

**XXV CONGRESO LATINOAMERICANO DE HIDRÁULICA  
SAN JOSÉ, COSTA RICA, 9 AL 12 DE SETIEMBRE DE 2012**

**MODELO DE CALIDAD DEL AGUA EN ECOSISTEMAS LÉNTICOS,  
CONSIDERANDO EQUILIBRIO QUÍMICO ENTRE ESPECIES  
CONSTITUYENTES**

***Ramiro V. Marbello Pérez***

*Profesor Asociado. Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia, rymarbel@unal.edu.co*

***Francisco M. Toro Botero***

*Profesor Titular. Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia, fmtoro@unal.edu.co*

***Néstor J. Aguirre Ramírez***

*Profesor Titular. Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia, naguirre@udea.edu.co*

**RESUMEN:**

El presente trabajo plantea la conceptualización e implementación de un modelo matemático de calidad del agua superficial que permitirá simular la variación temporal de especies de fósforo y nitrógeno, carbono inorgánico, carbono orgánico (como fitoplancton), materia orgánica y oxígeno disuelto, en lagos y embalses, y predecir su estado de eutrofización asociado.

Este modelo incluye un programa de cálculo del equilibrio químico de sistemas acuosos, el cual permitirá conocer, entre otras especies más, las concentraciones actuales del ión  $H^+$  y del  $CO_2$  disuelto, el valor de pH, el potencial redox y su real incidencia en los procesos biológicos, químicos y de transferencia con la atmósfera y los sedimentos.

El modelo desarrollado contribuirá como una herramienta operativa de gestión, para la toma de decisiones frente a distintos escenarios de control y operación del recurso hídrico.

**ABSTRACT:**

The present paper discusses the conceptualization and implementation of a mathematical model of surface water quality that will simulate the temporal variation of species of phosphorus and nitrogen, inorganic carbon, organic carbon (as phytoplankton), organic matter and dissolved oxygen in lakes and reservoirs, and predicting the state of eutrophication of waterbodies.

This model include a program for calculating chemical equilibrium of aqueous systems, which will allows to know, among other species, current concentrations of  $H^+$  ion and dissolved  $CO_2$ , the pH value, redox potential and its real impact on biological, chemical and transfer with the atmosphere and sediments.

This work will contribute as an operational management tool, for decision making in response to various scenarios of control and operation of water resources.

**PALABRAS CLAVES:** calidad del agua; modelo; equilibrio químico.

## INTRODUCCIÓN

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

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

La calidad del agua de embalses debe estudiarse continuamente, tanto en el embalse mismo, como en sus descargas corriente abajo, cuando se realicen cambios en las operaciones, se agreguen nuevas instalaciones, o cuando haya cambios en la normatividad reguladora del recurso hídrico.

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

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

En la actualidad, existen diversos modelos de calidad del agua superficiales, que han surgido con el desarrollo de la informática y de las técnicas numéricas de solución de sistemas de ecuaciones en derivadas parciales, con los cuales se puede describir, de manera apropiada, la complejidad de los ecosistemas acuáticos.

Sin embargo, la mayoría de los modelos de calidad de agua que existen actualmente no simula el sistema carbonato, ni sus variables asociadas: el dióxido de carbono,  $\text{CO}_2(\text{ac})$ , el pH y la alcalinidad; variables éstas que están directamente relacionadas con la vegetación acuática, el fitoplancton y su consecuente problema de eutrofización.

Hasta ahora, ningún modelo de calidad de agua incluye el equilibrio químico total entre las especies constituyentes del agua, del cual hace parte importante el equilibrio del sistema carbonato arriba mencionado.

En respuesta a la necesidad arriba referida, este trabajo propone la conceptualización, el desarrollo y la aplicación de un modelo matemático de tanques reactores completamente mezclados, interconectados hidrodinámicamente, para simular el comportamiento de especies determinantes de calidad del agua de ecosistemas acuáticos lénticos, incluyendo los procesos de transformación de especies químicas simuladas y la influencia del pH y del potencial redox en los procesos de transformación bioquímicos que ocurren en dichos ecosistemas.

Se destaca en el modelo aquí propuesto la inclusión de un programa de cálculo del equilibrio químico de sistemas acuosos, el cual permitirá conocer, entre otras especies más, las concentraciones actuales del ión  $\text{H}^+$ , el  $\text{CO}_2$  disuelto, el potencial redox y su real incidencia en los procesos biológicos, químicos y de transferencia con la atmósfera y los sedimentos.

## BREVE DESCRIPCIÓN DEL MODELO DE CALIDAD DEL AGUA

El modelo de calidad del agua estudia el comportamiento del fitoplancton en ecosistemas acuáticos lénticos, y las interrelaciones entre éste y especies químicas disueltas y particuladas, tales como fósforo orgánico, fósforo inorgánico, nitrógeno orgánico, nitrógeno amoniacal, nitratos, materia orgánica, oxígeno disuelto y dióxido de carbono.

El modelo discretiza el dominio del cuerpo de agua en capas y celdas, y resuelve, empleando el método de diferencias finitas, el sistema de ecuaciones diferenciales que representan los fenómenos de transporte advectivo y difusivo, y procesos físicos, químicos y biológicos, que afectan a dichas especies constituyentes del agua, y su interacción en la columna líquida, con la atmósfera y los sedimentos, permitiendo conocer su evolución espacial y temporal.

