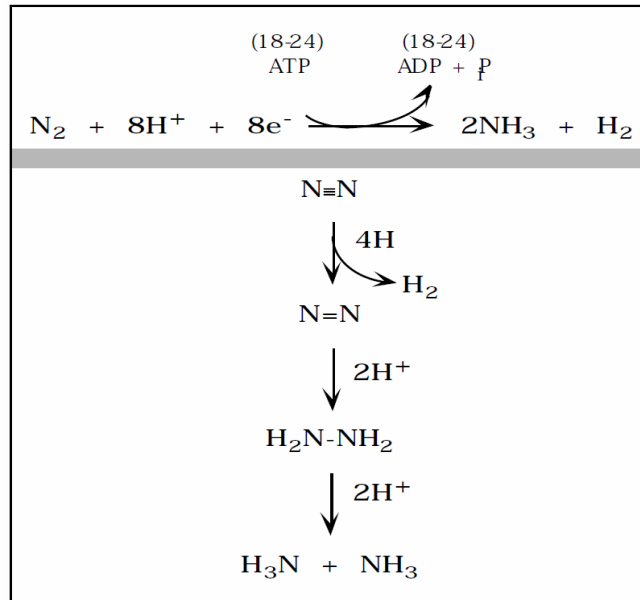


Figura 1.8 Ciclo de fijación del nitrógeno

Este proceso demanda una gran inversión de energía (18 - 24 ATP), dada la estabilidad del triple enlace $\text{N}\equiv\text{N}$, la cual hace del nitrógeno gaseoso una molécula extremadamente inerte. La reducción del nitrógeno molecular a amoníaco es catalizada por un complejo enzimático conocido como nitrogenasa. Este complejo catalítico consiste de dos unidades proteicas diferentes conocidas como: dinitrogenasa y reductasa de denitrogenasa.

1.5.1.1 Microorganismos que fijan nitrógeno molecular

La reducción biológica de nitrógeno molecular es llevada a cabo únicamente por microorganismos procariontes. Entre las bacterias, la actividad de fijación de nitrógeno se encuentra distribuida entre eubacterias y arqueobacterias y entre heterótrofos y autótrofos (Tabla 8).

1.5.1.2 Factores que afectan la actividad de la nitrogenasa

EL complejo de la nitrogenasa es inactivado por el oxígeno de forma irreversible. Los microorganismos que fijan nitrógeno en ambientes aeróbicos han desarrollado diferentes adaptaciones metabólicas y estructurales para poder llevar a cabo la fijación de nitrógeno en un ambiente oxidante.

Tabla 1.10 Lista parcial de microorganismos que fijan nitrógeno.

AEROBIOS Y ANAEROBIOS FACULTATIVOS DE VIDA LIBRE		
Quimioorganotrofos	Fototrofos	Quimiolitotrofos
Eubacterias: <i>Azotobacter spp.</i> <i>Klebsiella</i> <i>Beijerinckya</i> <i>Bacillus polymixa</i> <i>Mycobacterium flavum</i> <i>Azospirillum lipoferum</i> <i>Citrobacter freundii</i> Methylotrofos ** <i>Azomonas</i> <i>Derxia</i> <i>Chromobacterium</i>	Cyanobacterias: <i>Anabaena</i> <i>Nostoc</i> <i>Synechococcus</i> <i>Gloecapsa</i> <i>Dermocarpa</i> <i>Xenococcus</i> <i>Myxosrcina</i> <i>Pleurocapsa</i> <i>Oscillatoria</i> <i>Calothrix</i> <i>Microcoleus</i> <i>Nodularia</i> <i>Phormidium</i> <i>Prochlorales</i>	Eubacterias: <i>Alcaligenes</i> <i>Thiobacillus**</i>
ANAEROBIOS DE VIDA LIBRE		
Quimioorganotrofos	Fototrofos	Quimiolitotrofos
Eubacterias: <i>Clostridium spp.</i> <i>Desulfovibrio</i> <i>Desulfotomaculum</i>	Eubacterias: <i>Chromatium</i> <i>Chlorobium</i> <i>Rhodospirillum</i> <i>Rhodopseudomonas</i> <i>Rhodomicrobium</i> <i>Rhodopila</i> <i>Rhodobacter</i> <i>Heliobacterium</i> <i>Heliobacillus</i> <i>Thiocapsa</i>	Arqueobacterias: <i>Metanosarcina</i> <i>Metanococcus</i>
SIMBIOTES EN:		
Plantas Leguminosas	Plantas No-Leguminosas	
Eubacterias: <i>Rhizobium</i> <i>Bradyrhizobium</i>	Cianobacterias: * <i>Anabaena</i> <i>Nostoc</i>	Eubacterias: <i>Frankia</i> (Actinomiceto)

* Incluye otras cianobacterias; ** Llevado a cabo solo por algunas especies

Datos tomados de Brock y otros (1994); Atlas (1988); Atlas y Bartha (1992); Capone (1988).

Estos microorganismos aeróbicos protegen la nitrogenasa mediante: (1) la remoción de oxígeno por el proceso de respiración (ej. en *Azotobacter* y *Klebsiella*, se observan cadenas de transporte abreviadas que rinden menos ATP por molécula de sustrato oxidado, generándose un aumento en el consumo de oxígeno por molécula de sustrato oxidado; o mediante asociación sinérgica con bacterias heterotróficas aerobias, como es el caso de la relación entre *Anabaena* y *Pseudomonas aeruginosa*); (2) la producción de capas limosas

("slime layers") que retardan la difusión de oxígeno a través de la membrana plasmática y (3) la localización de la nitrogenasa en células especializadas (ej. desarrollo de heteroquistes en cianobacterias). Refiérase a Brock et al, 1994 y a Atlas y Bartha, 1992, para una descripción más detallada de dichas adaptaciones y del mecanismo molecular que rige el proceso de fijación de nitrógeno.

La actividad del complejo de la nitrogenasa es también inhibida por la presencia de formas reducidas de nitrógeno en el ambiente. La presencia de altas concentraciones de amoníaco, nitrato, urea y ciertos aminoácidos inhiben la actividad de la nitrogenasa. El grado de inhibición que causan los últimos tres depende de la facilidad con que un organismo en particular pueda convertirlos a amoníaco.

1.5.1.3 Fijación abiótica del nitrógeno gaseoso

La mayor parte de la fijación del nitrógeno molecular es de naturaleza biológica. No obstante, en la atmósfera también se lleva a cabo la fijación abiótica del nitrógeno molecular mediante electrificación y reducción fotoquímica. A diferencia de la fijación de origen biológico, donde el amoníaco es el producto principal, en la fijación fotoquímica el nitrato es el producto principal. En este tipo de fijación de alta energía el nitrógeno y el oxígeno se combinan en la atmósfera para formar nitrato. Este último es arrastrado por la lluvia a la superficie terrestre y a los cuerpos acuáticos en forma de ácido nítrico (H_2NO_3). El aporte de la fijación abiótica de nitrógeno gaseoso a los depósitos de nitrógeno en agua y suelos, se ha estimado en 8.9 Kg N/ha/año, comparado con los 100 a 200 Kg N/ha/año que se derivan de la fijación biológica de nitrógeno.

1.5.2 Asimilación De Amoníaco

La asimilación del amoníaco al protoplasma celular es mediada por varias enzimas (Figura 9). Una de las enzimas más utilizada en la asimilación del amoníaco es la dehidrogenasa de ácido glutámico. Esta enzima cataliza la incorporación reductiva de amoníaco al ácido acetoglutarico para formar ácido glutámico. El grupo amino que presenta el ácido glutámico puede ser transferido a otras moléculas orgánicas mediante transaminasas. De esta forma se originan otros aminoácidos, purinas y pirimidinas. La asimilación de amoníaco a moléculas orgánicas puede ser mediada por otras dehidrogenasas de aminoácidos y por la sintetasa de glutamina. Esta última cataliza la adición de amoníaco al ácido glutámico para formar glutamina.

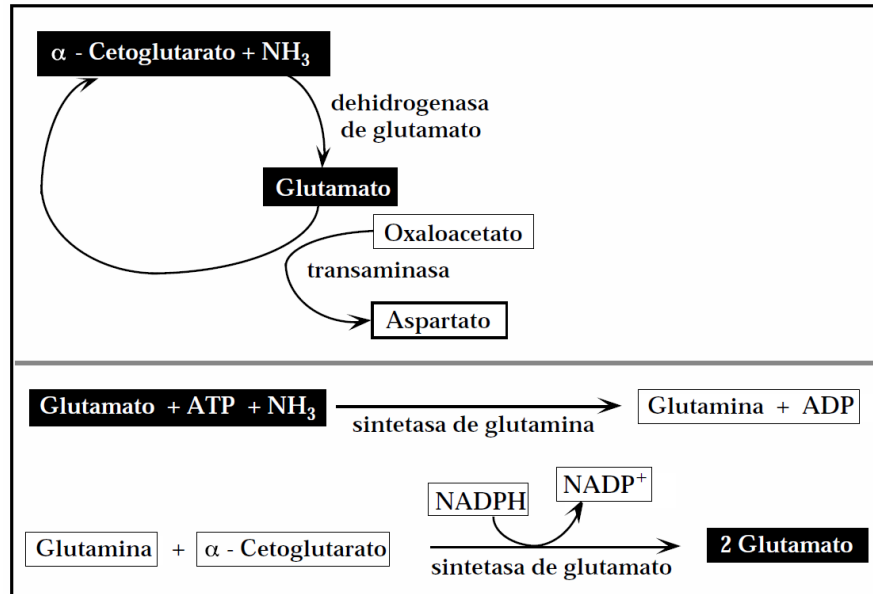


Figura 1.9 Reacciones de asimilación de amoníaco.

En una reacción subsiguiente, la enzima sintetasa de ácido glutámico cataliza la transferencia del grupo amida de la glutamina al ácido acetoglutarico, formándose dos moléculas de ácido glutámico.

1.5.3 Nitrificación

El proceso de nitrificación consiste en la oxidación de amoníaco bajo condiciones estrictamente aeróbicas. En ambientes con un potencial redox alto, el amoníaco puede ser oxidado a óxidos de nitrógeno y a nitrato. No obstante, siendo el amoníaco un compuesto estable, se requieren agentes oxidantes fuertes o agentes catalíticos para que se pueda efectuar su oxidación. En la naturaleza contamos con un grupo de bacterias aerobias estrictas que poseen los agentes catalíticos (ej. enzimas) apropiados para efectuar dicha reacción de oxidación. Estas bacterias se conocen con el nombre de bacterias nitrificantes. La oxidación de amoníaco por estas bacterias se observa en suelos con buen drenaje, a un pH neutral o en cuerpos de agua con un alto contenido de oxígeno disuelto y un pH neutral. Las condiciones de anoxia o una alta acidez inhiben la actividad catalítica de estas bacterias. El proceso de nitrificación ocurre en dos etapas; comienza con la oxidación del amoníaco a nitritos, seguido de la oxidación del nitrito a nitrato. En cada una de estas etapas intervienen diferentes poblaciones de bacterias quimiolitotróficas (Figura 10). La oxidación de amoníaco (NH_3) a nitrito (NO_2^-) es mediada principalmente por bacterias del género *Nitrosomonas*, mientras que en la oxidación de nitrito (NO_2^-) a nitrato (NO_3^-)

intervienen frecuentemente bacterias el género *Nitrobacter*. No se conoce hasta el presente de ninguna bacteria quimiolitotrófica que puede oxidar el amoníaco directamente a nitrato. Aunque existen algunas bacterias quimioorganotróficas y algunos hongos que pueden oxidar el amoníaco directamente a nitrato, la magnitud de dicha actividad se considera de escasa importancia ecológica.

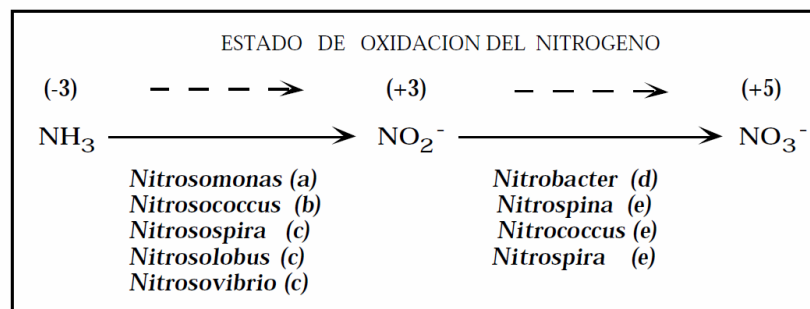
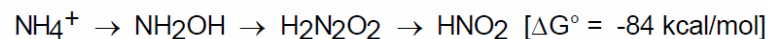


Figura 1.10 Proceso de nitrificación

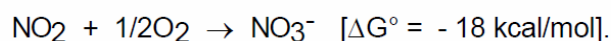
Hábitat natural de bacterias nitrificantes: (a) suelo, alcantarillado, agua dulce, ambiente marino (b) agua dulce, ambiente marino, (c) suelo, (d) suelo, agua dulce, ambiente marino, (e) ambiente marino.

La fase inicial de la nitrificación envuelve los siguientes eventos de oxidación:



donde los productos intermediarios son oxidados rápidamente, encontrándose en muy bajas concentraciones en ambientes naturales. La energía liberada durante esta fase del proceso de nitrificación es utilizada por *Nitrosomonas* y otras bacterias quimiolitotróficas (Figura 10) para la reducción de CO_2 a través el ciclo Calvin-Benson. Estas bacterias son mesofílicas, con una tolerancia amplia a variaciones en temperatura (1 - 37°C) y crecen óptimamente a un pH cercano a la neutralidad.

La segunda etapa del proceso de nitrificación conlleva la oxidación directa del nitrito a nitrato:



En esta etapa se genera menos energía en comparación con la primera etapa. Bacterias quimiolitotróficas del género *Nitrobacter* y otros tres géneros bacterianos (Figura 10) son responsables de catalizar esta fase del proceso de nitrificación. Las *Nitrobacter* en particular exhibe una menor tolerancia a bajas temperaturas y a niveles altos de pH, en comparación con bacterias del género *Nitrosomonas*.

1.5.3.1 *Distribución de bacterias nitrificantes*

Las bacterias quimiolitotróficas nitrificantes están distribuidas ampliamente en suelos y cuerpos de agua dulce y salados, aunque sus densidades son por lo general bajas.

Estas alcanzan densidades altas en hábitats que presentan concentraciones altas de amoníaco, en particular en lugares donde se lleva a cabo un proceso de descomposición de proteínas (amonificación) extenso. En cuerpos de agua interiores como lagos, ríos y quebradas que reciben descargas no-tratadas e inclusive aguas tratadas de alcantarillado sanitario, encontramos concentraciones altas de amoníaco que pueden sostener el crecimiento de las bacterias nitrificantes. No obstante, dado que la oxidación biológica de amoníaco requiere de oxígeno, observamos que el amoníaco tiende a acumularse en hábitats anaerobios, incluyendo el hipolimnio de cuerpos de agua estratificados. En lagos estratificados, las bacterias nitrificantes se pueden desarrollar bien en la región del termocline donde convergen amoníaco y oxígeno.

1.5.3.2 *Factores abióticos que afectan el proceso de nitrificación*

Oxígeno

Si bien es correcto que el proceso de nitrificación es muy limitado o no existente en sedimentos anóxicos, es también correcto que no se requieren altas concentraciones de oxígeno disuelto para que se lleve a cabo el proceso. El proceso de nitrificación se puede registrar en ambientes acuáticos naturales con concentraciones de oxígeno disuelto mayores de 0.3 mg/L. Por debajo de esa concentración, la razón de difusión del oxígeno a las bacterias no es suficiente para sostener el proceso de nitrificación. Para el tratamiento de aguas de alcantarillado sanitario se recomienda mantener el oxígeno disuelto en valores mínimos de 2 mg/L, lográndose economías significativas en el procesamiento de aguas usadas al reducirse los costos de aereación de la mezcla de lodos.

Materia orgánica disuelta

La presencia de altas concentraciones de materia orgánica disuelta puede inhibir de forma indirecta a las bacterias nitrificantes. Los heterotrofos aerobios y anerobios facultativos al

oxidar la materia orgánica, compiten con las bacterias nitrificantes por el oxígeno disuelto disponible. Los heterótrofos presentan en términos generales una mayor afinidad por el oxígeno que las bacterias nitrificantes [$K_s(O_2)$ heterótrofos $<$ $K_s(O_2)$ bacterias nitrificantes] (Painter, 1977).

Por otro lado, el proceso de nitrificación puede ser también afectado por determinadas sustancias orgánicas disueltas en el agua. Específicamente, Rice y Panchol (1972, 1973), han reportado que las taninas y sus productos de descomposición inhiben la oxidación aeróbica de amoníaco a nitrato. No se ha descifrado aún el mecanismo que explica el efecto inhibitorio de estas sustancias húmicas sobre la nitrificación. No obstante, es común observar que el proceso de nitrificación es limitado en ambientes acuáticos con una alta concentración de material orgánico húmico disuelto y un pH alcalino o neutral.

pH

El proceso de nitrificación es afectado por el pH. Se han reportado diferentes valores de pH óptimo para el proceso de nitrificación; no obstante, se observa una tendencia marcada a que según disminuye el pH, la razón de nitrificación también disminuye (Shammas, 1986). Generalmente el pH óptimo para este proceso oscila entre 8 y 9. Los límites de tolerancia mínimo y máximo oscilan entre 5.5 y 6.7 y entre 9.6 y 10.4, respectivamente (Figura 11).

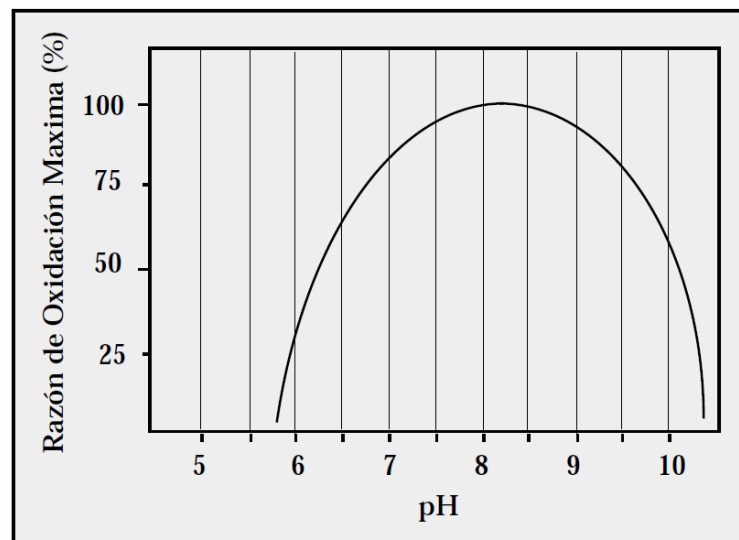


Figura 1.11 Efecto del pH sobre el proceso de nitrificación.

En la literatura se reportan diferentes límites de tolerancia al pH, para el proceso de nitrificación. No obstante, se observa una tendencia marcada a una disminución en la

actividad de nitrificación según disminuye el pH. El proceso de nitrificación es muy reducido en ambientes ácidos ($\text{pH} < 5$) [ej. pantanos ácidos]. La primera fase del proceso de nitrificación (ej. oxidación de amoníaco a nitrito) conduce a la acidificación del ambiente como resultado de la acumulación de ácido nitroso (HNO_2). Este último es reconocido como un agente mutagénico. En plantas de tratamiento de efluentes domésticos es común observar un cese temporal en la nitrificación cuando la mezcla de lodos alcanza valores de $\text{pH} \leq 5$. Mientras mayor es la concentración inicial del amoníaco mayor es la concentración del ácido nitroso producido. En pantanos ácidos, el ácido nitroso generado durante la primera fase de la nitrificación es posteriormente oxidado a nitrato. Este último es probablemente asimilado tan pronto es producido, dando lugar a que generalmente, su concentración sea muy baja.

Metales

Aún cuando metales tales como cobre, mercurio y cromo tienen un efecto inhibitorio sobre cultivos puros de bacterias nitrificantes, dicho efecto se reduce significativamente en escenarios naturales y plantas de tratamientos. Para que un metal genere los mismos niveles inhibitorios reportados para cultivos puros de bacterias nitrificantes, en las poblaciones de bacterias nitrificantes presentes en sistemas de tratamiento de aguas usadas, se requiere aumentar su concentración entre 10 y 100 veces. Por otro lado, se ha reportado que concentraciones no inhibitorias de cobre y mercurio cancelan el efecto de otros inhibidores de la nitrificación, como thiourea y mercaptobenzothiazole (Painter, 1977).

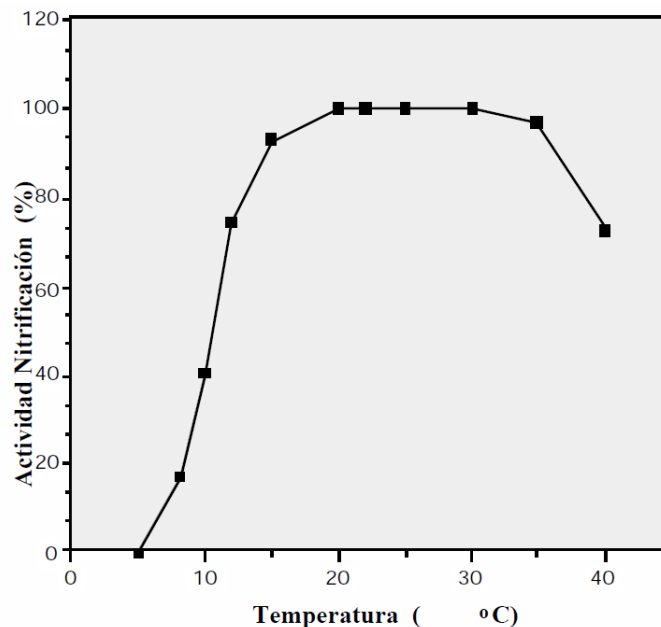
Temperatura

La razón de nitrificación es afectada por la temperatura (Figura 12). La actividad máxima de nitrificación se registra a lo largo de un rango amplio de temperaturas, que por lo general se extiende de 15 a 35°C. Cuando la temperatura desciende de los 15°C, la razón de nitrificación cae abruptamente, reduciéndose a un 50% cuando la temperatura baja a 12°C.

1.5.3.3 Efectos del proceso de nitrificación sobre actividad agrícola

Aún cuando el nitrato es asimilado fácilmente por los productores primarios fototróficos, éste no logra estimular la productividad primaria con igual efectividad que el amoníaco. El nitrato es una molécula muy soluble en agua, que es arrastrada por la lixiviación, en suelos que reciben lluvias fuertes. En consecuencia, la nitrificación no es un proceso beneficioso para la agricultura. Este proceso de oxidación transforma una fuente de nitrógeno de naturaleza catiónica (NH_4^+), que se absorbe fuertemente al material particulado cargado negativamente en arcillas, en una fuente de nitrógeno aniónica (NO_3^-) que es arrastrada fácilmente por escorrentías o que es trasladada a los depósitos de aguas subterráneas. La

transferencia de iones de nitrito y nitrato de suelos superficiales a suministros de aguas subterráneas es un problema crítico por dos razones: (1) representa una pérdida importante de nitrógeno del suelo, donde es necesario para sostener el crecimiento de plantas superiores y (2) la presencia de altas concentraciones de nitrito y nitratos en los suministros de agua potable plantea un serio riesgo para la salud humana. Para reducir la actividad de nitrificación en suelos dedicados a la agricultura, se utiliza con frecuencia amoníaco anhidro (NH_3) como fertilizante nitrogenado, en combinación con inhibidores específicos del proceso de nitrificación (ej. nitrapyrin).



* Datos tomados de Shammas (1986).

Figura 1.12 Efecto de la temperatura sobre la actividad de nitrificación.

1.5.3.4 Efectos del proceso de nitrificación sobre salud humana

La presencia de altas concentraciones de nitrito y nitrato en los depósitos de agua potable (aguas subterráneas, aguas superficiales) plantean un serio problema de salud pública. El nitrito es tóxico para los humanos, dado que se combina con la hemoglobina bloqueando el intercambio normal de gases con oxígeno. En adición los nitritos pueden reaccionar con compuestos aminados para formar nitrosaminas carcinogénicas. Bajo condiciones ácidas el nitrito se convierte en ácido nitroso, el cual es un reconocido agente mutagénico, como se indicó anteriormente.

Aunque el nitrato no es altamente tóxico por sí solo, el mismo puede ser reducido a nitrito por la flora microbiana del tracto gastrointestinal de infantes, causando el síndrome de bebé azul ("blue baby"). La reducción de nitrato a nitrito no se produce normalmente en adultos, dado el bajo pH que se registra en su tracto gastrointestinal.

1.5.4 Denitrificación

La denitrificación es un proceso de respiración anaerobia, donde el nitrato es utilizado como aceptador alternativo de electrones en lugar de oxígeno, reduciéndose a óxido nítrico (NO), óxido nitroso (N_2O) o nitrógeno molecular (N_2) (Figura 13). Dado que estos compuestos nitrogenados son gases poco solubles, los mismos no se incorporan al material celular, sino que escapan a la atmósfera. Este proceso, también conocido como trayecto disimilativo de nitrato, es llevado a cabo exclusivamente por eubacterias. Los siguientes géneros bacterianos contienen especies que demuestran la habilidad de llevar a cabo el proceso de denitrificación: *Bacillus*, *Chromobacterium*, *Micrococcus*, *Pseudomonas*, *Spirillum*, *Hypomicrobium*, *Achromobacter*, *Moraxella*, *Paracoccus*, *Alcaligenes* y *Aquifex*. Este último género corresponde a bacterias hipertermofílicas y quimiolitotróficas obligadas.

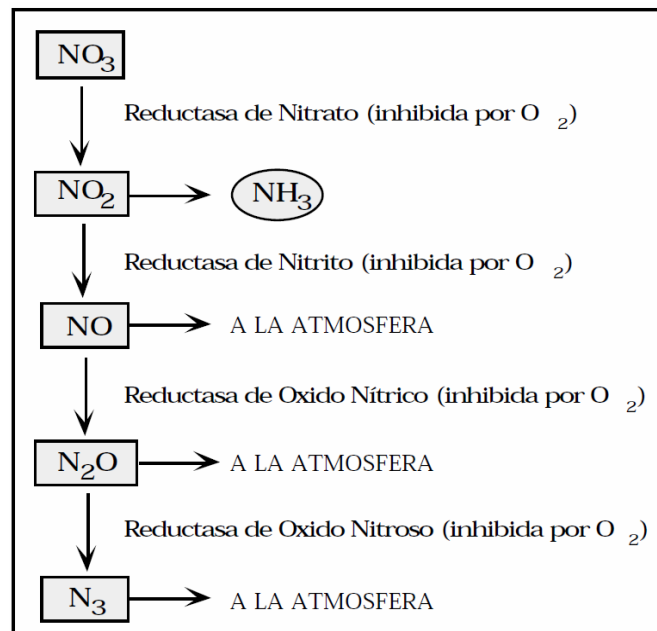


Figura 1.13 Trayecto disimilativo de nitrato (denitrificación).

Hay algunas bacterias (ej. *Clostridium*) que no reducen nitrato, pero que sí pueden reducir nitrito a amoníaco. Este puede representar un mecanismo de detoxificación, dado que el

nitrito puede ser tóxico bajo condiciones ácidas. El retorno del nitrógeno a la atmósfera mediante el proceso de denitrificación completa el ciclo biogeoquímico del nitrógeno. Este proceso acarrea una pérdida de nitrógeno en ambientes naturales, por lo que resulta ser un proceso detrimental para la actividad agrícola. Por otro lado, el proceso de denitrificación es utilizado bajo condiciones controladas en sistemas de tratamiento terciario de aguas usadas, para reducir la concentración de nitrógeno en los efluentes.

1.5.4.1 Factores abióticos que afectan el proceso de denitrificación

Oxígeno

La síntesis de las enzimas que participan en el proceso de denitrificación es reprimida por la presencia de oxígeno. El grado de represión del oxígeno varía de una especie bacteriana a otra y varía con la concentración de oxígeno. La información acumulada hasta el presente indica que el oxígeno no afecta la actividad de las reductasas, sino su síntesis. La aereación de suelos a través de las prácticas de arado y volteo mecánico tienen como una de sus finalidades reducir la actividad de las bacterias denitrificantes, reduciendo así la pérdida de fertilizantes nitrogenados.

pH

El pH del ambiente aparentemente afecta la naturaleza y concentración del producto final en el proceso de denitrificación. En estudios realizados con una flora bacteriana mixta se encontró que la reducción de nitrato a óxido nítrico es más abundante a valores de pH < 7 (Painter, 1977).

Temperatura

El rango de temperaturas a los cuales se produce la denitrificación es amplio, según lo revela el hecho de que se han aislado bacterias psicrófilas, mesófilas y termófilas que llevan a cabo dicho proceso. No obstante, en cada uno de estos grupos observamos que la reducción disimilativa de nitrato opera dentro de un rango definido de temperaturas.

1.5.5 Amonificación

El proceso de amonificación consiste en la generación de amoníaco como producto principal en la descomposición de materia orgánica nitrogenada (ej. proteínas, bases nitrogenadas, urea, etc.). Dicho proceso es llevado a cabo por muchos microorganismos, así como también por plantas y animales. Enzimas conocidas como deaminasas son las responsables de la transferencia del nitrógeno de moléculas orgánicas a otras moléculas orgánicas. La

descomposición de la materia orgánica nitrogenada se produce bajo condiciones aerobias y anaerobias.

1.5.5.1 Efecto de factores abióticos sobre la amonificación

El amoníaco en agua existe principalmente como el ión amonio (NH_4^+) y como hidróxido de amonio (NH_4OH) (Figura 14). Este último es altamente tóxico para muchos organismos, especialmente para los peces. Las proporciones de NH_4^+ a NH_4OH en ambientes acuáticos son determinadas por el efecto que ejercen el pH y la temperatura sobre su razón de disociación. El efecto del pH sobre la disociación del amoníaco (NH_3) en agua está descrito en la Tabla 9.

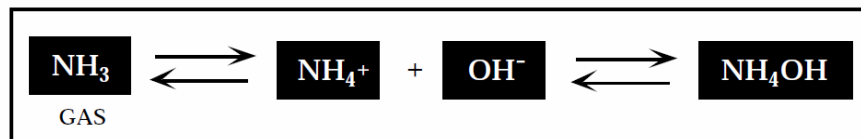


Figura 1.14. Disociación de amoníaco en agua.

El ión amonio se absorbe fuertemente a material particulado y coloidal, especialmente en cuerpos de agua alcalinos, que contienen altas concentraciones de materia orgánica disuelta de naturaleza húmica. Aunque el NH_4^+ constituye una buena fuente de nitrógeno para las plantas, muchas algas y macrófitas localizadas en ambientes eutróficos crecen mucho mejor a expensas de nitrato, aún cuando se requiere que el nitrato sea reducido posteriormente a amoníaco. Esto se debe en gran medida a la toxicidad del NH_4OH producido a pH altos, como son los valores de pH que se observan durante periodos de alta actividad fotosintética en ambientes eutróficos.

Tabla 1.11 Efecto de pH en la disociación del NH_3 en agua.

pH	$[\text{NH}_4^+]$	$[\text{NH}_4\text{OH}]$
6	3000	1
7	300	1
9	30	1
9.5	1	1

1.5.5.2 Distribución del amoníaco en agua y suelos

La distribución del amoníaco en cuerpos de agua dulce puede variar a lo largo del tiempo y espacio, dependiendo de la productividad del cuerpo de agua y la magnitud de los aportes alóctonos (foráneos) de materia orgánica. Aún cuando es difícil establecer generalizaciones absolutas, es común encontrar que los niveles de amoníaco son bajos en cuerpos de agua oligotróficos y en la cima trofógena de la mayor parte de los cuerpos

acuáticos. El amoníaco tiende a aumentar en la zona del hipolimnion de lagos estratificados con la entrada de altas cantidades de materia orgánica. La acumulación del amoníaco en dicha zona se acelera cuando el hipolimnion se torna anóxico. Bajo condiciones anaeróbicas la nitrificación se reduce y puede cesar cuando el potencial redox alcanza valores menores a 0.4 V. Al mismo tiempo, con el desarrollo de condiciones anóxicas desaparece la microzona oxidada en la interfase de agua y sedimentos. Esto ocasiona que la capacidad de absorción de los sedimentos se reduzca significativamente y como resultado se produce una liberación del amoníaco atrapado en los sedimentos.

En suelos, una gran parte del amoníaco (NH_3) producido por la amonificación es reciclado rápidamente y convertido a aminoácidos en las plantas. Dado que el amoníaco (NH_3) es volátil, una parte de éste se puede perder por vaporización (particularmente en suelos que presentan una alta alcalinidad). Dicha pérdida es cuantiosa en áreas donde residen grandes cantidades de animales (ej. hatos de ganado).

1.5.5.3 Amonificación del nitrato (trayecto asimilativo de nitrato)

El nitrato (NO_3^-) es asimilado cuando el mismo es reducido para utilizarse como nutriente. Dicho proceso de reducción es conocido como metabolismo asimilativo. Es importante enfatizar que el metabolismo asimilativo de nitrato es muy diferente al proceso de denitrificación, donde el nitrato es utilizado como aceptador final de electrones en un proceso dirigido a generar energía (respiración anaerobia). Nos referimos al proceso de denitrificación como un trayecto disimilativo, mientras que el proceso de amonificación de nitrato es un trayecto asimilativo. La figura 15 presenta una comparación entre ambos trayectos reductivos de nitrato. A diferencia del proceso de denitrificación, que resulta en la pérdida de nitrógeno de ambientes naturales, la amonificación de nitrato, tiene como producto principal al amoníaco. Este es posteriormente incorporado al material celular mediante las reacciones de asimilación que presentamos en una sección anterior. Las reductasas de nitrato que intervienen en el trayecto asimilativo son proteínas solubles que no son afectadas por el oxígeno, mientras que su contraparte en el trayecto disimilativo son proteínas ligadas a la membrana citoplasmática cuya síntesis es reprimida por oxígeno. El trayecto asimilativo de nitrato es llevado a cabo por plantas, hongos y algunas bacterias, mientras que la denitrificación es un proceso que llevan cabo sólo bacterias. La amonificación de nitrato que se observa en el trayecto disimilativo es llevada a cabo por organismos fermentativos que utilizan los electrones de la coenzima NADH para reducir nitrato en lugar de reducir a un compuesto orgánico, por lo tanto, no es un caso de respiración aerobia.

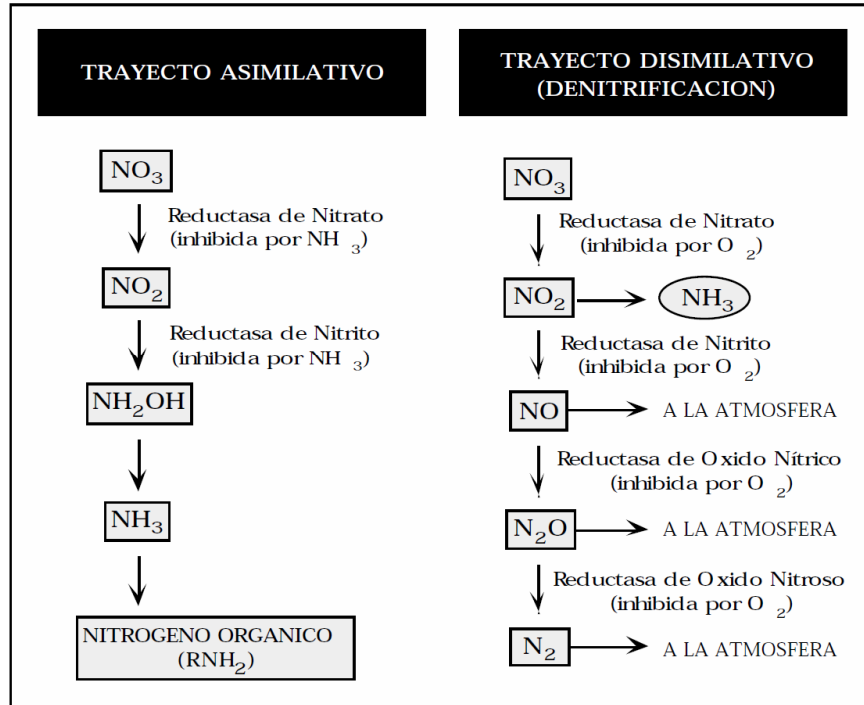


Figura 1.15 Metabolismo de nitrógeno.

1.5.6 Entrada de Nitrógeno a Ambientes Naturales

Generalmente, la entrada de nitrógeno proveniente de fuentes atmosféricas a cuerpos acuáticos ha sido considerada menor a la aportación proveniente de escorrentías terrestres. No obstante, esa percepción ha ido cambiando según se han magnificado los aportes de nitrógeno derivados de la contaminación atmosférica. En algunas corrientes alpinas oligotróficas que transcurren a lo largo de cuencas de granito, una fuente principal del nitrógeno lo son las diferentes formas de precipitación (lluvia, nieve, granizo) que se producen en el área (Likens y Bormann, 1977). La cantidad de nitrógeno que aportan las diferentes formas de precipitación varía con las condiciones meteorológicas, la localización del hábitat con respecto a las fuentes de contaminación industrial y el patrón de vientos imperantes. El nitrógeno puede entrar a un ambiente natural en las siguientes formas: N_2 , HNO_3 , y NH_4^+ disueltos; como NH_4^+ adherido a materia particulada y como materia orgánica disuelta o adherida a materia particulada.

Otras fuentes de entrada del nitrógeno a ambientes naturales lo son la fijación biológica de nitrógeno, la cual discutimos anteriormente, y los aportes provenientes de escorrentías terrestres y aguas subterráneas. Estos últimos cargan el nitrógeno proveniente de fuentes

de contaminación (efluentes industriales y domésticos), fertilizantes nitrogenados y otros compuestos nitrogenados (ej. pesticidas, excremento de animales) que son utilizados o se generan en suelos dedicados a la agricultura y la ganadería.

1.5.7 Pérdida de Nitrógeno en Ambientes Naturales

En adición a la pérdida de nitrógeno que acarrea el proceso de denitrificación, se pueden producir pérdidas de nitrógeno en ambientes naturales como resultado de los procesos de nitrificación y amonificación. En ambientes acuáticos la sedimentación también genera una pérdida de nitrógeno orgánico e inorgánico para las formas de vida que viven en el agua.

1.5.8 Reciclaje de Nitrógeno: Consideraciones Ambientales

1.5.8.1 *Deposición de nitrógeno y liberación de gases del efecto invernadero*

Probablemente antes de la presente era de industrialización existía un balance entre la cantidad de nitrógeno fijado biológicamente y el retorno del nitrógeno molecular mediante el proceso de denitrificación. Dicho escenario cambió dramáticamente una vez que los seres humanos desarrollamos la capacidad de reducir el N_2 industrialmente, utilizando presiones altas (cientos de atmósferas) y temperaturas elevadas ($> 500^\circ\text{C}$). La producción industrial anual de nitrógeno inorgánico reducido (NH_3 y NO_3^-) excede los 50 millones de toneladas, una cantidad extra de sustrato que difícilmente las bacterias denitrificantes pueden metabolizar en el mismo lapso de tiempo. Estudios recientes revelan que muchas áreas de bosque en Europa aparentemente están saturándose de nitrógeno (Sullivan, 1993). Es motivo de preocupación el enriquecimiento nitrógeno en áreas boscosas que al mismo tiempo experimentan cambios climáticos notables, como es el aumento en calentamiento. El reciclaje del nitrógeno en dichas áreas se puede alterar como resultado de un aumento en la actividad de mineralización y nitrificación en suelos que se tornan más cálidos. El aumento en la deposición de nitrógeno tiene como consecuencias:

- (1) un aumento en las emisiones de N_2O provenientes de suelos en áreas boscosas y
- (2) una posible reducción en asimilación de metano (CH_4). Esto genera, a su vez, un aumento en la concentración de gases en la atmósfera que causan el efecto invernadero.

1.5.8.2 *Razón N:P y calidad de agua*

El nitrógeno ha sido identificado como el nutriente limitante crítico en aguas costeras (Ryther y Dunstan, 1971). Se considera que las concentraciones de fósforo que se reciben de los aportes de aguas de alcantarillado y de escorrentías terrestres es adecuado para el

crecimiento del plancton. En cambio, el nitrógeno resulta escaso en dichos ambientes debido a:

- (1) la razón de nitrógeno a fósforo en aguas de alcantarillados y en aguas producto de otras escorrentías es baja y,
- (2) la regeneración de fósforo es más rápida que la regeneración de amoníaco a partir de la descomposición de materia orgánica (amonificación).

En consecuencia, se piensa que la entrada de fósforo a un ecosistema acuático provoca que el nitrógeno se convierta en nutriente limitante, aún cuando su concentración inicial supere a la del fósforo. La fertilización de cuerpos de agua con nitrógeno y fósforo provoca un aumento en la tasa fotosintética, sin cambios aparentes en la composición de especies fototróficas. Sin embargo, la fertilización con fósforo solamente provoca el sobrecrecimiento de cianobacterias que fijan nitrógeno y que afectan la calidad del agua. A partir de estos estudios se ha planteado que los programas de control de la contaminación dirigidos a reducir la concentración de nitrógeno en efluentes, podría tener efectos adversos sobre la calidad de las aguas.

1.5.8.3 Ciclo acuático del Nitrógeno

El ciclo general del nitrógeno en un ecosistema acuático es muy complejo y muchos de los procesos de transferencia, asociados con los tamaños de los cuerpos de agua, son importantes no solamente en la productividad acuática sino también en la calidad del medio ambiente en general y la salud humana. Dos grandes procesos de fuentes biológicas y sumideros ocurren con el nitrógeno, que no ocurren con el fósforo por ejemplo, eso significa que N influye el control de la productividad y el tratamiento de desechos. Esos procesos involucran la transferencia del nitrógeno de la atmósfera N_2 a través de fijación microbiana y regresa a la atmósfera vía N_2O y N_2 a través de la denitrificación. El proceso de nitrificación (oxidación del amonio) y la denitrificación son reacciones que podrían proceder sin mediación biológica pero a tasa baja. Existen microorganismos, que capturan la energía disponible en los componentes reducidos a través de reacciones catalizadas. Debido a que las fuentes de energía son inorgánicas, los organismos son referidos a la chemolithotrophs (Brock, 1970).

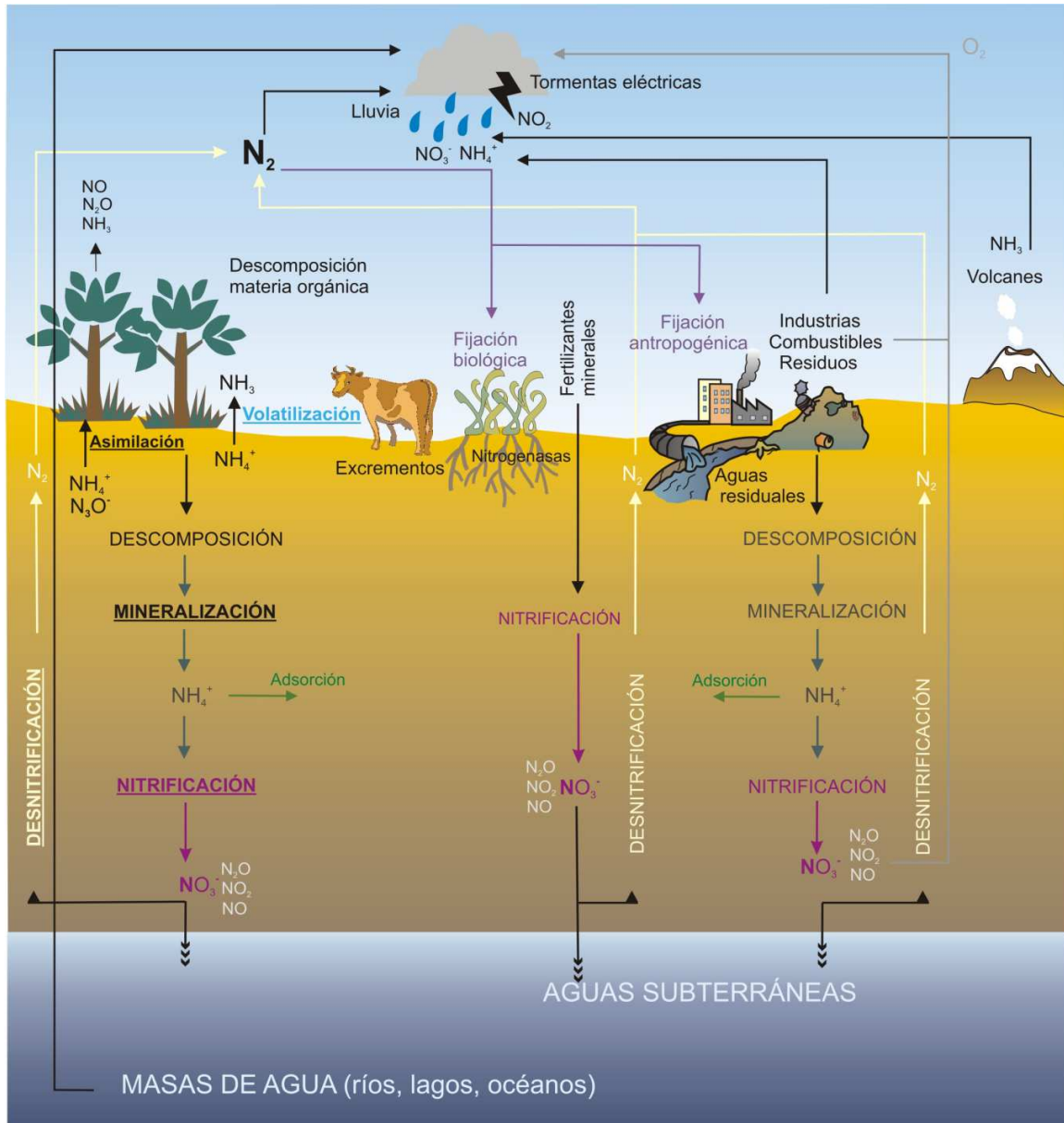


Figura 1.16. Ciclo general del nitrógeno

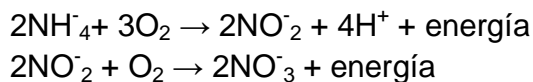
1.5.8.4 Concentraciones del Nitrógeno en condiciones estancadas

El nitrógeno es más abundante como N_2 , con 80% de los constituyentes atmosféricos. Sin embargo antes de que esta forma sea disponible para las plantas deberá fijarse ya sea biológicamente o a través de una reacción luz energizada. La forma más común de Nitrógeno que pueden utilizar las plantas acuáticas es el nitrato NO_3^- , y sus rangos de contenido dan un indicio cuando la productividad es alta y todo el N disponible ha sido

absorbido dentro del tejido de la planta. Usualmente las concentraciones varían entre 500 y 1000 $\mu\text{g l}^{-1}$ durante periodos de no utilización. Concentraciones sobre 1 $\mu\text{g l}^{-1}$ pueden ocurrir pero usualmente asociadas con su entrada. El Amoniacó (NH_3) o el amonio (NH_4^+), son las formas principales en agua, resultan abundantes en presencia del oxígeno o en aguas muy enriquecidas, pero es menos abundante que el nitrato (NO_3^-). Debido a que el amonio NH_4^+ se encuentra en su forma más reducida es común que sea preferido por las plantas en lugar del NO_3^- . El NO_2^- no se usa, de hecho puede ser tóxico. Debido a que el NO_3^- se oxida fácilmente, éste no se presenta en cantidades apreciables.

1.5.9 Nitrificación

Es el proceso por el cual el NH_3 es transformado en NO_2^- y finalmente en NO_3^- . El proceso ocurre bajo condiciones aerobias. Los organismos que usualmente realizan las transformaciones son nitrosomas y nitrobacterias. Aunque las reacciones producen o dan energía, la producción es más baja comparada con otras transformaciones en el ciclo (Delwiche, 1970). En el proceso de nitrificación las reacciones principales que intervienen son:



1.5.10 Denitrificación

Este proceso ocurre en ausencia, o escasez, de oxígeno. Un organismo denitrificante común es el Thiobacillus denitrificante el cual es un chemolithotroph y la reacción asociada es:



Las bacterias heterotróficas, tales como Micrococcus, Serratia, Pseudomonas y Achromobacter, son denitrificadores cuando las concentraciones de oxígeno son bajas; como estas bacterias son anaerobias facultativas, pueden vivir y ser parte de la flora normal en aguas residuales (Christensen and Harremoës, 1972).

En la denitrificación, el proceso reverso o nitrificación las bacterias reduce NO_3^- a NO_2^- que a su vez forman moléculas gaseosas N_2 o N_2O (óxido nítrico). Esto representa el mecanismo de pérdida de N de los ecosistemas y puede ser usado como tratamiento para remover N de los desechos de agua. Sin embargo, el medio ambiente deberá ser aeróbico

para que se presente la nitrificación y anaerobio para la denitrificación. Es necesaria la alternancia aerobiosis/anaerobiosis para que la denitrificación represente una pérdida significativa de N y tenga implicaciones en el balance de N y una limitación de nutrientes en lagos tanto como en el tratamiento de aguas residuales. En un lago productivo, el nivel de oxígeno baja, lo cual permite la denitrificación. Para el tratamiento de aguas de desecho, un periodo aerobio deberá anteceder al periodo anaerobio de manera que el NH_4^+ sea convertido en NO_3^- , el cual podrá ser denitrificado sin oxígeno.



Figura 1.17 Proceso de nitrificación y denitrificación

1.5.11 Fijación del Nitrógeno

La fijación del nitrógeno es un proceso aerobio que consume energía y que es llevado a cabo en medios acuáticos por bacterias tales como azotobacteria y Clostridium y por las algas verde-azul (cianobacteria), nostoc, anabaenopsis, gleotrichia, y el aphanizomenon. La fijación de N por algas verde-azul usualmente domina y enriquece los lagos en verano. La fijación puede representar una entrada importante de N a un ecosistema. El rango de medición para la anabaena va de 0.04 a 72 por día. Esto podría representar el reingreso de nitrógeno inorgánico disuelto en sistemas enriquecidos, debido a que el NO_3^- es usualmente reducido a bajos niveles o es indetectable cuando los fijadores por cianobacterias aparecen. Horne y Goldman (1972) reportaron que la fijación por cianobacterias contribuye hasta un 43% de la entrada anual de N en el lago Clear, en California.

La fijación del N es realizada por el alga azul-verde. La abundancia de ésta se incrementa con la depleción del NO_3^- (Horne y Goldman, 1972). Debido a que la fijación es un proceso demandante de energía, resulta ventajoso solamente cuando el NO_3^- y el NH_4^+ se encuentran disponibles en grandes cantidades.

Esta fuente de N para los fijadores-N también está disponible para otras especies de algas. En muchos lagos eutróficos la aparición del aphanizomenon y el microcystis usualmente no ocurre al mismo tiempo, pero a menudo parecen alternarse en abundancia. La disponibilidad de N puede ser la causa para tal cambio, así como de la sucesión de la cianobacterias, particularmente la heterocystous.

Los balances completos para el nitrógeno en lagos son mucho menos frecuentes que para el fósforo. Brezonik y Lee (1968) desarrollaron un balance completo para el N entrando y perdiéndose en el lago Mendota (tabla 10). En ese caso la ganancia de la fijación del N fue similar a la pérdida por desnitrificación aunque nunca fue la fuente o sumidero más importante. La sedimentación fue estimada por diferencias entre salidas y entradas. Messer and Brezonik (1983) citan muchos balances de nitrógeno que muestran que fracciones mayores (> 50%) del nitrógeno entrante se pierde a través de la desnitrificación.

Tabla 1.12 Balance del N, en el lago Mendota.

Entrada		Pérdida	
Fuente	(%)	Sumidero	(%)
Agua de desecho	8.1	Flujo de salida	16.4
Superficie del agua	14.7	Denitrificación	11.1
Precipitación	17.5	Atrapamiento de los pescados	4.5
Flujo subterráneo	45	Plantas	1.3
Fijación	14.4	Sedimentación	66.7
Total	100	Total	100

1.5.12 Implicaciones de la Limitantes de Nutrientes

La disponibilidad de N y P en ecosistemas de agua fresca varía debido al sólo proceso del ciclo del N, junto con los diferentes comportamientos químicos del N y el P. Repetir algunas de las diferencias entre los ciclos de N y del P proporcionará un mejor entendimiento en cuanto a cómo el nutriente puede ser más restrictivo, algunas de estas características se describen a continuación:

1. En los lagos de agua fresca el tiempo de residencia para una cantidad entrante de N es mayor que para el P, debido a la fuerte capacidad de absorción de los metales inorgánicos complejos y la materia orgánica particulada para el PO_4^{3-} tiende a remover P de los sedimentos. Aunque alguna cantidad de fósforo de los sedimentos puede ser reciclado por algunos procesos (hierro, redox, descomposición de macrofitas, etc.) en muchos casos la eficiencia de tales procesos no parece ser muy

- alta, es decir, algunos lagos anóxicos continúan siendo sumideros netos para el P. El N, por otro lado, en la forma de NO_3^- y NH_4^+ es mucho más soluble y no es absorbido realmente por complejos inorgánicos como el PO_4^{3-} . Paralelamente los sedimentos anaerobios también pueden liberar NH_3 .
2. Aunque entren fracciones significantes de N, los sistemas acuáticos la pueden perder vía denitrificación, esto ocurre solamente en estado anaerobio y lagos altamente enriquecidos. Como resultado, el proceso contribuye a la limitación de N en lagos enriquecidos, pero no contribuirá, de forma importante a la disminución de N en aguas de bajo o moderado enriquecimiento.
 3. La atmósfera provee una fuente de N a un sistema N-reducido por fijación biológica de N_2 . Esto ocurre en medios aerobios y requiere solamente la presencia de cianobacterias. Cuando el N es reducido, esos organismos pueden dominar y así proveer una gran parte del N a los sistemas enriquecidos. En sistemas productivos bajos o moderados, sin embargo, el N inorgánico ha decaído lo suficiente para ofrecer una ventaja sobre la fijación del N. Debido a que es un proceso consumidor de energía, la fijación es ventajosa solamente si NO_3^- y el NH_4^+ son escasos. Otro factor que restringe el abastecimiento de N a través de la fijación es una relación mínima del reemplazamiento de N en células, es decir, la tasa de crecimiento, de 0.05 días⁻¹ (Horne y Goldman, 1972).
 4. Otra fuente de N que no ocurre en el ciclo del P es la precipitación. Aunque el agua de lluvia contiene P y se ha visto que es importante en lagos (Schindler, 1974), el NO_3^- en la lluvia es un fenómeno constante, habiendo sido transformado de la fuente atmosférica N_2 por la luz (proceso conocido como lightning).

Evidentemente existen menos fuentes para el P que para el N y la sedimentación es probablemente un removedor más eficiente para el P que para el N, en la mayoría de los ecosistemas acuáticos. Por lo tanto, el P usualmente estará menos disponible que el N a través de la denitrificación en ambientes anóxicos, el N probablemente será el limitante en sistemas altamente enriquecidos.

1.5.13 Modelo Hidrobiológico para el Nitrógeno

Un modelo que incluye los diferentes procesos del nitrógeno, incluido el de sistemas acuáticos se presenta a continuación:

$$\frac{dN_1}{dt} = - \underbrace{J_1 N_1}_{\text{oxidación del amonio}} - P_h \underbrace{G_p A_{Nph} \frac{N_1}{N_1 + N_3}}_{\text{toma de fitoplancton}} + \underbrace{J_4 N_4}_{\text{Reciclado de nitrógeno orgánico}} + \underbrace{J_5 N_5}_{\text{liberación del sedimento anaerobio}}$$

$$\frac{dN_2}{dt} = J_1 N_1 - J_2 N_2$$

$$\frac{dN_3}{dt} = \underbrace{J_3 N_3}_{\text{denitrificación anaerobia}} = \underbrace{J_2 N_2}_{\text{oxidación del nitrito}} - P_h \underbrace{G_p A_{Nph} \frac{N_3}{N_1 + N_3}}_{\text{toma de fitoplancton}}$$

$$\frac{dN_4}{dt} = - \underbrace{J_4 N_4}_{\text{decaimiento orgánico}} + \underbrace{(D_{ph} - C_g Z) P_h A_{Nph}}_{\text{reciclado de la muerte del fitoplancton}} + \underbrace{R_z Z A_{NZ}}_{\text{reciclado del zooplancton}} - \underbrace{J_6 N_4}_{\text{toma del sedimento}}$$

En donde,

- N_1 Concentración del amonio,
- N_2 Concentración del nitrito
- N_3 Concentración de nitratos.
- N_4 Concentración de nitrógeno orgánico.
- N_5 Tasa de decaimiento del nitrógeno en el sedimento
- J_1 Tasa de oxidación del amonio
- J_2 Tasa de oxidación del nitrito
- J_3 Tasa de denitrificación
- J_4 Tasa de decaimiento del nitrógeno
- J_5 Tasa de decaimiento del nitrógeno en el sedimento
- J_6 Tasa de extracción del nitrógeno del sedimento
- A_{NPh} Relación carbon-nitrógeno para el fitoplancton
- A_{NZ} Relación carbon-nitrógeno para el zooplancton
- Z Concentración de zooplancton
- G_p Tasa de crecimiento neto del fitoplancton
- O_p Tasa de mortandad del fitoplancton
- C_g Tasa del pastoreo del zooplancton
- R_z Tasa de respiración del zooplancton

En las formulaciones las tasas de abastecimiento de fitoplancton del amonio (N_1) y el nitrato (N_3) están gobernadas por su concentración relativa en la columna de agua. La denitrificación y liberación del nitrógeno (amonio) del sedimento depende de la existencia de las condiciones anaerobias. Como todos los modelos de esta naturaleza, para aplicarlos se requiere de un gran trabajo de calibración de las diferentes tasas de reacción y de las constantes que en ellos aparece.

1.6 MODELACIÓN DE FITOPLANCTON

1.6.1 Variación Temporal del Fitoplancton

A pesar de que la biomasa de algas y la composición específica sean claras indicadoras de cuerpos de agua hipertróficos someros, no se han establecido patrones claros de sucesión en estos lagos, como los que se han encontrado en lagos profundos (Munawar & Munawar, 1986; Álvarez-Cobelas & Jacobsen, 1992; Rojo et al., 2000). Con la información de diferentes regiones del mundo se han sugerido cuatro tipos de sucesión estacional para ambientes hipertróficos someros: I) con dominancia de las cianobacterias durante todo el año; II) con períodos cortos en los que dominan las diatomeas (otoño–invierno y principios de primavera), con la dominancia de cianobacterias el resto del año y en algunos casos, con picos cortos de clorococales; III) donde las cianobacterias dominan al final de la primavera y el verano, dominando las clorococales mezcladas con diatomeas y criptofíceas el resto del año; IV) dominancia de poblaciones de flagelados como las volvocales y criptofíceas además de las clorococales (Álvarez-Cobelas & Jacobsen, 1992).

Según los mismos autores, las concentraciones de $N-NH_4^+$ y de materia orgánica disuelta son los factores que determinan la sucesión. El tipo II de sucesión se presenta en cuerpos de agua con concentraciones promedio de $N-NH_4^+$ inferiores a 1 mg L^{-1} . El predominio de las cianobacterias como *Microcystis* y de flagelados como *Chlamydomonas*, *Cryptomonas* y *Chlorogonium* se asoció principalmente con las temperaturas menores y con valores promedio más bajos de los nutrientes (fósforo reactivo y nitrógeno en forma de nitratos y de amoníaco). En cambio, al incrementarse la temperatura y también las concentraciones de nutrientes, *Microcystis* y los flagelados disminuyeron fuertemente sus densidades. Lo anterior sería una indicación de que estos grupos proliferan cuando la concentración de nutrientes es elevada, pero sin llegar a los valores más altos. También el efecto de la temperatura es notable, pues además del cambio en el tipo de especies dominantes, se produce un aumento evidente en la concentración de clorofila-a, señalando que las densidades de fitoplancton se incrementan. Naselli-Flores (2000) menciona que la variación del fitoplancton responde a las fluctuaciones de la temperatura y a la variable asociada que es la cantidad de radiación solar. Esteves (1988), con base en datos generados en Brasil, afirma que el fitoplancton de las regiones tropicales muestra una variación temporal menos contrastante que la observada en lagos templados, y que en los lagos tropicales someros la mezcla frecuente de la columna de agua y la turbulencia generada dificultan el reconocimiento de los factores ambientales de mayor influencia sobre la variación temporal del fitoplancton. Pero se reconocen la disponibilidad de nutrientes, la radiación solar disponible y la precipitación como los más importantes.

Con relación a la temperatura, una característica de los lagos someros es que la columna de agua se mezcla frecuentemente por la acción del viento. Los lagos someros son típicamente polimícticos, debido a que la acción del viento provoca la mezcla de la columna de agua, alterando su estabilidad e impidiendo la limitación de nutrientes, lo cual favorece el crecimiento de especies algales con bajas tasas de sedimentación y altas tasas de crecimiento como son las de dimensiones pequeñas (Scheffer, 1998). Especies de los géneros *Monoraphidium* y *Microcystis*, al igual que el picofitoplancton, se consideran indicadores de la presencia de capas de agua mezcladas y poco profundas (Reynolds et al., 2002).

De acuerdo con los criterios de la OECD (1982) los lagos hipertróficos son aquellos con concentraciones de clorofila-a iguales o mayores a $100 \mu\text{g L}^{-1}$. Alvarez-Cobelas y Jacobsen (1992) retoman este criterio y señalan que el valor promedio de clorofila-a en la hipertrofia debe ser mayor a $100 \mu\text{g L}^{-1}$.

La selección del modelo de fitoplancton depende de la información con que se cuente.

Bermagasco et al (1995), presentan un modelo de fitoplancton sencillo, con la formulación para algas, excepto por el término de predación, el cual se excluye. El modelo se desarrolla complementado con formulaciones para nitrógeno y oxígeno disuelto, no maneja fósforo por considerar que el nitrógeno es el principal nutriente limitante en lo que agua de mar se refiere (Darley, 1991); las formulaciones para el factor limitante de temperatura son las propuestas por Lassiter y Kearns, para el factor limitante por luz es una función de Steele, y para el nutriente limitante una formulación de Michaelis-Menten o Monod. La formulación se presenta en la tabla siguiente:

Tabla 1.13. Formulación del modelo para el Fósforo

$\frac{dP}{dt} = [\mu_{max} f_1(L) f_2(T) f_3(P) - K_{resp} - K_{mf}] P$	
<p>$\mu_{m\acute{a}x}$, Tasa de crecimiento máximo del fitoplancton K_{resp}, Coeficiente de respiración del fitoplancton K_{mf}, Coeficiente de mortalidad del fitoplancton</p>	
$f_1(L) = \left(\frac{I_0 e^{(-K_{ext}h)}}{I_0 e^{(-K_{ext}h)} + K_{luz}} \right)$	<p>I_0, radiación incidente de luz K_{ext}, coeficiente de extinción K_{luz}, constante de saturación media de luz</p>

$f_2(T) = \left[\frac{T_{max} - T}{T_{max} - T_{opt}} \right]^{\beta(T_{max} - T_{opt})} e^{\beta(T - T_{opt})}$	β , coeficiente térmico $T_{m\acute{a}x}$, temperatura máxima de crecimiento para el fitoplancton T_{opt} , temperatura óptima de crecimiento para el fitoplancton
$f_3(P) = \left(\frac{P}{K_n + P} \right)$	P , Concentración de fósforo y/o Nitrógeno K_n , Constante de saturación media del fósforo

Solidoro et al (1995), presentan un modelo de fitoplancton parecido al anterior, incluyendo en su formulación además de los términos de crecimiento, respiración y mortalidad, los de sedimentación y predación, es decir, la formulación completa. Las funciones utilizadas para el cálculo de los factores limitantes del crecimiento son de las mismas que el anterior, con la variante del cálculo en el coeficiente de atenuación de luz, desarrollado en función de la densidad del fitoplancton y detritos. La ecuación general queda entonces de la forma:

$$\frac{dP}{dt} = [\mu_{max} f_1(L) f_2(T) f_3(P) - \vartheta(T)(K_{resp} + K_{mf}) - K_{sedP}]P - \vartheta(T)K_{grz}f([P])[Z]$$

donde :

$\vartheta(T)$, función de temperatura = $\vartheta^{(T-20)}$

K_{sedP} , tasa de sedimentación del fitoplancton

K_{grz} , tasa de predación del fitoplancton

$[Z]$, densidad de zooplancton

La formulación presentada por Pastres et al (1994) para fitoplancton es igual a la anterior.

Riley y Stefan (1988), al igual que en el caso del fósforo utilizan un formulación de estequiometría variable, haciendo la aplicación de este modelo menos accesible ya que los datos requeridos son más específicos.

1.7 MODELACIÓN DEL ZOOPLANCTON

Uno de los aspectos de mayor interés en ecología ha sido, y sigue siendo, el estudio de los factores bióticos y abióticos que regulan la dinámica y estructura de las comunidades

naturales. Conocer las interacciones entre estos factores y cuantificar su importancia relativa representa uno de los principales problemas con los que se enfrenta la ecología.

Las comunidades planctónicas de sistemas acuáticos están constituidas por organismos con periodos de vida cortos y muchos de ellos son fácilmente manipulables. Ello ha permitido la formulación, a partir de hipótesis experimentales basadas en interacciones biológicas y/o físicas, de modelos sobre la estructura de comunidades más fácilmente que en los sistemas terrestres. Además, el zooplancton de agua dulce está compuesto por animales con altas tasas de crecimiento, un rasgo que permite responder rápidamente a ambientes cambiantes.

Otra de sus características es su capacidad para producir abundantes huevos de resistencia que mantienen su viabilidad durante décadas o siglos (Hairston, 1996). Las formas de resistencia en el sedimento de los lagos representan un banco de huevos, análogo al banco de semillas de muchas plantas terrestres (Marcus et al., 1994). La composición específica del zooplancton puede ser un excelente criterio para caracterizar el estado trófico de los sistemas acuáticos y para deducir la estructura de las comunidades acuáticas. Las diferencias en el estado trófico se manifiestan claramente en la estructura de la comunidad zooplanctónica y en las relaciones zooplancton-fitoplancton.

1.7.1 Componentes del Zooplancton

Las comunidades zooplanctónicas dulceacuícolas están constituidas esencialmente por rotíferos y crustáceos (los ciliados y flagelados heterotróficos pueden ser incluidos dentro del zooplancton pero, generalmente, se estudian aparte). Sus características principales se reflejan en la Tabla 12 (ver también la Fig. 17).

Los rotíferos juegan un papel fundamental en las cadenas tróficas pelágicas. Son un eslabón entre el fitoplancton y los consumidores secundarios, pero su importancia se acrecienta porque pueden transferir materia y energía desde bacterias y partículas detríticas de pequeño tamaño, que son recursos no utilizables por otros organismos planctónicos. Unas pocas especies pueden ser depredadoras de otras especies de rotíferos. Los crustáceos planctónicos se dividen en branquiópodos y copépodos. De los distintos ordenes de branquiópodos, los más conocidos y estudiados son los anomópodos, conocidos tradicionalmente como cladóceros. Los rotíferos juegan un papel fundamental en las cadenas tróficas pelágicas.

Los copépodos son crustáceos más complejos que se pueden localizar tanto en aguas

continentales como en aguas marinas, siendo mucho más abundantes y diversos en aguas marinas que los rotíferos y cladóceros.

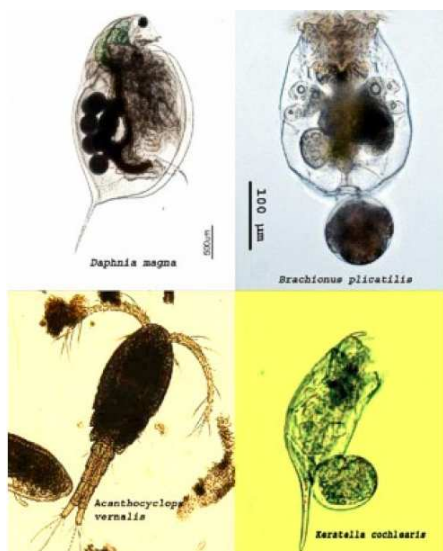


Figura 1.18.- Ejemplos de rotíferos (*Brachionus plicatilis* y *Keratella cochlearis*), cladóceros (*Daphnia magna*) y copépodos (*Acanthocyclops vernalis*) comunes en sistemas acuáticos.

Tabla 1.14 Características generales de los principales grupos del zooplancton de sistemas continentales.

	Tamaño aprox. (mm)	Reproducción	Fuentes principales de alimento	Sistemas acuáticos donde predominan
Rotíferos	0.05-1.5	Partenogenética (sexual ocasionalmente)	- Algas - Detritos - Bacterias - Otros rotíferos	- Eutróficos - Sistemas no limitados en P - Sistemas con peces planctívoros
Cladóceros	0.5-3.0	Partenogenética (sexual ocasionalmente)	- Algas - Bacterias	- Oligotróficos - Sistemas sin peces planctívoros
Copépodos	0.5-2.0	Sexual	- Algas - Rotíferos - Ciliados	- Eutróficos - Sistemas salinos

1.7.2 Zooplancton y Estado Trófico de los Sistemas Acuáticos Lénticos

Los sistemas acuáticos lénticos se pueden dividir en diferentes tipos de acuerdo con su carga de nutrientes y capacidad productiva. Las actividades humanas contribuyen a

incrementar la carga de nutrientes de los sistemas acuáticos provocando la conocida eutrofización.

Las lagunas y embalses mesotróficos y eutróficos son bastante comunes en Europa. Las lagunas someras son particularmente vulnerables a la eutrofización, a variaciones de nivel hídrico y a la infiltración de pesticidas. De forma particular, los sistemas someros oligotróficos están caracterizados por aguas transparentes, presencia de macrófitos en el fondo y pequeñas biomasas y concentraciones de fitoplancton y sólidos en suspensión. Por su parte, los sistemas eutróficos están caracterizados por aguas turbias, ausencia de macrófitos y alta biomasa de fitoplancton. Las poblaciones zooplanctónicas dominantes varían en los sistemas oligotróficos y eutróficos (Tabla 12).

La turbidez del agua de un lago afecta inmediatamente a su valor ecológico, económico y recreativo. Por consiguiente, conviene potenciar estrategias encaminadas a reducirla como, por ejemplo, la aplicación de técnicas de biomanipulación. Estas técnicas implican una modificación de la red trófica. Pueden utilizarse diferentes mecanismos: reducción de la resuspensión de sedimentos mediante la eliminación de peces bentívoros y supresión del crecimiento de fitoplancton mediante la eliminación de peces planctívoros que consumen el zooplancton, es decir, sus depredadores. La supresión del crecimiento del fitoplancton requiere un control eficiente de dichas poblaciones por parte del zooplancton, el cual puede no ser suficientemente capaz de reducir de forma significativa las densidades poblacionales de fitoplancton.

La superioridad del zooplancton de gran tamaño (generalmente del cladóceros *Daphnia*) como supresor del crecimiento de las poblaciones fitoplanctónicas es la base de muchos estudios de biomanipulación (Lammens et al. 1990). Se ha evidenciado que la importancia relativa del macro-zooplancton como depredador del fitoplancton es mayor en sistemas de estado trófico intermedio. En sistemas oligotróficos y eutróficos, la estructura de tamaños de la comunidad zooplanctónica no afecta a la biomasa de fitoplancton total ni a la biomasa de fitoplancton comestible por el zooplancton (Elser et al., 1990; Morales-Baquero et al., 1994). Sin embargo, las técnicas de biomanipulación pueden tener éxitos apreciables en sistemas hipereutróficos (Declerck et al., 1997). Este hecho sugiere que, en lagunas eutróficas turbias en las que no aparecen especies zooplanctónicas grandes como *Daphnia magna*, puede ser útil el inocularlas al comienzo de la estación de crecimiento como medida adicional a la eliminación de peces planctívoros y bentívoros. Estos peces en muchos casos han sido artificialmente introducidos en las lagunas alterando toda su estructura. Lógicamente, si se lleva a cabo esta acción se deben utilizar preferentemente clones aislados de hábitats similares o cercanos, que es más probable que se adapten mejor a las

condiciones específicas del hábitat (DeMeester, 1996). Para lograr una rápida restauración de una pequeña laguna de 1 ha de superficie y una profundidad media de 1 m, la inoculación de 10.000 a 100.000 *Daphnia magna* (1 ind/100 l) puede ser suficiente (Declerck et al., 1997).

1.7.3 Estructura de las comunidades de zooplancton: interacciones planctónicas

Inicialmente, en el estudio del plancton predominaron aproximaciones auto ecológicas interesadas por el análisis de la influencia de los factores físicos y químicos del medio sobre los organismos y su sucesión. En consecuencia, la sucesión de especies era generalmente considerada como el resultado de la diferente tolerancia ecológica a varios factores ambientales abióticos, tales como la intensidad de la luz y la densidad del agua o la viscosidad (Hutchinson, 1967).

En décadas más recientes los ecólogos del plancton han mostrado un interés creciente en el estudio de las interacciones bióticas, la competencia por recursos comunes y la depredación por invertebrados, manifestando su importancia en la regulación de las comunidades acuáticas. Un resumen esquemático de dichas interacciones se refleja en la Figura 18.

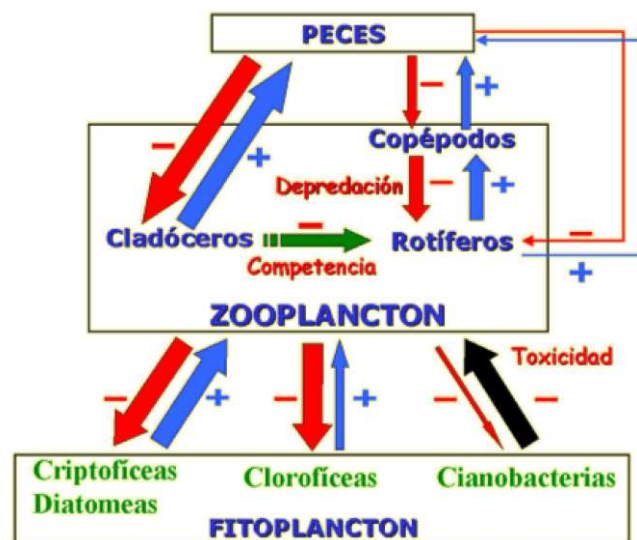


Figura 1.19. Esquema general de las interacciones biológicas que implican al zooplancton (las flechas con mayor grosor indican un mayor efecto relativo).

1.7.4 Desarrollo de las Poblaciones Zooplanctónicas y Limitación de Nutrientes

El desarrollo de las poblaciones de zooplancton no solo va a depender de la cantidad de

alimento disponible sino también de su calidad. La diferente calidad nutricional de los diferentes taxones de algas sugiere que el zooplancton estará limitado por la calidad nutricional de las comunidades fitoplanctónicas cuando estas no estén sumamente dominadas por diatomeas o criptofíceas, u otros grupos de algas de alta calidad nutricional (Brett et al., 2000; Ramos-Rodríguez y Conde-Porcuna, 2003).

En los sistemas acuáticos y terrestres el nitrógeno y el fósforo pueden encontrarse en concentraciones más bajas en las plantas que en los herbívoros (Skinner y Cohen, 1994; Sterner y Hessen, 1994) y, en consecuencia, los nutrientes de la dieta pueden limitar el crecimiento y la reproducción de estos organismos. Dentro del zooplancton, los rotíferos son más sensibles a la limitación de fósforo que los crustáceos (Morales-Baquero y Conde-Porcuna, 2000; Conde-Porcuna et al., 2002).

En sistemas oligotróficos, las entradas atmosféricas de fósforo y las diferencias en las cuencas de captación pueden controlar la abundancia de los organismos zooplanctónicos en una escala regional (Morales-Baquero y Conde-Porcuna, 2000).

Al igual que las plantas superiores, las algas tienen razones carbono : fósforo (C:P) y carbono : nitrógeno (C:N) relativamente altas y, bajo limitación de N o P, la razón C:N:P del fitoplancton varía considerablemente. Las algas suelen estar limitadas por P en los ecosistemas acuáticos al final de la primavera (Sommer, 1989; Conde-Porcuna et al., 2002). Diversos estudios experimentales muestran que razones C:P elevadas en el medio se traducen en razones C:P elevadas en las células de las clorofíceas y en razones C:P reducidas en las criptofíceas (Sterner et al., 1993; Ramos-Rodríguez & Conde-Porcuna, 2003). Bajo dichas condiciones, las clorofíceas representan un mal alimento para el zooplancton mientras que las criptofíceas serían un alimento de alta calidad nutricional, hechos evidenciados de forma experimental (Conde-Porcuna, 2000; Ramos-Rodríguez & Conde-Porcuna, 2003).

En consecuencia, y paradójicamente, en sistemas acuáticos el zooplancton podría desarrollarse mejor bajo limitación de nutrientes en el medio dependiendo del tipo de población fitoplanctónica dominante.

1.7.4.1 *Interacciones entre poblaciones zooplanctónicas*

Los cladóceros, más concretamente el género *Daphnia*, pueden eliminar poblaciones de rotíferos por competencia de explotación por los recursos de algas compartidos, por interferencia mecánica, en la cual los rotíferos son arrastrados a la cámara branquial de

Daphnia para posteriormente ser expulsados muertos o con graves daños, y/o por interferencia química (Burns y Gilbert, 1986; Conde-Porcuna et al., 1994; Conde-Porcuna, 1998). Estos mecanismos pueden operar simultáneamente en sistemas acuáticos, si bien la interferencia mecánica es el principal mecanismo de supresión de rotíferos cuando los cladóceros tienen un tamaño superior a 1,2 mm. En caso contrario, suele predominar la competencia de explotación por los recursos. En líneas generales, en aquellos sistemas donde la biomasa de cladóceros, en especial de Daphnia, sea elevada, la biomasa y riqueza específica de rotíferos será escasa.

Las interacciones intraespecíficas también pueden jugar un papel importante limitando el crecimiento poblacional de las poblaciones zooplanctónicas. Incluso en sistemas hipereutróficos se ha podido evidenciar un alto grado de densa dependencia intraespecífica independiente de la disponibilidad de alimento de algas (Declerck et al., 2003). Tanto la interferencia química intraespecífica como los cambios en las estrategias de vida del zooplancton debidos a la interacción intraespecífica pueden ser mecanismos responsables de densa dependencias intraespecíficas.

1.7.4.2 Biodiversidad

Los lagos representan modelos óptimos para el estudio de la riqueza específica en relación a los gradientes ambientales, ya que forman entidades ecológicas que están bien delimitadas en el paisaje (Dodson et al., 2000). Sin embargo, en comparación con los sistemas terrestres, los estudios sobre patrones de diversidad en lagos son escasos (Waide et al., 1999). Como en los biomas terrestres, la riqueza específica en los lagos muestra una gran variedad de respuestas a los gradientes de productividad, dependiendo del taxón y estudio bajo consideración. La interpretación de los patrones de diversidad que se observan en sistemas naturales es complicada ya que diferentes procesos pueden estar teniendo lugar a la vez.

En el Proyecto Europeo BIOMAN realizado recientemente se ha evidenciado, tras estudiar 98 lagos europeos, que la búsqueda de un índice sencillo de diversidad para estimar la riqueza biológica total en un ecosistema sobre una escala regional es, probablemente, poco relevante (Declerck et al., in prep.). En el caso de las lagunas españolas estudiadas en dicho proyecto, se ha observado que la riqueza genérica de rotíferos es mayor en aquellos sistemas con bajos niveles de fósforo total (menos productivos). En el caso de la riqueza específica de cladóceros y crustáceos no parece existir una clara relación con los niveles de fósforo total, mientras que la riqueza de estos grupos tiende a incrementarse cuando los valores de conductividad son reducidos (Declerck et al., in prep.). Llama especialmente la

atención que el análisis de los huevos de resistencia del zooplancton presentes en los sedimentos (Fig. 4) puede ser una técnica más eficiente para las medidas de biodiversidad que el muestreo repetitivo de las comunidades activas acuáticas en diferentes localizaciones de las lagunas (Vandekerkhove et al., en prensa; Vandekerkhove et al., in prep.). El desarrollo de los estudios de las formas de resistencia enterradas en el sedimento durante décadas e incluso siglos se manifestará como una extraordinaria herramienta de reconstrucción del pasado y de predicción de los efectos de cambios ambientales futuros en sistemas acuáticos.

Al igual que con el fitoplancton, los modelos encontrados en literatura están definidos por una sola ecuación considerando la biomasa o concentración total del zooplancton como un solo constituyente, que es el caso más común.

Pastres et al (1994) y Solidoro et al (1995) utilizan la misma formulación para el zooplancton, excluyendo el término de pérdidas por predación de un nivel trófico superior, utilizando una eficiencia de asimilación del fitoplancton constante. Para calcular el crecimiento o producción de zooplancton la ecuación que define el modelo es:

$$\frac{dZ}{dt} = \vartheta(T)(E_{ff}K_{grz}f([P]) - K_{mz} - K_{escz})[Z]$$

donde :

$\vartheta(T)$, función de temperatura = $\vartheta^{(T-20)}$

K_{mz} , tasa de mortalidad del zooplancton

K_{escz} , tasa de excreción del zooplancton

K_{grz} , tasa de predación del fitoplancton por el zooplancton

E_{ff} , eficiencia de asimilación del fitoplancton por el zooplancton

$[Z]$, densidad de zooplancton

La simulación de zooplancton se utiliza principalmente para simular mejor la dinámica del fitoplancton, por lo que existen pocas formulaciones. Nuevamente, la selección del modelo a utilizar va a depender de la información con que se cuente.

Un modelo hidrobiológico puede ser muy complejo mientras más componentes entren en la dinámica de una reacción, sin embargo, el presente estudio pretende incorporar las reacciones más sencillas hasta las más complejas, por lo tanto, se empieza por describir la modelación de dos sustancias básicas en la salud de los cuerpos acuáticos: el oxígeno disuelto (OD) y la demanda bioquímica del oxígeno (DBO). Sin embargo, cómo se verá más

adelante, tan sólo en la modelación de estos dos términos se incluye también la modelación de otros componentes. Aunque se mostrará el ciclo completo de los componentes mencionados al final se usarán relaciones paramétricas más sencillas para efectos de modelación numérica, debido a la dificultad de adquirir información bibliográfica de todos los parámetros.

2. MODELACIÓN MATEMÁTICA DE PARÁMETROS DE CALIDAD DEL AGUA

2.1 Introducción

El manejo apropiado de los recursos hídricos aun a escala pequeña es difícil. Hay un gran número de criterios de calidad para ser considerados y en la mayoría de los casos el nivel de cada criterio es la resultante de interacciones muy complejas. La situación se agrava por el enfoque experimental para pronosticar la calidad del agua.

La representación de interacciones químico-biológicas por medio de un sistema de ecuaciones se debe a Streeter-Phelps. Pero hasta épocas recientes la aplicación la modelación matemática estuvo limitada por la dificultad de encontrar soluciones analíticas a tales ecuaciones. Es el desarrollo del cómputo y de métodos numéricos han conducido a un creciente interés en la modelación.

Hay diferentes tipos de modelos matemáticos de acuerdo a su propósito. Se pueden clasificar de acuerdo a lo siguiente:

1. Simulación
2. Optimización
3. Diseño asistido por computadora

2.1.1 Simulación numérica

La creación de un modelo matemático que simula cambios en la calidad del agua se lleva a cabo en diferentes niveles. El propósito de la simulación es la máxima simplicidad consistente con el grado de exactitud y detalle. En la construcción de un modelo hidrobiológico, el primer paso es establecer un modelo simple pero real en términos numéricos. Después revisar la teoría actual relacionada con los parámetros del sistema. Vale la pena buscar relaciones o formas alternas de éstas. Dependiendo del estado del arte de la teoría, la formulación de ecuaciones puede o no puede presentar alguna dificultad. Donde no hay relaciones establecidas, si se tienen posibilidades, se puede trabajar con un laboratorio o planta piloto para establecerlas incluso utilizando análisis estadístico para

encontrar la forma y confiabilidad de las mismas. Se debe tener cuidado para evitar complicar el modelo eliminando todas las relaciones que no sean significantes.

En la selección de relaciones a incluir, lo mejor es adoptar un enfoque jerárquico. Incluyendo primero aquellas relaciones que son esenciales y después usar otras ecuaciones para modificar las relaciones secundarias.

Como ejemplo, supóngase que se quiere representar el crecimiento de algas, para esto se debe pensar en todos los factores que influyen en ello: luz, temperatura, nutrientes, PH y predadores. Estos factores se pueden ordenar en relaciones primarias y secundarias:

Relaciones Primarias:

- El crecimiento de algas está en función de la luz.
- El crecimiento de algas está relacionada a la disponibilidad de nutrientes.
- Si la depredación es importante entonces es un factor primario.

Relaciones Secundarias:

- La corrección por temperatura es necesario para calcular el crecimiento y la respiración.
- La corrección en el PH es necesaria para calcular el crecimiento y la respiración.

La creación de la estructura del modelo es la etapa más difícil, especialmente en modelos complejos. Es aconsejable empezar identificando las subdivisiones más grandes y ajustándolas en una forma esquemática. Figura 1.1 IWQM. Esto ayuda a establecer el diagrama de flujo global de información a través del modelo y destacar las dificultades de interconexión de las subdivisiones. Una vez que la estructura global del modelo ha sido establecida la siguiente etapa es rellenar los datos de entrada, salida, cálculo y toma de decisiones; esto puede ser llevado a cabo de diferentes maneras pero usualmente involucra la preparación de diagramas de flujo.

Esta representación en diagramas ayuda en la clasificación e identificación de las subsecciones del sistema. Por ejemplo en la figura 1.2 IWQM. hay diferentes fuentes y sumideros para el oxígeno y están agrupados y diferenciados de las otras partes del sistema, por ejemplo de las características físicas o hidráulicas. Es útil a la hora de establecer las rutas de información y ayuda a evitar secuencias incorrectas en la cadena de cálculos.

Este planteamiento tiene la ventaja de llevar paso a paso cuando se escribe el programa.

No es necesario usar métodos numéricos si existe una solución analítica adecuada, pero en la mayoría de los casos las aplicaciones de dichas soluciones están muy limitadas. El cálculo se debe llevar a cabo en una máquina adecuada a la complejidad del problema a resolver, puede ser desde una simple computadora hasta cómputo intensivo.

2.1.2 Optimización

La optimización es un grupo de técnicas matemáticas las cuales son usadas para obtener la mejor solución de un rango de posibilidades. La mejor solución puede ser un "mínimo" por decir la solución de más bajo costo, o también un "máximo" por ejemplo la mejora más grande para una inversión dada. Cualquiera que se la técnica empleada el problema necesita ser expresado en la siguiente manera:

a. Función objetivo

$$C = \sum_{i=1}^n W_i B_i \quad (2.1)$$

b. Ecuaciones restrictivas

Expresadas como:

$$\begin{aligned} A_1 X_1 \pm A_2 X_2 \dots A_n X_n &\leq Y_1 \\ B_1 X_1 \pm B_2 X_2 \dots B_n X_n &\leq Y_2 \end{aligned} \quad (2.2)$$

Estas ecuaciones pueden ser manipuladas por varios métodos. La completa descripción de esos métodos se puede encontrar en la literatura especializada de este tema, sin embargo, pueden ser clasificados como se puede ver en la figura siguiente.

2.1.3 Diseño Asistido por Computadora

Esta rama de la modelación matemática ha recibido poca atención excepto en el diseño estructural. Sin embargo, el beneficio potencial del uso de CAD es obvio cuando se considera la proporción de tiempo dedicado en las etapas de diseño por ejemplo:

Selección del tipo de proceso	5%
Diseño del proceso	10%
Diseño estructural	15%
Calculo de cantidades	25%
Preparación de dibujos	45%

La simulación y optimización pueden ayudar con el proceso de selección y de diseño pero en las últimas etapas, específicamente, en la preparación de dibujos es donde se puede ahorrar cantidad de trabajo.

Los pasos en el diseño asistido por computadora se pueden delinear brevemente como sigue:

1. Modelo de simulación de la unidad(es) de proceso para determinar sus dimensiones.
2. Datos de las coordenadas del sitio. Determinar su ubicación.
3. Diseño estructural de la unidad.
4. Cálculo de las coordenadas finales de cada unidad.
5. Cuantificación de concreto y acero.
6. Cuantificación de excavación, cimbra, acarreos, etc.
7. Preparación de dibujos o planos.

2.1.4 Recopilación de datos

En el proceso de modelación de la calidad del agua es necesario obtener datos de campo, este requisito debe ser tomado en cuenta cuando se formule el modelo. Hay dos puntos que hay que tener en cuenta:

- a. El tipo de estudio requerido para la construcción del modelo es fundamentalmente diferente de aquél que se requiere para una rutina de vigilancia. El último es esencialmente un monitoreo a largo plazo de manera espaciado, mientras que la construcción de modelos generalmente requiere una recopilación de grandes volúmenes de datos durante un período de tiempo limitado.
- b. Datos (o falta de Datos), probablemente determinan el éxito de la modelación. El tiempo y el esfuerzo necesario en la recolección de datos para calibración y validación es probable que exceda con mucho el tiempo invertido en el desarrollo del modelo. Por ejemplo, el problemas marítimos la relación recolección de datos a modelación puede ser más grande que 10:1.

2. 2 Modelación de Cinéticas o Reacciones

Muchos modelos de calidad de agua intentan simular cambios en la concentración de sustancias las cuales están en solución, solución coloidal o suspensión. Existen algunas sustancias que se consideran inertes por su concentración tal que se consideran inmutables

(excepto por dilución). Ellas se conocen como sustancias conservativas y a menudo se utilizan como trazadores.

Sin embargo, la mayoría de las sustancias en el agua cambian su concentración debido a procesos físicos, químicos y biológicos. Entender estos procesos es útil cuando se construyen modelos de calidad de sustancias no conservativas. Asimismo muchos de los procesos empleados en el tratamiento de agua y aguas residuales se basan en agentes biológicos (principalmente bacterias) por lo tanto, entender la cinéticas de crecimiento es útil en el diseño y operación.

2.2.1 Cinéticas de procesos químicos y físicos

No hay una división clara entre fenómenos químicos y físicos, así que todos los procesos que no son biológicos se consideran bajo este concepto.

2.2.1.1 Solución en equilibrio

Muchas reacciones químicas que se llevan a cabo en una solución son reversibles son reversibles hasta cierto punto y la reacción se lleva a cabo hasta que se alcanza un estado de balance o equilibrio químico de los procesos opuestos.

Para el caso en el cual el material A y B reaccionan para formar un producto (s) C y D, la ecuación de equilibrio se puede escribir así:



Donde A, B, C, y D son moléculas o iones
m, n, p, y q son coeficientes usados para balancear la ecuación.

De de la ley de Acción de Masa se puede demostrar que:

$$\frac{[aC]^p [aD]^q}{[aA]^m [aB]^n} = K \quad (2.4)$$

donde aC , etc, son actividades en mg/l (las actividades están relacionadas a la concentración por medio de $a = \gamma C$).

γ = Coeficiente de la actividad, y

C = Concentración

K = Constante característica de la actividad de equilibrio particular variando sólo con la Temperatura de la solución.

y es aproximadamente igual a la unidad para la mayoría de las soluciones de no-electrolitos y también para soluciones de electrolitos diluidas de manera que éstas puedan ser usadas en lugar de actividades en la ecuación anterior.

$$\frac{[C]^p[D]^q}{[A]^m[B]^n} = K \quad (2.5)$$

Esta ecuación es comúnmente usada en modelos de calidad del agua para simular reacciones reversibles.

2.2.1.2 Cinéticas Químicas

Las condiciones de equilibrio como la de la ley de Acción de masa no siempre ocurre en un ambiente natural o en los procesos de tratamiento de agua y/o aguas residuales. La velocidad de muchas reacciones es más lenta en relación a la advección física y a los procesos dispersivos. Comprender la dependencia del tiempo de la reacción es más útil que conocer la condición final de equilibrio.

La tasa de reacción depende no solamente de la sustancia particular involucrada sino también del estado físico del sistema. Los sistemas homogéneos se caracterizan porque todos las sustancias reactivas y productos de la reacción ocurren en el mismo estado físico. Los sistemas heterogéneos involucran reacciones entre sustancias en dos o más estados y la tasa de reacción puede depender de otros factores no tan sólo de la reacción química normal como la expresada por la ley antes mencionada.

2.2.1.3 Sistemas homogéneos

Suponiendo un sistema homogéneo bien mezclado, la manera en la cual la tasa de reacción puede variar con la concentración de alguna o todas las sustancias reactivas se denota por el orden de la reacción. Para la reacción:



La ecuación para la tasa de formación de P se puede escribir como:

$$\frac{d[P]}{dt} = k[A]^v [B]^w \quad (2.7)$$

donde K es la tasa constante con unidades 1/t , A y B son las concentraciones instantáneas. La tasa a la cual P se forma varía con el tiempo porque las reacciones A y B se reducen a medida en que las reacción progresa (figura 4.1 libro). En la figura anterior la forma de la curva depende del número de sustancias limitantes de la tasa de reacción.

A. Reacciones de orden cero:

La tasa de reacción es independiente de la concentración de las sustancias reactivas. Esto sucede con frecuencia en sistemas heterogéneos cuando factores tales como el área superficial disponible para la absorción limita la tasa de reacción.

Si en la reacción $A + B = P$, los exponentes v y w en la ecuación 2.7 son cero, entonces la tasa de cambio de concentración de cada reactivo puede ser representado por la ecuación:

$$-\frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = \frac{d[P]}{dt} = k \quad (2.8)$$

B. Reacciones de primer orden:

La tasa de reacción es proporcional a la concentración de uno de los reactivos. Para cualquiera:

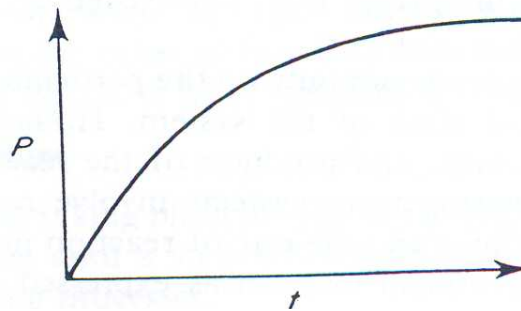
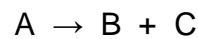


Figura 2.1 Cinéticas de Reacción (la forma de la curva depende del orden de la reacción) o bien,



Donde B está presente en exceso y solamente A tiene importancia, la tasa de reacción puede ser representada como sigue:

$$-\frac{d[A]}{dt} = k[A] \quad (2.9)$$

la cual se puede integrar para obtener:

$$[A] = [A_0]e^{-kt} \quad (2.10)$$

$[A_0]$, Concentración inicial en $t=0$

$[A]$, Es la concentración instantánea en el tiempo t y la cantidad de $[A]$ consumida en ese periodo de tiempo es:

$$[A_0] - [A] = [A_0](1 - e^{-kt}) \quad (2.11)$$

Sustituyendo $k_1=0.4343 k$ la ecuación 2.10 puede ser escrita en la forma:

$$[A] = [A_0]10^{-k_1 t}$$

o bien,

$$\log \frac{[A]}{[A_0]} = -k_1 t \quad (2.12)$$

k o k_1 pueden ser evaluados desde una gráfica de $\log[A]/\log[A_0]$ contra tiempo t , la cual debería dar una línea recta con pendiente k o k_1 (Figura 2.2) al hacer una prueba de mínimos cuadrados. Este método es útil para determinar si una reacción particular es de primer orden o no.

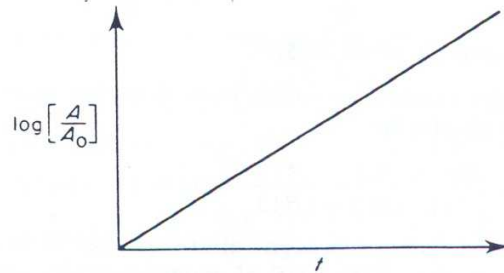


Figura 2.2 Gráfica semi-logarítmica de una reacción de primer orden

Los valores de k también se pueden ser determinar a partir del tiempo medio de vida del material reactivo inicial. Sustituyendo la concentración de vida media $[A_0]/2$ dentro de la ecuación 2.12:

$$\begin{aligned} \log_{10} 2 &= -k_1 t^{1/2} \\ k_1 &= 0.3/t^{1/2} \end{aligned} \quad (2.13)$$

Ejemplos de reacciones de primer son (1) el decaimiento de radio-isótopos; (2) las reacciones de pseudo primer orden de (a) desinfección de organismos en los cuales en los cuales el número de organismos destruidos por unidad de tiempo es proporcional al número de organismos restantes y (b) la hidrólisis de la azúcar de caña en una solución de agua de acuerdo a:



donde el agua está presente en una cantidad que su concentración no cambia significativamente durante el curso de la reacción. La oxidación de materia orgánica y muchas otras importantes reacciones caen dentro de esta categoría.

C. Reacciones de Segundo Orden

Se pueden identificar dos tipos de estas reacciones.



Donde las concentraciones de A y B afectan la tasa de reacción que pueden ser representadas como:

$$-\frac{d[A]}{dt} = k[A][B] = \frac{d[P]}{dt} \quad (2.15)$$

con ambos valores v y w =1, en la ecuación (2.7).



$$-\frac{d[A]}{dt} = k[A]^2 = \frac{d[P]}{dt} \quad (2.16)$$

con valores v=2 y w =0, en la ecuación (2.7).

Para la reacción de segundo orden en la cual A y B reaccionan, la expresión de la tasa integrada toma la forma:

$$\log \frac{[B_0]([A_0] - [A])}{[A_0]([B_0] - [B])} = k_1([A_0] - [B_0])t \quad (2.17)$$

A y B las concentraciones instantáneas son iguales en una reacción de segundo orden de este tipo. Un gráfico de la ecuación 2.15 contra el tiempo, proporcionará una línea recta con una pendiente igual a $k_1([A_0] - [B_0])$.

La mayoría de las reacciones de importancia en el ambiente se pueden aproximar por medio de las reacciones descritas anteriormente, sin embargo, es posible que se presenten reacciones de orden más alto y fraccionales. Muchas de las reacciones que se observan no son procesos simples sino un proceder en una serie de pasos o en competencia con otras reacciones, o en el que el proceso es fácilmente reversible. No es posible deducir el orden de la tasa de reacción limitante a partir de la estequiometría de la ecuación. El orden debe ser determinado experimentalmente.

D. Reacciones Complejas

Se pueden identificar tres clases de reacciones complejas:

1) Reacciones consecutivas



2) Reacciones reversibles



3) Reacciones en competencia



La determinación completa de la tasa patrón para reacciones complejas involucra la solución simultánea de las ecuaciones diferenciales de las cinéticas en cada uno de los pasos individuales.

Para reacciones consecutivas suponiendo tasas de primer orden:

$$-\frac{d[A]}{dt} = k_1[A] \quad (2.18)$$

$$-\frac{d[B]}{dt} = k_2[B] - k_1[A] \quad (2.19)$$

$$-\frac{d[C]}{dt} = k_2[B] \quad (2.20)$$

Al integrar las ecuaciones anteriores se obtiene:

$$[A] = [A_0]e^{-k_1 t} \quad (2.21)$$

$$[B] = [A_0] \left(\frac{k_1}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t} \right) + [B_0] e^{-k_2 t} \quad (2.22)$$

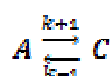
$$[C] = [A_0] \left(1 - \frac{k_2 e^{-k_1 t} - k_1 e^{-k_2 t}}{k_2 - k_1} \right) + [B_0] (1 - e^{-k_2 t}) + [C_0] \quad (2.23)$$

$[A_0]$, $[B_0]$ y $[C_0]$ son las concentraciones respectivas de $[A]$, $[B]$ y $[C]$ en el tiempo $t=0$.

Si $k_1 \ll k_2$ las reacciones se comportarán cinéticamente de una manera similar a una reacción de un solo paso.



Cuando el proceso para una reacción de primer orden es fácilmente reversible tal como:



la expresión para la tasa incluye las reacciones tanto hacia adelante y como inversas:

$$\frac{dB}{dt} = \frac{-dA}{dt} = k_{+1}[A] - k_{-1}[B] \quad (2.24)$$

en el equilibrio,

$$\frac{dB}{dt} = \frac{dA}{dt} = 0, \quad y$$

$$\frac{[A]}{[B]} = \frac{k_{-1}}{k_{+1}} = K \quad K = \text{constante de equilibrio} \quad (2.25)$$

Se pueden determinar relaciones comparables para otras reacciones complejas de órdenes diferentes.

Efecto de la temperatura

Las velocidades de reacción generalmente aumentan con el aumento de temperatura. Algunas serán aproximadamente el doble por cada incremento de 10°C.

La ecuación de Van't Hoff-Arrhenius se puede usar para predecir el efecto de la temperatura sobre el coeficiente de la tasa de reacción.

$$\frac{d(\log k)}{dT} = \frac{E}{RT^2} \quad (2.26)$$

E = energía de activación (calorías) una constante característica de la reacción

R = constante de los gases (Calorías por ° C)

T = temperatura absoluta.

Integrando (2.26) entre los límites T_0 y T obtenemos:

$$\log \frac{k}{k_0} = \frac{E(T-T_0)}{RTT_0} \quad (2.27)$$

donde k , k_0 son constantes de velocidad de T y T_0 , respectivamente.

En los sistemas acuáticos con un cambio pequeño de temperatura, TT_0 no cambia significativamente y se puede suponer que E/RTT_0 es constante. La ecuación (2.27) se puede aproximar por:

$$k = k_0 e^{C_k(T-T_0)} \quad (2.28)$$

donde C_k es la temperatura característica. A menudo, la forma empírica utilizada es:

$$k = k_0 \theta^{(T-T_0)} \quad (2.29)$$

donde θ es el coeficiente de temperatura. Tomando los dos primeros términos de la

ecuación e^X en su forma desarrollada (2.28) se puede aproximar a:

$$k = k_0(1 + C_k(T - T_0)) \quad (2.30)$$

2.2.1.4 Sistemas heterogéneos

En los sistemas heterogéneos, la velocidad de reacción química tal como se describió en el sistema homogéneo se complica aún más por los procesos físicos que provienen de las fronteras de la fase de mezclado incompleto. A concentraciones bajas, el sistema puede ser dependiente de la concentración, pero a altas concentraciones la discontinuidad de la fase puede controlar las reacciones.

Se pueden identificar tres fenómenos: (a) la ósmosis, (b) difusión, (c) adsorción.

(a) La ósmosis se define como el paso de disolvente a través de una membrana de una solución diluida a otra más concentrada. La velocidad de movimiento de moléculas a través de la membrana es una función de las concentraciones que haya en cada lado. Un movimiento neto se lleva a cabo hasta que las dos concentraciones se igualan o hasta que se alcance el equilibrio por la presión externa.

(b) La difusión es la migración no advectiva de una sustancia en solución o suspensión en respuesta a un gradiente de concentración de la sustancia a través de otra sustancia. Es un proceso natural básico que representa la mayor parte del transporte que tiene lugar a nivel molecular.

El mecanismo se describe por la primera ley de Fick, que establece que la velocidad de transporte de masa por difusión a través de una unidad de área es proporcional al gradiente de concentración de la sustancia difusora.

$$N_x = -D_m \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.31)$$

N_x , es la tasa de transporte de masa a través de un elemento de área normal a x
 $\frac{\partial C}{\partial x}$, es el gradiente de concentración de la fase de difusión en la dirección x

D_m , es el coeficiente de difusión molecular que es proporcional a la temperatura absoluta e inversamente proporcional al peso molecular de la fase de difusión y a la viscosidad de la fase de dispersión.

La segunda Ley de Fick describe la tasa de cambio de la concentración de la fase de difusión en un elemento de la fase de dispersión.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_m \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.32)$$

o en tres dimensiones:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_m \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \quad (2.33)$$

(c) Adsorción, ésta se produce cuando las moléculas en solución rompen la superficie de un absorbente sólido y se adhieren a la superficie. A bajas concentraciones de materia a absorber el sistema puede ser dependiente de la concentración. En estas condiciones la velocidad de adsorción puede derivarse como sigue:

$$\frac{dc}{dt} = k\phi(c) \quad (2.34)$$

c , es la concentración de la sustancia en la solución

t , es el tiempo de exposición

$\phi(c)$, es una función de la concentración en la solución

k , es el coeficiente de la tasa de reacción

Si se supone que $\phi(c)$ pueda ser expresado como $C_0 - C$ la concentración adsorbida y k que pueda ser modificada para permitir la caída de la respuesta de adsorción durante el curso de la exposición, se obtiene:

$$k = \frac{k_0}{1+rt}$$

k_0 , velocidad en el instante $t = 0$

r , coeficiente de retraso

Integrando la ecuación (2.34) y sustituyendo $\phi(c)$ y k :

$$\frac{c}{c_0} = [1 - (1 + rt)^{-k_0/r}] \quad (2.35)$$

A mayores concentraciones de sustancia en solución la tasa de deposición de las moléculas en una superficie sólida uniforme que puede describirse por la isoterma de Langmuir, que supone la formación de una capa mono-molecular.

Sea x la fracción de la superficie total sólida ocupada por moléculas, $(1 - X)$ la superficie dejada libre en cualquier momento en el tiempo. La velocidad a la cual las moléculas son adsorbidas es proporcional al área de superficie disponible:

$$\frac{dN_a}{dt} = k_1 C(1 - X)$$

y la tasa o velocidad de desadsorción es proporcional a la superficie cubierta:

$$\frac{dN_d}{dt} = k_2 X$$

donde k_1 y k_2 son las tasas de adsorción y desadsorción. N_a y N_d son los números de moléculas adsorbidas y desadsorbidas. El equilibrio dinámico entre moléculas libres y adsorbidas puede ser expresada por :

$$k_1 C(1 - X) = k_2 X \quad (2.36)$$

Reordenando la ecuación (2.36) se obtiene:

$$X = \frac{k_1 C}{k_2 + k_1 C} \quad (2.37)$$

Si las moléculas adsorbidas sufren una transformación química en una tasa proporcional a la densidad de esta superficie entonces,

$$\text{Tasa de transformación} = kX = \frac{k \cdot b \cdot C}{1 + bC}$$

$$b = \frac{k_1}{k_2}$$

Para valores pequeños de C la cantidad adsorbida es linealmente proporcional a C, mientras que para valores grandes de C la cantidad adsorbida es independiente de C.

2.2.1.5 Reacciones enzimáticas

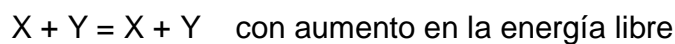
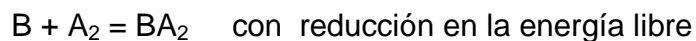
Las reacciones químicas por las cuales las sustancias se sintetizan en materiales celulares son buenos ejemplos de reacciones complejas que tienen lugar en un ambiente heterogéneo. La transformación de moléculas orgánicas en la síntesis de materiales celulares dependerá de la velocidad de difusión de material hacia la pared celular, la tasa de adsorción a la pared celular y las diferentes tasas de reacción en cada etapa del complejo cambio dentro de la pared celular. Se forman compuestos intermedios los cuales no tienen ninguna función celular distinta al de la apertura de una vía a la molécula final de las celdas y de una manera similar muchas reacciones enzimáticas tienen lugar antes de que una sustancia orgánica compleja sea simplificada y retornada a niveles orgánicos más estables.

La resolución de estas reacciones complejas en fases simples ayuda a determinar el paso limitante de tasa global que permita controlar eficazmente el crecimiento celular. Vale la pena destacar tres ventajas de la resolución en etapas.

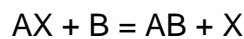
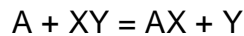
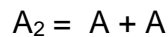
(1) Los pasos individuales simples se pueden influenciar independientemente por condiciones tales como temperatura y concentración, lo que conduce a una gran diversidad

de productos en varias proporciones que dan una apariencia de gran complejidad. La resolución en etapas reducirá la complejidad natural evidente para el nivel inherente en el sistema.

(2) La existencia de intermedios transitorios hace posible el acoplamiento de las reacciones que parecen ser independientes desde un punto de vista estequiométrico, por ejemplo,



Si la reducción de la energía libre en el primero es superior al aumento de este último, entonces las reacciones se pueden acoplar como sigue:



(3) Los pasos individuales pueden estar separados espacialmente y en un momento dado en el tiempo no sólo las concentraciones de los compuestos intermedios existirán sino también se producirán gradientes de concentración. El curso general de la modificación dependerá de la relación espacio-tiempo de muchas maneras.

2.2.1.6 Cinéticas de Crecimiento

La cinéticas de crecimiento son bastante más complejas que las de las reacciones químicas, especialmente cuando se trata de organismos como invertebrados y peces. Afortunadamente, el crecimiento del grupo más importante de micro-organismos: las bacterias puede ser representado simplemente y esas cinéticas con modificaciones adecuadas se pueden usar para describir el crecimiento de algas. Para las bacterias, la relación fundamental se da entre la tasa de crecimiento y la concentración de sustrato. Esto se muestra en la figura 2.3 y se puede expresar como:

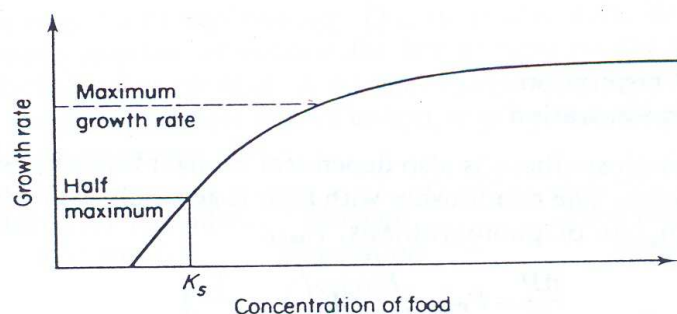


Figura 2.3 Relación entre la tasa de crecimiento de las bacterias y la concentración de los alimentos.

Y matemáticamente como:

$$\mu = \mu_{max} \left(\frac{S}{S+K_s} \right) \quad (2.38)$$

donde,

μ , Tasa de crecimiento

S, Concentración del sustrato

K_s , Tasa de concentración media tal como se define en la figura 2.3

La otra hipótesis es que hay una relación simple entre el crecimiento y la utilización del sustrato la cual se define por el rendimiento o producción.

$$\text{Rendimiento } Y = \frac{\text{Peso de las bacterias formadas}}{\text{peso de las bacterias utilizadas}}$$

$$\frac{dX}{dt} = -Y \frac{ds}{dt} \quad (2.39)$$

Estos dos suposiciones simplificadas no son totalmente válidas y en general se modifican cuando se aplican en algo específico.

Para las algas, la misma relación entre la tasa de crecimiento y la concentración de nutrientes se ha utilizado pero la conexión se hace con un nutriente inorgánico tal como el nitrógeno, fósforo o silicio. El proceso fundamental que controla el crecimiento es el equilibrio entre la fotosíntesis y la respiración. Este último se describe fácilmente como una función de la biomasa:

$$\frac{dR}{dt} = R * A \quad (2.40)$$

donde:

R, tasa de respiración

A, concentración de algas

pero la tasa de la fotosíntesis también depende de la intensidad de luz que a su vez varía con el tiempo y la profundidad. La relación con la luz generalmente se expresa en términos de la tasa máxima de fotosíntesis, $P_{m\acute{a}x}$:

$$\frac{dP}{dt} = P_{m\acute{a}x} \frac{I}{I_{opt}} \exp \left(1 - \frac{I}{I_{opt}} \right) \quad (2.41)$$

donde:

I, intensidad de luz

I_{opt} , intensidad luminosa correspondiente a $P_{m\acute{a}x}$.

La intensidad de la luz disminuye con la profundidad de una manera exponencial a una tasa que depende de la turbidez, de esa manera se da:

$$I(z + h) = I(z) \exp(-Kh)$$

$I(z)$ y $I(z+h)$, son las intensidades de la luz a profundidades z y $z+h$ respectivamente.

La tasa de mortalidad de las algas es a menudo representado por la tasa de sedimentación ya que cuando las algas mueren, dejan de flotar. La sedimentación es también un problema para algunas algas vivas, que tienden a sedimentarse salvo que sean devueltos a la superficie por advección.

La sedimentación puede ser representada como una función de la tasa de reposición de las partículas orgánicas.

$$\text{Tasa de sed} = f(\text{concentración de algas})$$

donde f puede tener valores alrededor de 1-10 % por día.

Otras pérdidas a la población de algas se debe a la depredación. Donde varias especies de presa son consumidos por el mismo depredador que come indiscriminadamente pero sólo come una fracción de las especies de presa A_i que encuentra, por lo tanto:

$$\frac{dA_i}{dt} = \mu_i g A_i B \quad (2.42)$$

donde:

μ_i , fracción de la especie i ,

A_i , biomasa de las especies presa i ,

B , biomasa de los depredadores

También la cinética de crecimiento de otros grupos de organismos como los invertebrados y peces algunas veces es necesario que se representen. Esto se hace generalmente dividiendo la población en un número de cohortes (o grupos por edad) tomando en cuenta su fecundidad y sus posibilidades de supervivencia. Una matriz de estos valores se puede usar entonces para multiplicar un vector en cada cohorte para determinar el tamaño de la población futura y la composición de la edad:

$$\begin{matrix} \begin{bmatrix} f_1 & f_2 & f_3 \\ p_1 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} & = & \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} & (2.43) \\ A & V_1 & & V_2 \end{matrix}$$

Matriz de fecundidad
y supervivencia

Vector de
población
actual

Vector de
Nueva población

Los valores de la fecundidad f_1 , f_2 y f_3 y las probabilidades de p_1 y p_2 dependen de la densidad, por ello la población necesita ser incorporada al cálculo:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0.8F & 0.5F \\ 0.35 & 0 & 0 \\ 0 & 0.4S & 0 \end{bmatrix}$$

donde:

$$F = \frac{a}{b + N_t}$$

y

$$S = \frac{1}{1 + e^{N_t/c}}$$

N_t es la densidad de población en un tiempo t ,
 a , b , y c , son constantes.

2.3 TEORÍA DEL REACTOR

En el tratamiento de aguas residuales hay una serie de procesos tales como la unidad de sedimentación, aireación, etc, que tienen lugar dentro de los tanques o estructuras similares que pueden considerarse como reactores químicos o bioquímicos. Igualmente, las secciones de un estuario, un lago o un tramo de un río puede tratarse conceptualmente de la misma manera ". La Teoría del reactor por lo tanto, puede ser aplicada ampliamente en la modelación de agua contaminada y su control.

2.3.1 Tipos de Reactor

La relación entre la calidad de agua entrante y saliente está determinada por las características de dispersión del reactor y la cinética de las reacciones. Los dos tipos básicos de las características de la dispersión son:

(a) flujo tapón o pistón donde el líquido fluye a través del reactor sin que se lleve a cabo ninguna mezcla;

(b) Completamente mezclado donde el líquido que entra en el reactor instantáneamente se mezcla con todo el contenido.

Esto pueden ser ilustrado por el comportamiento de la conservación de un trazador inyectado como un pulso en el flujo entrante en un reactor. Las concentraciones del trazador en la salida formas típicas, como se muestra en la figura 2.4.

En la práctica, se encuentra que los reactores están entre las dos clases antes descritas en diversos grados intermedios. Las características de dispersión de esos tipos intermedios se representan más fácilmente como una serie de reactores completamente mezclados. El número de reactores en serie se puede obtener de la siguiente ecuación:

$$E = \frac{C}{C_0} = \frac{j^j \theta^{j-1}}{(j-1)!} \exp(-j\theta) \quad (2.44)$$

con una media de:

$$\theta_c = 1$$

y varianza:

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{1}{j}$$

$$\bar{t} = \frac{\sum t_c}{\sum C}$$

$$\sigma_t^2 = \frac{\sum t_c^2}{\sum C} - \frac{(\sum t_c)^2}{(\sum C)^2}$$

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{\sigma_t^2}{(\bar{t})^2}$$

donde:

C, concentración del efluente

C₀, concentración inicial

$\theta = t/t$

j, número de tanques o reactores de igual tamaño

t, tiempo

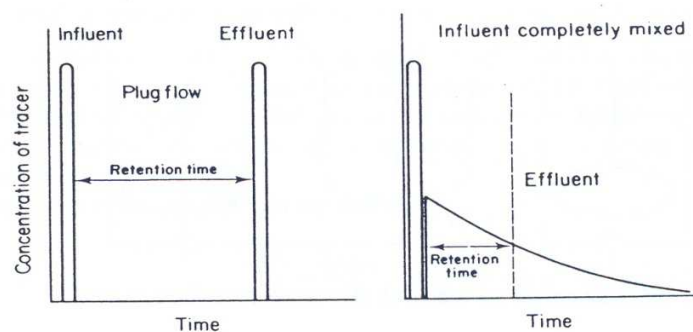


Figura 2.4 Distribución de la salida de los reactores de un trazador conservativo en flujo pistón y de flujo completamente mezclado.

Alternativamente, la salida ideal puede ser expresada por medio del número de dispersión. Esto se basa en la idea de representar un reactor con cierto grado de dispersión a través de un reactor ideal equivalente con flujo pistón multiplicado por un factor de corrección:

$$V_{real} = V_{flujo\ pistón} * (\text{factor de corrección})$$

donde el factor de corrección es una función de:

- (i) La intensidad del mezclado;
- (ii) La geometría del reactor;
- (iii) Tasa de reacción.

La intensidad de mezclado se expresa generalmente por la expresión adimensional, D/uL , donde:

D , Coeficiente de dispersión

u , velocidad

L , longitud del reactor

Este es el recíproco del número de Peclet.

2.3.2 Reactores con Entradas de Flujo Tipo Pistón

Reactores con entrada de flujo pistón puede ser visualizados como una serie de volúmenes de líquido aislados que son contiguos con volúmenes adyacentes pero que no se mezclan con ellos, es decir, como una serie de vagones en un tren.

El cambio de concentración durante el tiempo de retención en el reactor, por lo tanto, depende únicamente de los procesos dentro de los contenedores individuales, y por lo tanto puede ser representado por un reactor discontinuo. Por ejemplo, las cinética bacterianas y el sustrato en un reactor discontinuo se muestra en la figura 2.5.

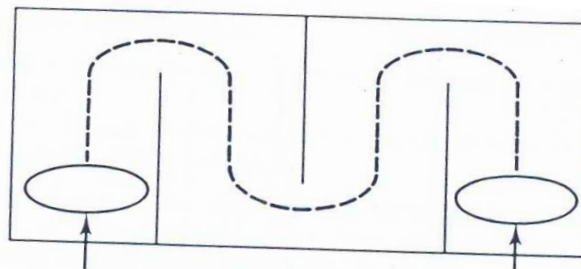


Figura 2.5 Movimiento de material a través de un reactor de flujo tipo pistón

Matemáticamente, estos cambios pueden estar dada por la ecuación (2.45).

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{max} \left(\frac{S}{S+K_s} \right) X - KdX \quad (2.45)$$

donde,

X, Concentración bacteriana
 μ , Tasa de crecimiento
 S, concentración del sustrato
 Kd, tasa de mortalidad de las bacterias

y la cinética del sustrato por la ecuación (2.46) :

$$\frac{ds}{dt} = \frac{1}{Y} \mu_{max} \left(\frac{S}{S+K_s} \right) X \quad (2.46)$$

donde:

Y, es el rendimiento.

Los reactores de flujo tipo pistón sólo tienen cambios químicos que también se pueden describir de manera simple por medio de una ecuación apropiada de cero, primer o segundo orden.

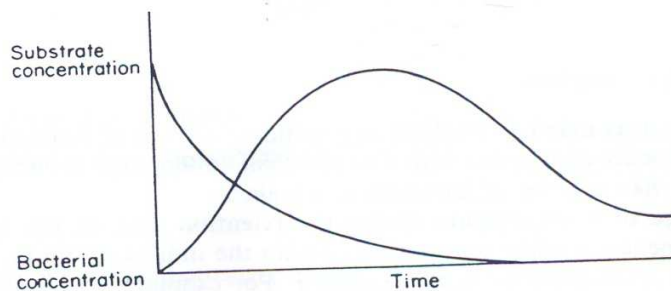


Figura 2.6 Cinéticas en un sistema por lotes.

2.3.3 reactores de mezcla completa

Los reactores de mezcla completa son ligeramente más complicados porque las bacterias y los sustratos continuamente se están añadiendo y sustrayendo. Se describen mejor por un enfoque de balance de masa. Esto se puede ilustrar considerando un reactor de mezcla completa en el que un componente está experimentando una descomposición de primer orden.

El modelo de balance de masa se puede escribir como:

$$\frac{dC_2}{dt} = \frac{Q_1 C_1}{V} - \frac{Q_2 C_2}{V} - K C_2 \quad (2.47)$$

Tasa de variación de la concentración= entrada de flujo - salida de flujo - Tasa de descomposición.

Cuando las bacterias están implicadas se necesitan dos balances, uno relativo a los organismos y otro que describa el sustrato. La tasa neta de aumento de la concentración de organismos está dada por el simple balance:

$$\frac{dX}{dt} = \mu X - \frac{Q}{V} X - KdX \quad (2.48)$$

Por lo tanto:

$\frac{dX}{dt} > 0$	para $\mu > \left(\frac{Q}{V} + Kd\right)$	Aumenta
$\frac{dX}{dt} = 0$	para $\mu = \left(\frac{Q}{V} + Kd\right)$	Estado permanente
$\frac{dX}{dt} < 0$	para $\mu < \left(\frac{Q}{V} + Kd\right)$	Decrece

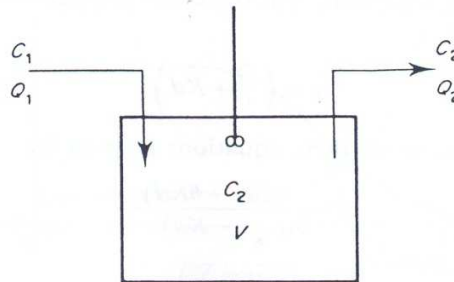


Figura 2.7 Modelo de balance de masa de un reactor con flujo completamente mezclado con alguna reacción.

El cambio en la concentración de organismos está relacionada al balance del sustrato por:

$$\mu = \mu_{max} \left(\frac{S}{S+K_s} \right) \quad (2.49)$$

y de la misma manera el balance del sustrato está acoplado al balance del organismo. El balance del sustrato se puede expresar de la siguiente manera:

$$\frac{dS_2}{dt} = \frac{Q}{V} * S_1 - \frac{Q}{V} * S_2 - \frac{\mu X}{Y} \quad (2.50)$$

Sustituyendo μ , los dos balances de masa se pueden escribir así:

$$\frac{dX}{dt} = X \left[\mu_m \left(\frac{S_2}{K_s + S_2} \right) - \frac{Q}{V} - Kd \right] \quad (2.51)$$

$$\frac{dS_2}{dt} = \frac{Q}{V} (S_1 - S_2) - \frac{\mu_m X}{Y} \left(\frac{S_2}{K_s + S_2} \right) \quad (2.52)$$

A partir de las ecuaciones anteriores se nota que si S_1 , Q y V son constantes y que Q/V no excede un valor crítico entonces se alcanzará un estado permanente en el cual:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{dS}{dt} = 0$$

La tendencia para este estado permanente se alcanza como se explica a continuación. Inicialmente X es muy pequeña por tanto:

$$S_2 \approx S_1, \text{ y}$$

$$\mu > \left(\frac{Q}{V} + Kd \right)$$

La concentración de organismos por lo tanto aumentará provocando una disminución de S_2 , por lo que eventualmente:

$$\mu = \left(\frac{Q}{V} + Kd \right)$$

La solución del estado permanente a estas ecuaciones esta dado por:

$$\bar{S} = \frac{K_s(1+\theta Kd)}{\theta(\mu_{\max}-Kd)-1} \quad (2.53)$$

$$\bar{S} = \frac{Y(S_1-S_2)}{1+\theta Kd} \quad (2.54)$$

donde

$$\theta = \frac{Q}{V}$$

El efecto de variación en las condiciones de la salida de flujo del reactor puede considerarse en términos de caudal y la concentración del caudal de entrada. El aumento en el caudal reduce el tiempo de retención remueve más organismos del reactor e inicialmente incrementa el nivel del sustrato. La tasa de crecimiento aumenta debido al incremento del sustrato y restaura la concentración bacteriana a su nivel anterior. Estos cambios se ilustran gráficamente en la figura 2.8. Si se grafican en las escalas adecuadas las curvas para las bacterias y el sustrato son imágenes espejo. La figura 2.8 también muestra el posible límite del estado permanente, la tasa de dilución ($D = Q / V$), más la tasa de mortalidad (Kd) cercana a la tasa de crecimiento máximo. Los valores críticos a los cuales se produce el lavado es gran importancia. El valor de la tasa de dilución D_c es igual al valor más alto posible de la tasa de crecimiento μ que se alcanza cuando $S_1 = S_2$. Esta dado por la ecuación:

$$Dc = \mu_m \frac{S_1}{K_s + S_1} - Kd \quad (2.55)$$

Cuando

$$S_1 \gg K_s, \text{ lo cual es usual entonces } D_c = \mu_{\max}.$$

El efecto de diferentes concentraciones de sustrato en el influente hacia un reactor operado a diferentes tasas de dilución se muestra en la figura 2.9. Se puede ver que a una tasa de dilución determinada, por abajo de D_c , la concentración de bacterias es casi proporcional a S_1 , pero que la concentración del sustrato del efluente es independiente de S_1 , es decir, para un valor dado de D la concentración de S_2 llega a un equilibrio tal que $\mu = D + Kd$ y esto es independiente de S_1 . La curva X-D, recorre verticalmente los cambios en S_1 . También la pendiente de la curva X cerca D_c es menos pronunciada para valores bajos de S_1 .

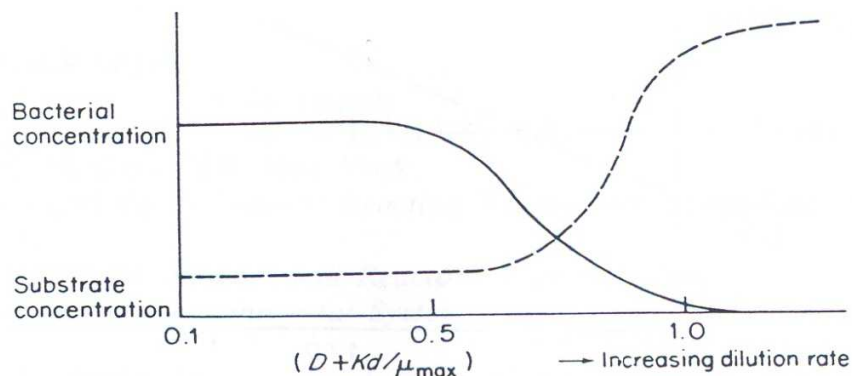


Figura 2.8 Efecto de incrementar la tasa de dilución en un reactor con flujo completamente mezclado

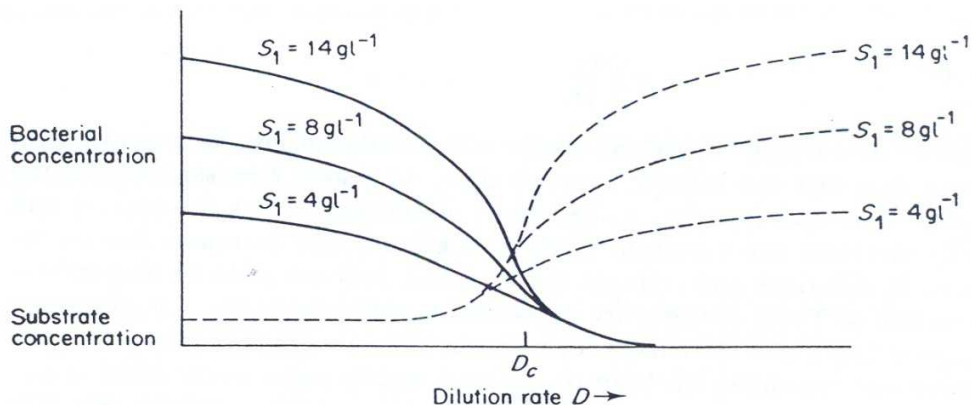


Figura 2.9 Efecto del cambio del gasto de entrada en la concentración del sustrato sobre un reactor con flujo completamente mezclado.

Un examen de las ecuaciones anteriores muestran que el factor importante, no es el valor absoluto de S_1 , sino la relación S_1 / K_s . Cuanto mayor sea esta relación, mayor es la fracción de sustrato total que puede ser consumida sin una disminución apreciable de la tasa de crecimiento específico. Por lo tanto, si S_1 / K_s se incrementa, la concentración de organismos se mantiene cerca del valor máximo posible de D . En la modelación de las

cinéticas de reactores completamente mezclados es importante ser capaz de determinar los valores de la tasa máxima de crecimiento, tasa de mortalidad, rendimiento y coeficiente de Michaelis-Menten. Éstos pueden ser obtenidos gráficamente partir de datos experimentales mediante el siguiente procedimiento:

(a) Dibujar la función $(S_1 - S_2) / X$ contra el recíproco de la tasa de dilución. Esto debe dar una línea recta, la pendiente de la misma es K_d / Y , cuyo origen en la vertical es $1 / Y$ como se muestra en la figura 2.10.

(b) Graficar la función $\theta / (1 + \theta K_d)$ contra el recíproco de S_2 . Esto debería dar una línea recta cuya pendiente es K_s / μ_{max} y cuyo origen es $1 / \mu_{max}$.

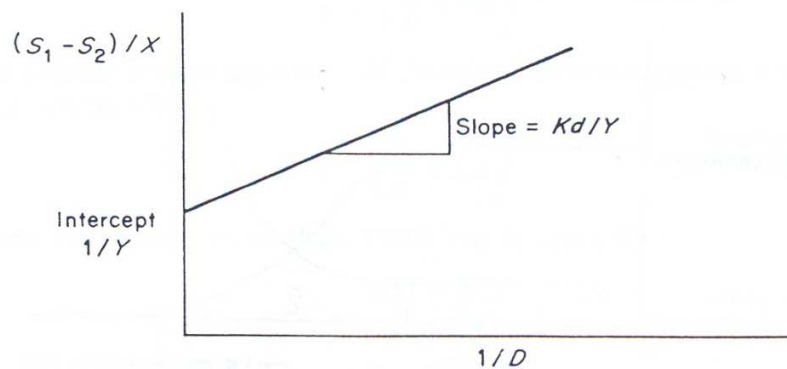


Figura 2.10 Método gráfico para estimar el rendimiento y la tasa de mortalidad a partir de experimentos continuos de cultivo.

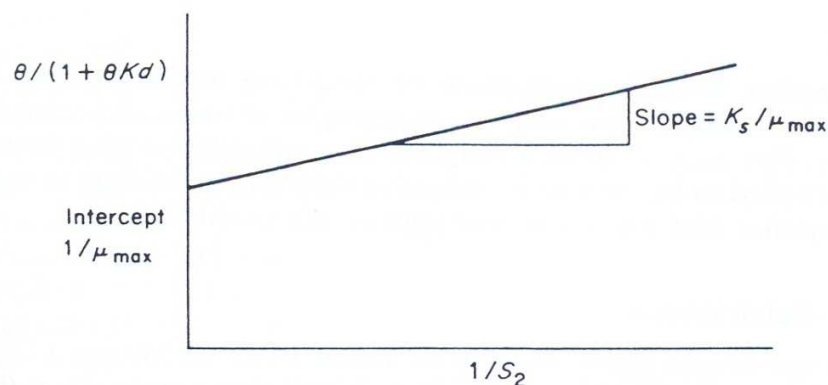


Figura 2.11 Método gráfico para estimar la tasa máxima de crecimiento, K_s .

En el estado permanente:

$$D = \mu_{max} \left(\frac{S_2}{K_s + S_2} \right) = \frac{1}{\theta} \quad (2.56)$$

que puede reescribirse como

$$\frac{1 + \theta K_d}{\theta} = \mu_m \left(\frac{S_2}{K_s + S_2} \right) \quad (2.57)$$

que puede reordenarse para obtener:

$$\frac{\theta}{1 + \theta K_d} = \left(\frac{k_s}{\mu_{max}} \right) \left(\frac{1}{S_2} \right) + \frac{1}{\mu_{max}} \quad (2.58)$$

Como se muestra en la figura 2.11 una gráfica de $\theta / (1 + \theta K_d)$ contra el recíproco de S_2 da una línea recta, cuya pendiente es K_s / μ_{max} y la intersección vertical es igual a $1 / \mu_{max}$.

3. APLICACIÓN DE LA MODELACIÓN DE CINÉTICAS A UN CUERPO DE AGUA SOMERO

En los capítulos anteriores hemos visto que dependiendo de la información disponible o de la necesidad de conocer la evolución de ciertos procesos se puede implementar un modelo de calidad de agua, desde un modelo simple con pocas cinéticas reaccionando de manera lineal hasta complejas cinéticas no lineales.

También se pone de manifiesto que un modelo hidrobiológico puede ser muy complejo, y una parte de ello es la poca información disponible y que no es generalizable o aplicable a otros cuerpos de agua.

Cómo este estudio está enfocado hacia la implementación de un modelo hidrobiológico en un software CFD comercial. Se llevó a cabo una serie de ejercicios numéricos consistentes en reproducir los resultados obtenidos al aplicar un esquema numérico (lagrangiano, elemento finito) diferente para la modelación de los especies en la que una variable depende de la otra en una forma no lineal.

3.1 VERIFICACIÓN DEL SOFTWARE UTILIZADO

Se pretende echar a andar el modelo hidrobiológico en el software CFD Flow-3D. En el cual se resuelven las ecuaciones de Navier-Stokes en coordenadas cartesianas mediante el método del volumen finito en mallas estructuradas. La superficie libre es capturada mediante el método true-VOF (Volume of fluid), el cual tiene mejoras importantes en comparación con el método VOF. Tiene implementados varios modelos de turbulencia.

Las pruebas numéricas se muestran en dos grandes partes generales. En la primera parte se trata de reproducir un ejemplo numérico, lo cual se logra con éxito y en la segunda, se muestra la aplicación de la modelación de dos especies en un lago artificial somero.

3.1.1 Modelación Unidimensional de dos Cinéticas sin crecimiento de biomasa de primer orden

Se modelaron dos ecuaciones de la forma:

$$\begin{aligned}\frac{dC_1}{dt} &= -0.01C_1 \\ \frac{dC_2}{dt} &= -0.05C_2\end{aligned}\quad (2.59)$$

Condiciones iniciales son: $C_{1t=0} = 0 \text{ mg/l}$, $C_{1t>0} = 10 \text{ mg/l}$,

Condiciones de frontera: $C_{1x=1} = 0 \text{ mg/l}$, $C_{1x=100} = 0 \text{ mg/l}$,

Parámetros físicos: *longitud total* = 100 m, $k_1 = -0.01$, $D=0.2 \text{ m}^2/\text{día}$

Los resultados obtenidos se muestran en las gráficas siguientes.

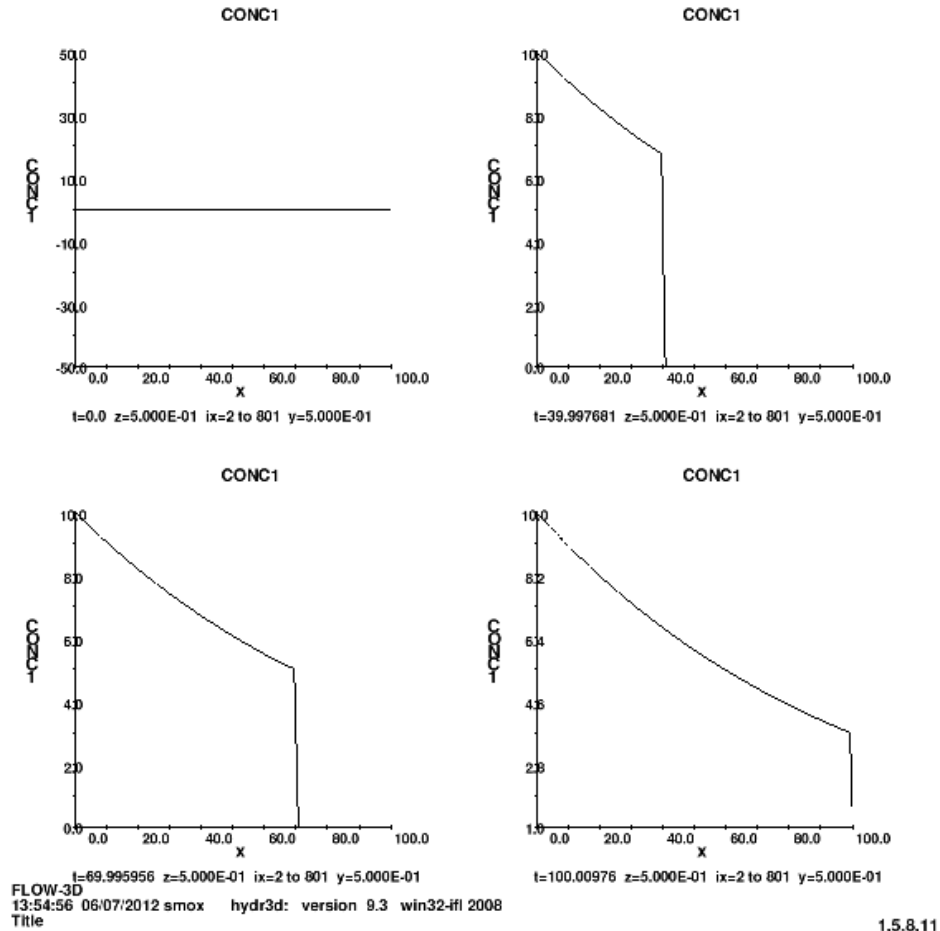


Figura 3.1 Desarrollo del comportamiento de la especie C_1 a través del tiempo.

Condiciones iniciales son: $C_2_{t=0} = 0 \text{ mg/l}$, $C_2_{t>0} = 3 \text{ mg/l}$,

Condiciones de frontera: $C_2_{x=1} = 0 \text{ mg/l}$, $C_2_{x=100} = 0 \text{ mg/l}$,

Parámetros físicos: longitud total = 100 m, $k_2 = -0.05$, $D=0.2 \text{ m}^2/\text{día}$

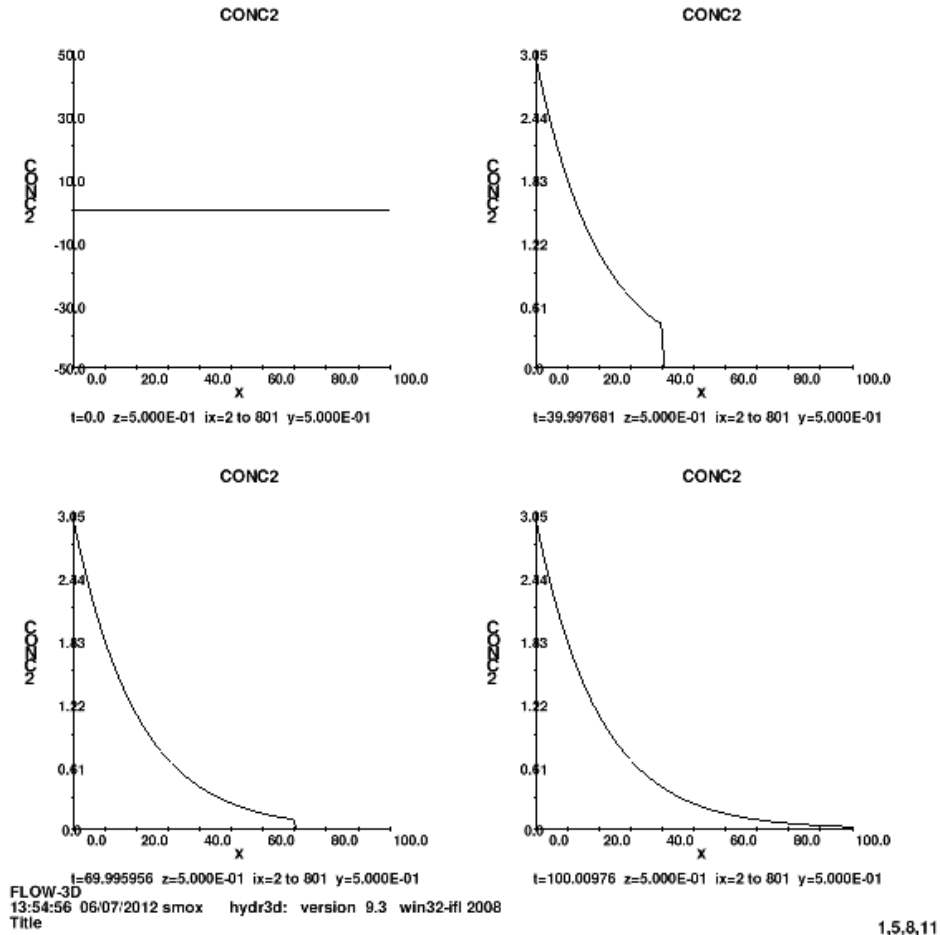


Figura 3.2 Desarrollo del comportamiento de la especie C_2 a través del tiempo.

Cómo prevé la teoría, las curvas de decaimiento para C_2 son más pronunciadas que para C_1 , pues k_2 es mayor que k_1 y en este caso k_1 y k_2 son las pendientes de las curvas, respectivamente.

3.1.2 Modelación Unidimensional del acoplamiento de dos Cinéticas sin crecimiento de biomasa linealmente dependientes

$$\frac{dC_1}{dt} = -0.025C_1^1C_2^{1.5}$$

$$\frac{dC_2}{dt} = -0.025C_1^{0.5}C_2^1 \quad (2.60)$$

Condiciones iniciales son: $C_{1,t=0} = 0 \text{ mg/l}$, $C_{1,t>0} = 10 \text{ mg/l}$,

Condiciones de frontera: $C_{1,x=1} = 0 \text{ mg/l}$, $C_{1,x=100} = 0 \text{ mg/l}$,

Parámetros físicos: longitud total = 100 m, $k_1 = -0.025$, $D=0.2 \text{ m}^2/\text{día}$

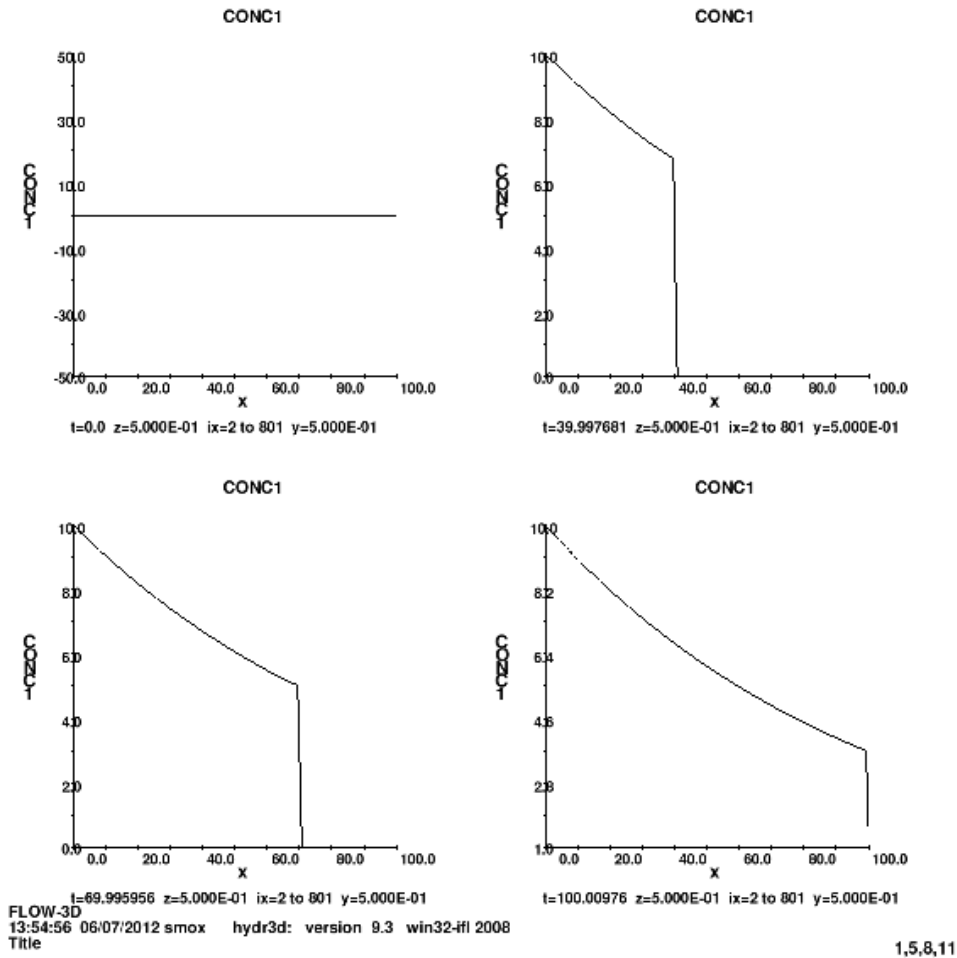


Figura 3.3 Desarrollo del comportamiento de la especie C_1 a través del tiempo, en el caso de especies linealmente dependientes, ecuaciones (2.60).

Condiciones iniciales son: $C_2_{t=0} = 0 \text{ mg/l}$, $C_2_{t>0} = 3 \text{ mg/l}$,

Condiciones de frontera: $C_2_{x=1} = 0 \text{ mg/l}$, $C_2_{x=100} = 0 \text{ mg/l}$,

Parámetros físicos: longitud total = 100 m, $k_1 = -0.025$, $D=0.2 \text{ m}^2/\text{día}$

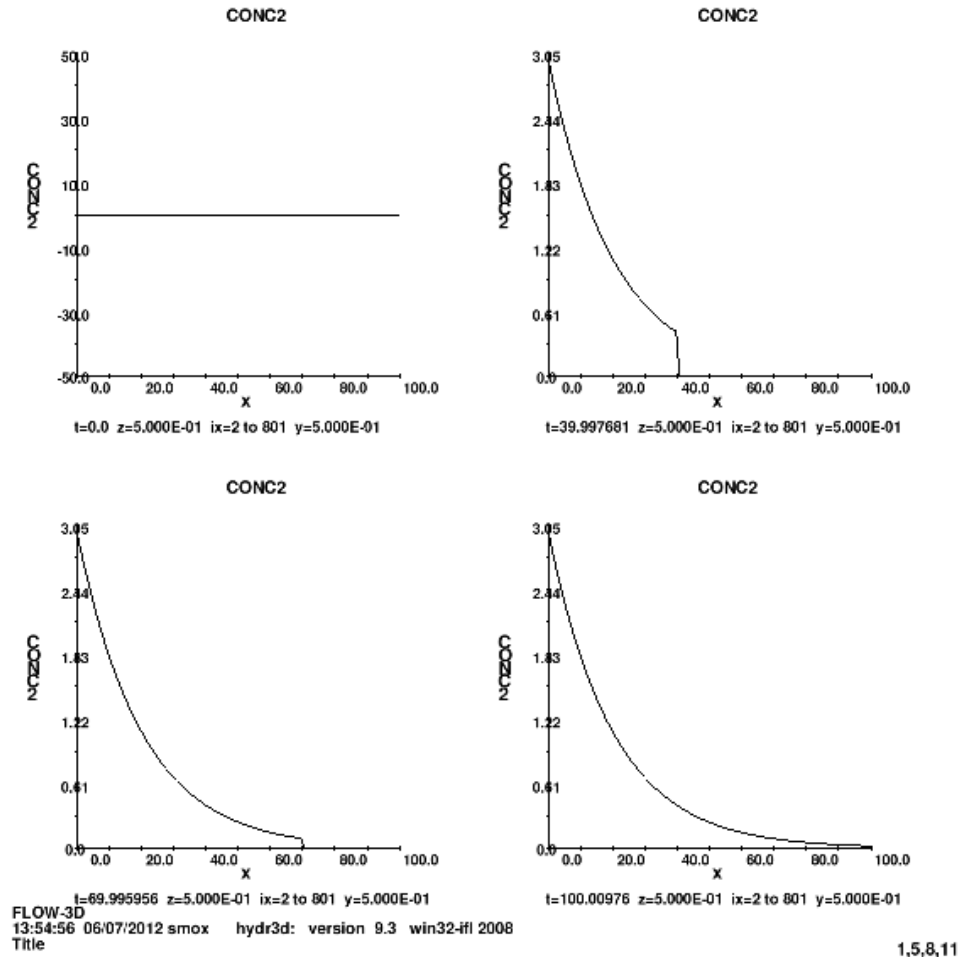


Figura 3.4 Desarrollo del comportamiento de la especie C_2 a través del tiempo, en el caso de especies linealmente dependientes, ecuaciones (2.60).

En los casos anteriores se utilizó el modelo químico que el software Flow3D trae por default, se activa mediante configurando $ICHM=1$. Las especies se activan en el apartado `physics>scalars`.

Una ecuación debe estar definida para cada especie participante (n_4) en las reacciones. Las ecuaciones se definen en la lista de variables. Los coeficientes de las tasas de reacción $ARATE(n_1)$, la matriz de correspondencia $ICOEFF(n_2, n_3)$ y el arreglo de potencias correspondencia $DD(n_2, n_3, n_4)$, donde n_1 es el índice de la tasa de coeficientes, n_2 es el índice de la ecuación, n_3 es el índice del término en la ecuación n_2 y n_4 es el índice de la especie.

$ARATE(n_1)$ es una lista de los coeficientes de las tasas de reacción para todas las reacciones cinéticas. Los coeficientes de reacción son siempre positivos, pero el signo

enfrente de un coeficiente pueden ser positivo o negativo dependiendo de qué signo tenga el arreglo ICOEFF(n2,n3). ICOEFF(n2,n3) establece cual coeficiente de la tasa de reacción en la lista ARATE corresponde al término n3 de la ecuación n2. Por default es cero. Cada ecuación puede tener como máximo hasta 9 términos. Pueden definirse o incorporarse hasta 99 especies.

Actualmente, en el modelo no están incluidas fuentes de calor o de volumen. Mediante estos arreglos, sólo se puede incluir variables linealmente dependientes que sigan más o menos este modelo:

$$\frac{dC_1}{dt} = k_1 C_1^{1.1} C_2^2 - k_2 C_1 C_3^{0.8} \quad (2.61)$$

3.1.3 Modelación Unidimensional del acoplamiento de dos Cinéticas sin crecimiento de biomasa con dependencia no lineal

Aunque el Flow 3D tiene incluido un modelo de especies de la forma de la ec. (2.61), buena parte de las cinéticas mantienen relaciones con dependencia no lineal. Por ello, fue necesario modificar la subrutina qsadd.f y volver a compilar el software de simulación. Esta actividad fue llevada a cabo por los especialistas del IMTA con asesoría del personal de soporte de la empresa Flow Science Inc. propietaria de la marca Flow3D.

La intención era poder simular las ecuaciones de transporte siguientes:

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + v \frac{\partial C_1}{\partial X} - D \frac{\partial^2 C_1}{\partial X^2} + \delta_1 \left(\frac{V_m^1 X}{K_h^1 + C_1} \right) C_1 = k_{1-2} \left(\frac{V_m^2 X}{K_h^2 + C_2} \right) \delta_2 C_2$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} + v \frac{\partial C_2}{\partial X} - D \frac{\partial^2 C_2}{\partial X^2} + \delta_2 \left(\frac{V_m^2 X}{K_h^2 + C_2} \right) C_2 = k_{2-1} \left(\frac{V_m^1 X}{K_h^1 + C_1} \right) \delta_1 C_1$$

En esas ecuaciones, v_m^i , es la tasa de absorción máxima para las especies i , K_h^i , es la constante de saturación media para las especies i , k_{ij} es la constante de rendimiento o producción para la especie i cuando la especie j es limitante, X es una medida de la biomasa, y δ_i es igual a 1, si la especie i está limitando las reacciones y es igual a cero de lo contrario. Se procedió a modelar dichas ecuaciones con los siguientes datos:

$$D = 0.2 \text{ m}^2/\text{día}, k_h^1 = k_h^2 = 0.1 \text{ mg/l}, V_m^1 = V_m^2 = 1 \text{ día}^{-1}, k_{1-2} = 2.0, k_{2-1} = 0.5,$$

$$\delta_1 = 1, \delta_2 = 0, t = 100 \text{ días.}$$

Condiciones iniciales:

$$C_1(x,0) = 3.0 \text{ mg/l}, C_2(x,0) = 0.0 \text{ mg/l}$$

Condiciones de frontera:

$$C_1(0,t) = 3.0 \text{ mg/l}, C_2(0,t) = 10.0 \text{ mg/l}$$

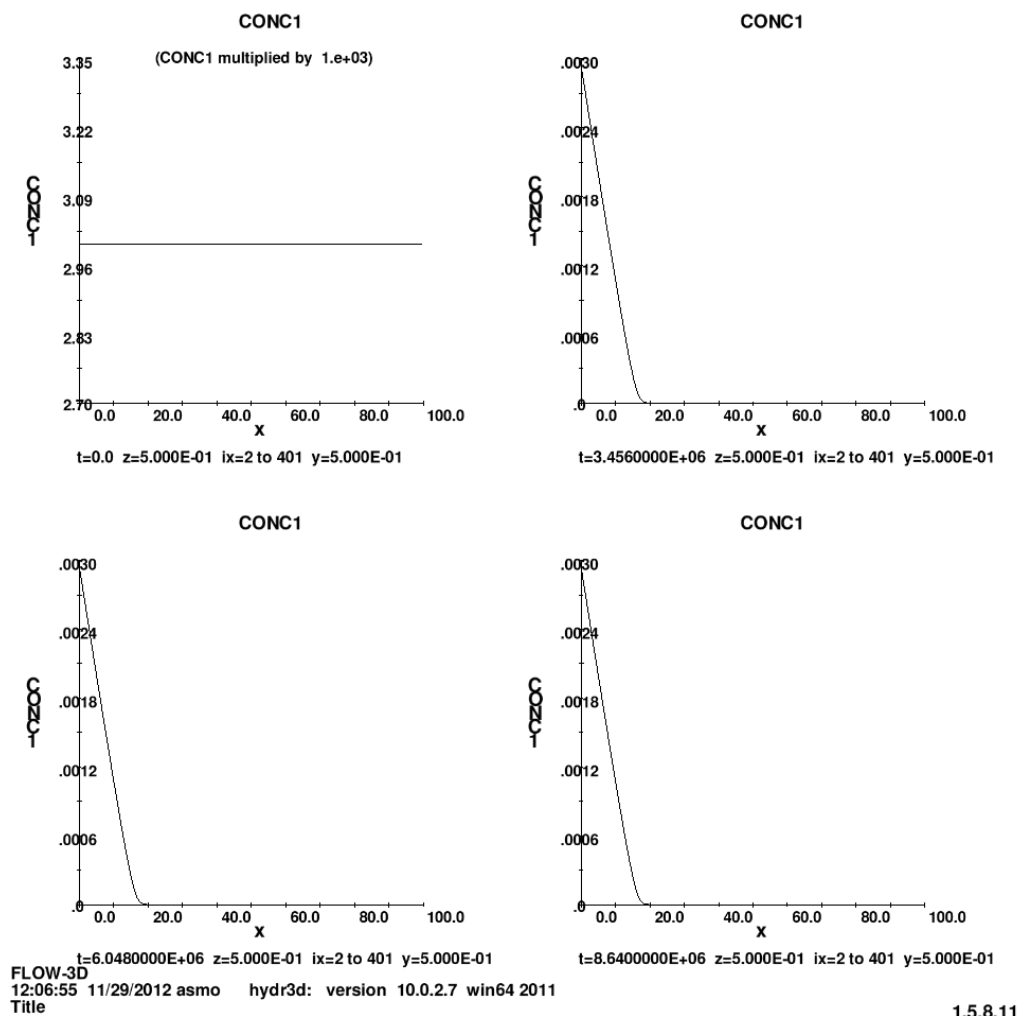
La longitud del dominio es de 100 m.

Con los datos anteriores, las ecuaciones simuladas fueron:

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + V \frac{\partial C_1}{\partial X} - D \frac{\partial^2 C_1}{\partial X^2} + \delta_1 \left(\frac{V_m^1 X}{K_h^1 + C_1} \right) C_1 = 0$$

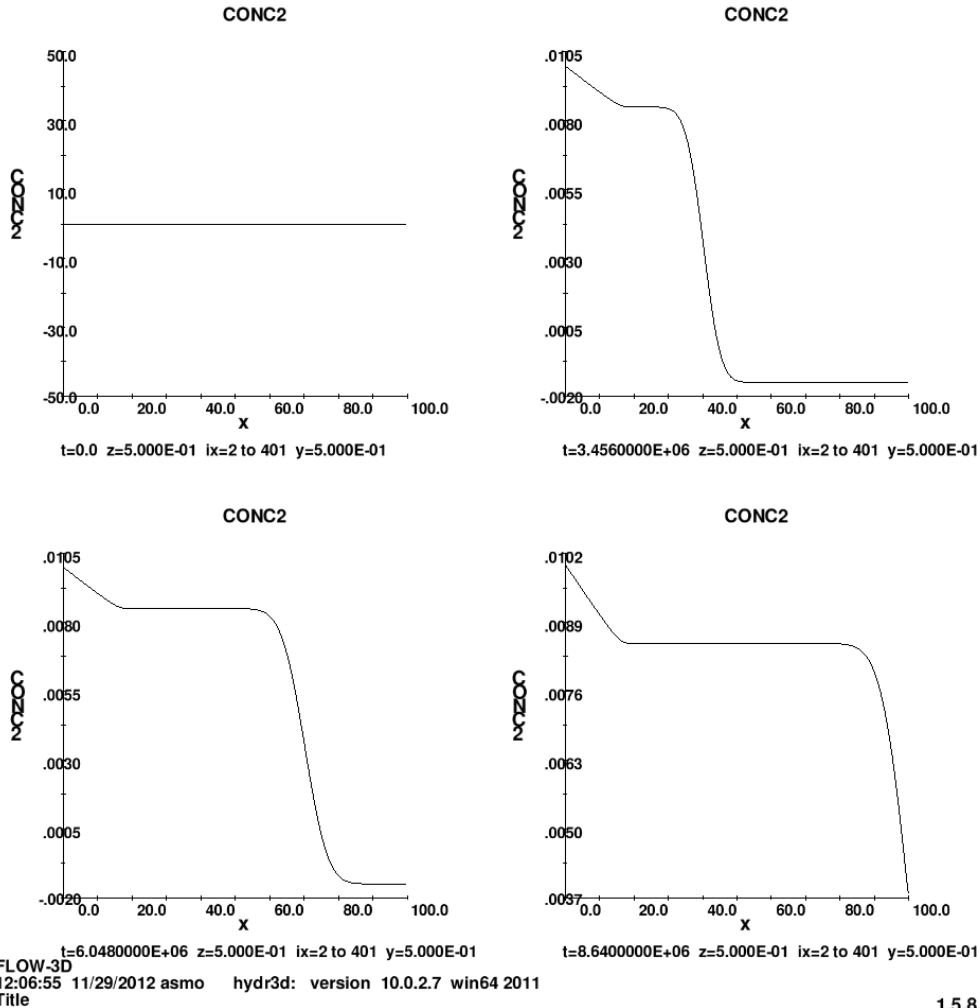
$$\frac{\partial C_2}{\partial t} + V \frac{\partial C_2}{\partial X} - D \frac{\partial^2 C_2}{\partial X^2} = k_{2-1} \left(\frac{V_m^1 X}{K_h^1 + C_1} \right) \delta_1 C_1 \quad (2.62)$$

Y los resultados obtenidos son:



* Los resultados se multiplican por 1000 por conversión de unidades

Figura 3.5 Desarrollo del comportamiento de la especie C1 a través del tiempo, en el caso de especies no linealmente dependientes, ecuaciones (2.62).



1,5,8,11

* Los resultados se multiplican por 1000 por conversión de unidades

Figura 3.6 Desarrollo del comportamiento de la especie C2 a través del tiempo, en el caso de especies no linealmente dependientes, ecuaciones (2.62).

Los resultados anteriores muestran que el oxígeno disuelto se consume a los 19 días, empieza en 3 mg/l y al cabo de ese tiempo se consume, sin embargo, el carbono orgánico sigue reaccionando con el oxígeno para finalmente decaer a 0 en el día 68 aproximadamente. Estos resultados concuerdan con los obtenidos por Celia et al (1999), que se muestran en la siguiente gráfica.

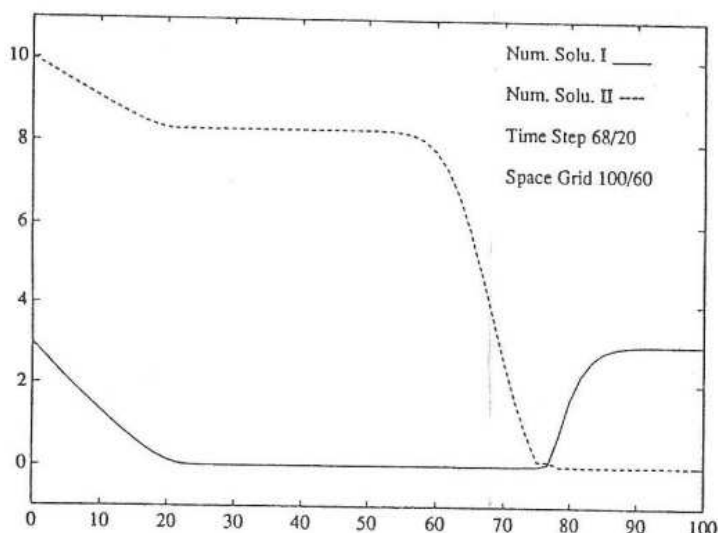


Figura 3.7 Resultados del desarrollo del comportamiento de las especies C_1 y C_2 en una dimensión, obtenida por Celia et al (1999).

Los resultados del FLOW-3D y de Celia et al (1999), coinciden. En la simulación de Celia et al (1999) el C_1 se repone a su valor inicial debido a la manera en que se imponen las condiciones de frontera en su esquema, sin embargo, en cuanto al tiempo y valores de decaimiento de ambas especies los resultados son los mismos.

3.2 MODELACIÓN BIDIMENSIONAL DEL OXÍGENO DISUELTO Y CARBONO ORGÁNICO EN UN LAGO ARTIFICIAL

Una vez que se verificó que el software FLOW 3D reproduce adecuadamente los resultados obtenidos con un esquema más eficiente y más estable computacionalmente, como lo es la metodología ELLAM, se procedió a simular las mismas ecuaciones para el oxígeno disuelto y carbono orgánico en un lago artificial.

Las dimensiones aproximadas del lago son: longitud horizontal aproximada de 218 m por 330 m en su extensión vertical y una profundidad de 1.25 m. Se probaron varios tamaños de mallas, finalmente se seleccionó una con la que se obtienen buenos resultados en el menor tiempo, las mallas finas pueden capturar el movimiento con más detalle sin embargo, el tiempo de cómputo es demasiado largo. La malla seleccionada consta de $218 \times 330 \times 2$ elementos. El caso se ejecutó en una Workstation Dell Precision 690 con 2 procesadores Quad-Core 2.766 MHz un $t = 43\,200$ hrs = 12 horas. Por limitaciones de tiempo y equipo se simuló sólo ese tiempo ya que tardó 3.5 días de cálculo.

El movimiento del agua en el lago para promover la aireación y con ello la degradación de materia orgánica, es propiciado por dos fuentes y un sumidero. Las fuentes aportan un caudal de $1.5 \text{ m}^3/\text{s}$ mientras que el sumidero extrae un gasto de $3 \text{ m}^3/\text{s}$, al cuerpo de agua. Esto significa que el lago en promedio mantendrá una altura de 1.25 m. tal como está proyectado. La ubicación de la fuente 1, 2 y el sumidero respectivamente es:

$x_{f1}= 50.12 \text{ m}$, $y_{f1}= 284.12 \text{ m}$; $x_{f2}= 152.47 \text{ m}$, $y_{f2}= 62.21 \text{ m}$; $x_s= 30.02 \text{ m}$, $y_s= 160.00 \text{ m}$

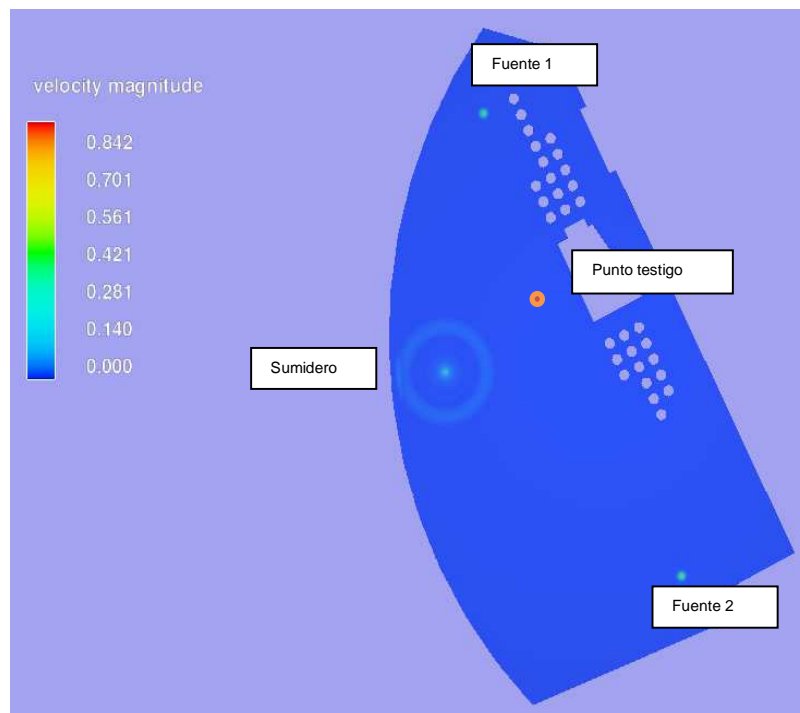


Figura 3.8 Figura esquemática del lago artificial con sus fuentes y sumideros.

Los parámetros químicos y físicos usados fueron:

$D= 0.23148148 \text{ m}^2/\text{día}$, $k_h^1 = k_h^2 = 0.0001 \text{ mg/l}$, $V_m^1 = V_m^2 = 0.0000115740704 \text{ día}^{-1}$, $k_{1-2} = 2$, $k_{2-1}=0.5$, $X= 0.002$, $\delta_1 = 1$, $\delta_2 = 0$, $t = 12 \text{ horas} = 43200 \text{ s}$.

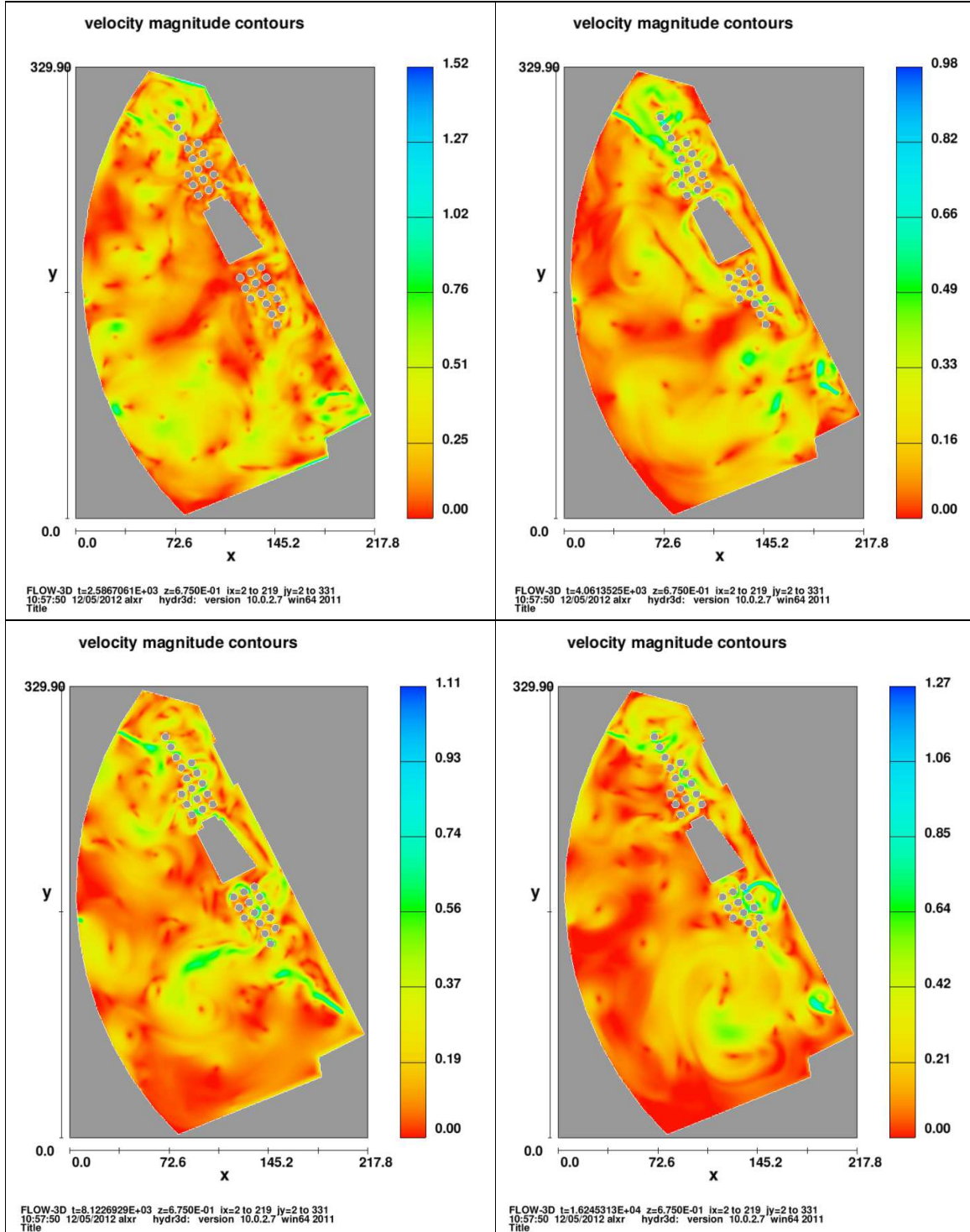
Condiciones iniciales:

$C_1(x,0)=3.0 \text{ mg/l}$, $C_2(x,0)=0.0 \text{ mg/l}$

Condiciones de frontera:

$C_1(0,t)=3.0 \text{ mg/l}$, $C_2(0,t)=10.0 \text{ mg/l}$

Se obtuvieron resultados de la evolución del campo de velocidades y de las cinéticas en todo el lago. Estos se muestran en las figuras siguientes.



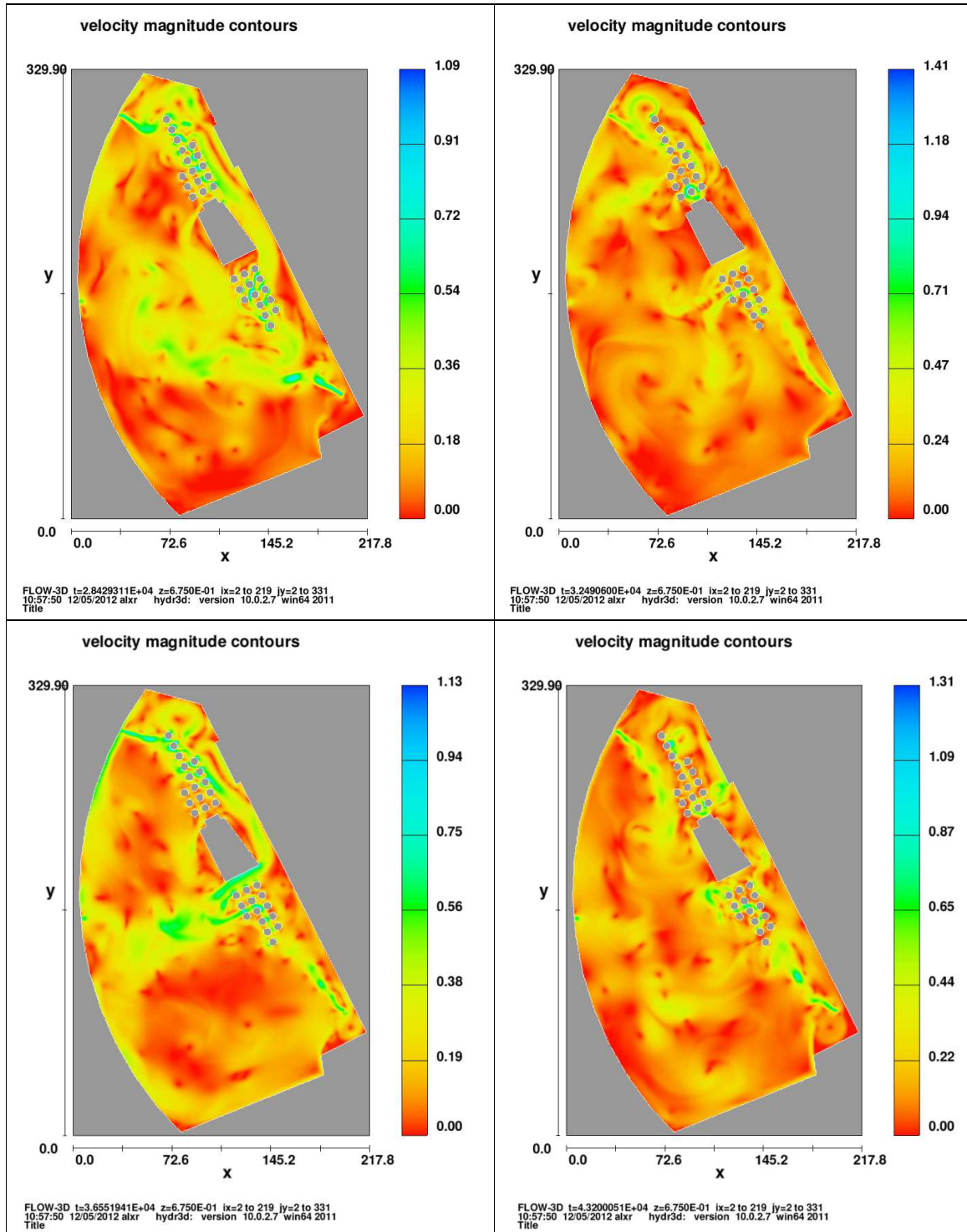
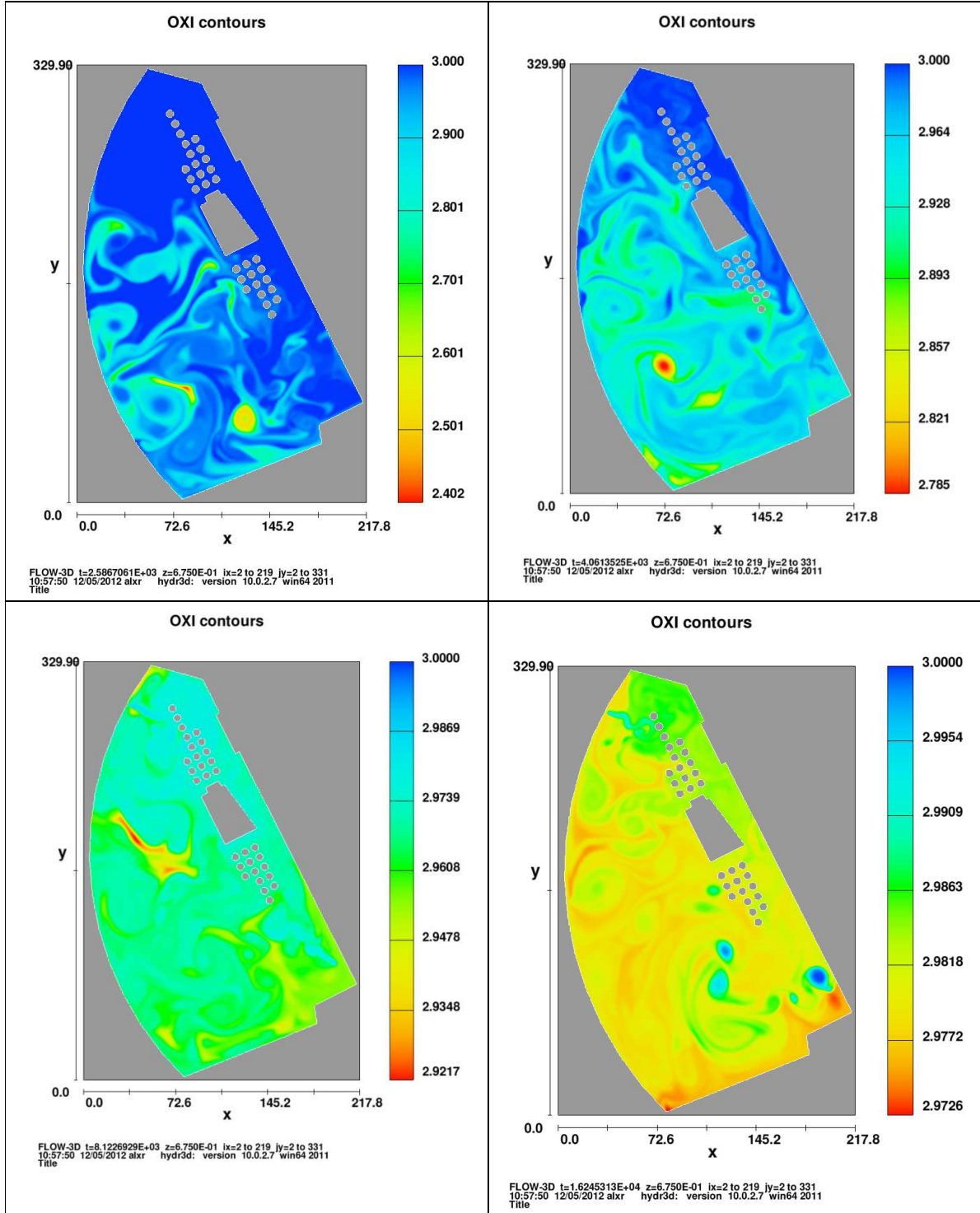


Figura 3.8 Evolución del campo de velocidades en $t=0.72$, $t=1.1281$, $t=2.256$, $t=4.512$, $t=7.897$, $t=9.023$, $t=10.153$, $t=12$ hrs, en el lago.



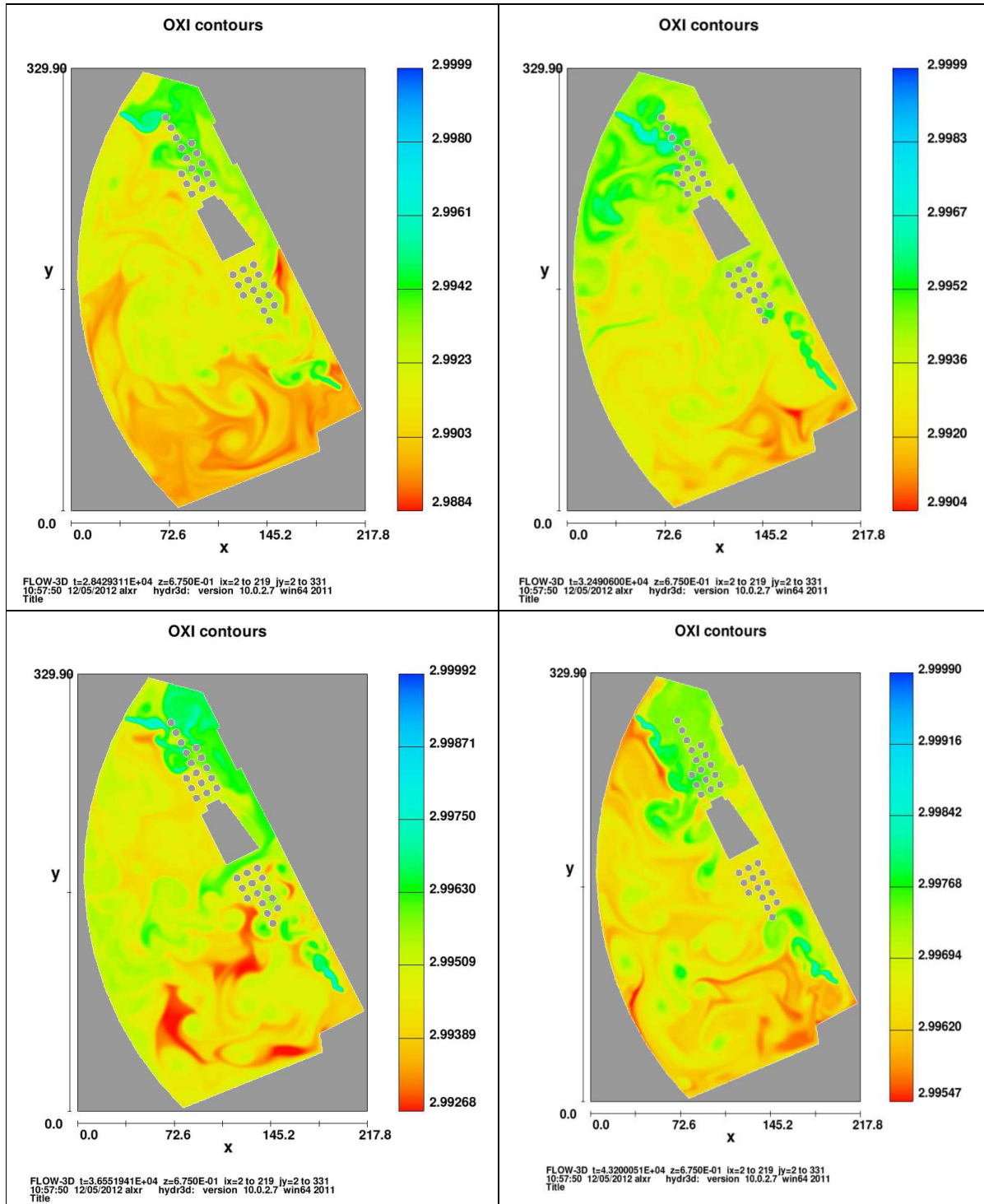
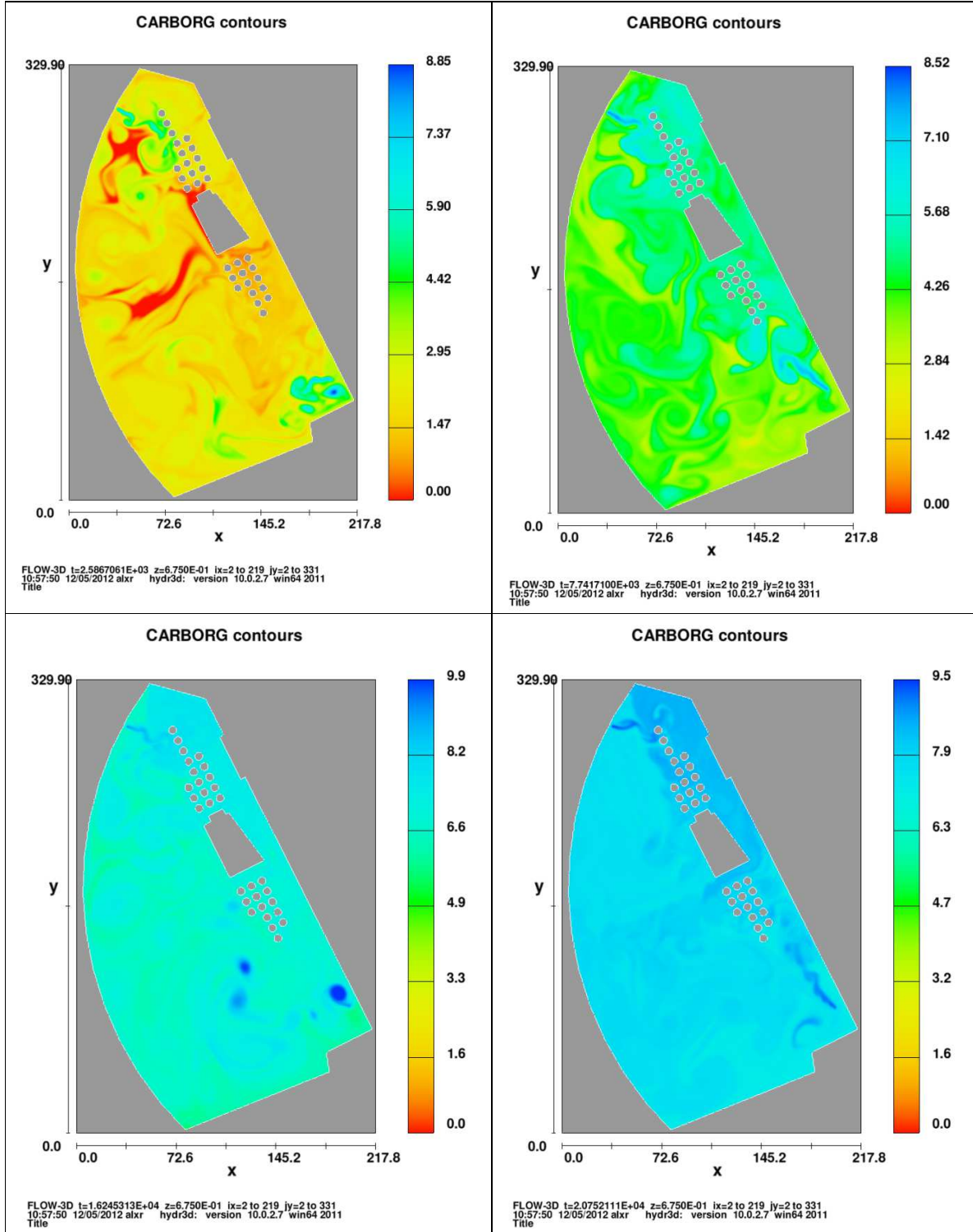


Figura 3.9 Evolución del campo del oxígeno disuelto en $t=0.72$, $t=1.1281$, $t=2.256$, $t=4.512$, $t=7.897$, $t=9.023$, $t=10.153$, $t=12$ hrs, en el lago.



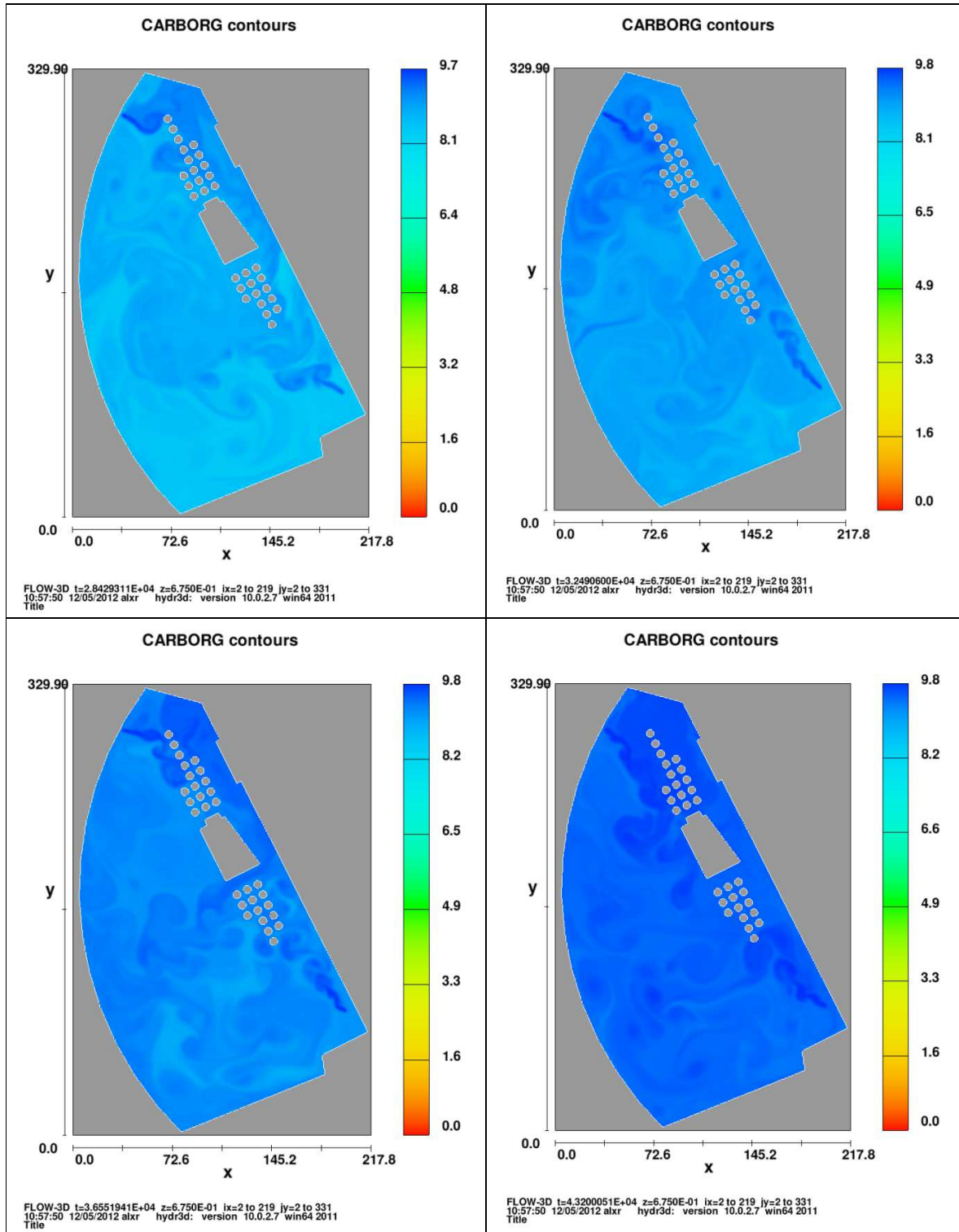


Figura 3.10 Evolución del campo del carbono orgánico en $t=0.72$, $t=1.1281$, $t=2.256$, $t=4.512$, $t=7.897$, $t=9.023$, $t=10.153$, $t=12$ hrs, en el lago.

4. RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos en el presente proyecto son satisfactorios. Por un lado, se calibraron algunos parámetros del modelo químico con asesoría de la empresa Flow Science Inc. y por otro lado, se verificó su capacidad de reproducir casos simulados con ELLAM, un método lagrangiano que utiliza mallas no estructuradas (elemento finito) cuya principal bondad es la rapidez y estabilidad de las soluciones.

Al principio se tuvieron problemas para adaptar la forma general de la solución del modelo químico que el software Flow-3D tiene por default (ec. 2.61), para modelar relaciones no lineales. Esto se hizo por medio de gráficas e interpolación de 4, 5 y 6 grado, sin embargo, los polinomios obtenidos no se ajustaban perfectamente a las gráficas, especialmente en valores cercanos a cero, por lo que las soluciones oscilaban fuertemente, aún cuando el Flow-3D tiene habilidad para ajustar parámetros numéricos y buscar la estabilidad de las soluciones, los resultados de las cinéticas diferían notablemente. Esta situación cambió cuando se pudo programar las ecuaciones diferenciales completas (ec. 2.62) en la subrutina correspondiente y compilar el software, como se puede constatar en las figuras 3.5, 3.6 y 3.7.

En las gráficas de la figura 3.8 es posible ver como las fuentes promueven una lenta circulación en todo el lago, con los patrones de flujo se mueven las concentraciones de oxígeno disuelto y carbono orgánico (figuras 3.9 y 3.10). Se considera que en $t=0$ hay una concentración de oxígeno disuelto de 3 mg/l en el lago y que esa misma cantidad de oxígeno disuelto la aportan las dos fuentes al lago en $t>0$ al igual que una concentración de carbono orgánico de 10 mg/l. Debido a la gran cantidad de nodos y a limitación de tiempo, sólo se simularon 12 horas, los valores desarrollados coinciden con las curvas de decaimiento de las especies mostrados en la figura 3.7, en donde se puede ver que a un $t=12$ horas o 0.5 días, los valores de $C_1 \approx 3$ mg/l y $C_2 \approx 10$ mg/l.

Lo obtenido es una buena base para implementar un modelo hidrobiológico en 2D/3D en cuerpos de agua, lo cual será desarrollado en una etapa posterior a este proyecto.

5. REFERENCIAS

Arroyo C. Víctor (2005). *Modelación Bidimensional de Flujo y Transporte No Lineales en medios Porosos aplicando ELLAM*. Tesis para obtener el grado de doctor por la DEPI-UNAM. México.

Flow Science Inc (2007). *FLOW 3D User Manual*. Santa Fé, New Mexico. USA.

James A. (1984) Editor. *An Introduction to Water Quality Modelling*. Wiley- Interscience. USA. ISBN 0471903566.

Massol Arturo et al. (2012). *Manual de ecología microbiana*. Departamento de Biología de la Universidad de Puerto Rico. Puerto Rico.

R. E. Erwing, M.E. Celia (1999). *Numerical Methods for Reactive Transport and Biodegradation*. Numerical Methods in Water Resources Vol. I. Computational Mechanics Publications&Elsevier Applied Science. London New York.

RamírezLeón et al. (1998). *Modelación Ambiental para la Conservación de Cuerpos de Agua*. Informe Técnico del Proyecto Interno HC-9806. Subcoordinación de Hidráulica Ambiental. IMTA. México.

Victorica Almeida Jorge L. de (1996). *Modelo para simular la evolución del oxígeno disuelto en embalses*. Revista Ingeniería del Agua. Vol. 3. Núm.2. México.

<http://www.uprm.edu/biology/profs/massol/manual/p3-fosforo.pdf>

<http://www.uprm.edu/biology/profs/massol/manual/p3-nitrogeno.pdf>

http://www.scielo.org.mx/scielo.php?pid=S0188-88972008000400004&script=sci_arttext

<http://www.revistaecosistemas.net/pdfs/8.pdf>