El modelo de calidad del agua se enlaza directamente, en un mismo algoritmo, con el modelo de cálculo del equilibrio químico, MINTEQA2, de la Agencia de Protección Ambiental, de los Estados Unidos, U.S.E.P.A.

Entre las novedades que aporta el modelo, se destacan la transferencia de  $O_2$  y  $CO_2$  con la atmósfera, los procesos de co-precipitación y re-disolución de fosfatos y carbonatos cálcicos, el cálculo del pH y del potencial redox del equilibrio, y la influencia de éstos y la de la temperatura del agua en los procesos físicos, químicos y biológicos que ocurren en la columna líquida y en la capa de sedimentos.

## MARCO TEÓRICO

La Figura 1 esquematiza un ecosistema hídrico léntico (un lago o un embalse), las especies constituyentes del agua, y los procesos físicos, químicos y biológicos que ocurren en él, cuya calidad se puede evaluar empleando un modelo matemático de calidad del agua.

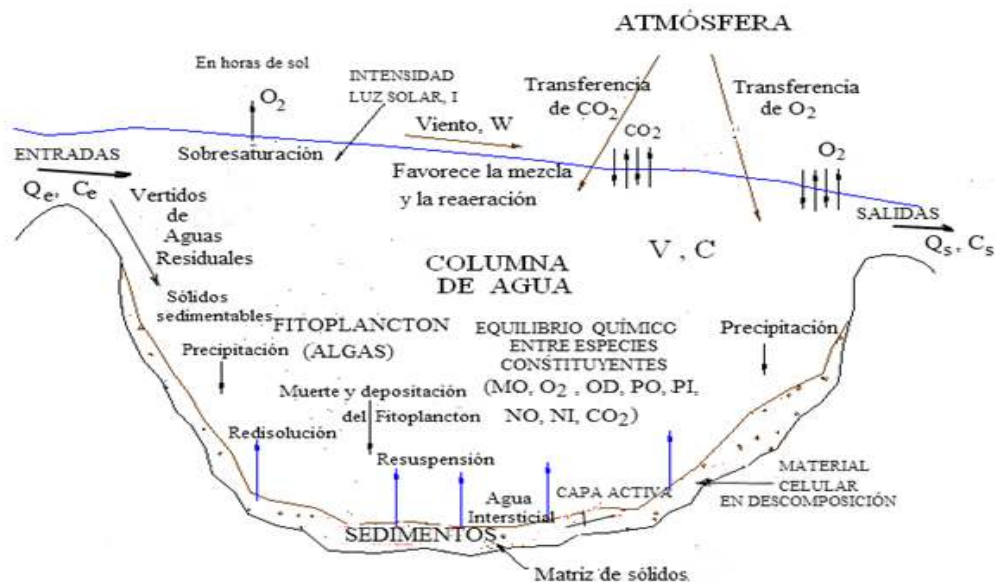
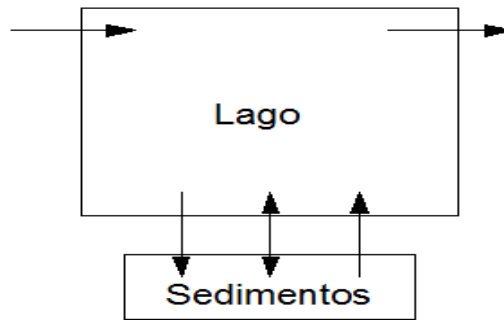


Figura 1.- Componentes y procesos típicos de un ecosistema léntico.

La Figura 2 representa una manera de segmentar el dominio del cuerpo de agua en dos grandes subdominios: la columna líquida y la capa de sedimentos, las cuales interactúan dinámicamente.



**Figura 2.-** Segmentación de un ecosistema léntico

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

#### **Ecuación de conservación de masa:**

La expresión matemática de la variación,  $\partial C/\partial t$ , de la concentración,  $C$ , de una especie o sustancia, en un elemento de volumen, en un instante,  $t$ , determinado, es la siguiente (Zhen-Gang Ji, 2008, Martin, J. et al. 2007):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(u C) - \frac{\partial}{\partial y}(v C) - \frac{\partial}{\partial z}(w C) + \frac{\partial}{\partial x}\left(E_x \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(E_y \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(E_z \frac{\partial C}{\partial z}\right) + Q_{e/s} + S_k \quad [1]$$

En la ecuación [1],  $C$  es la concentración de la especie determinante de calidad del agua, en (mg/l);  $t$  es el tiempo (día);  $u$ ,  $v$  y  $w$  son las componentes de la velocidad, en (m/s), de la partícula fluida, según las tres direcciones ortogonales,  $x$ ,  $y$  y  $z$ , en (m);  $E_x$ ,  $E_y$ , y  $E_z$  son los coeficientes de difusión longitudinales, laterales y verticales, en (m<sup>2</sup>/s);  $Q_{e/s}$  representa las cargas de entradas/salidas externas de materia de la especie, en (mg/(l·s));  $S_k$  representa los procesos de reacción/transformación química y bioquímica internos, en (mg/(l·s)), y los debidos a resuspensión y asentamiento.

Los términos  $Q_{e/s}$  y  $S_k$  representan los procesos no-hidrodinámicos que contribuyen con el aumento o la disminución de las concentraciones de las especies o variables de estado consideradas en el modelamiento. Los demás términos del segundo miembro de esta ecuación son términos hidrodinámicos puros que representan los procesos de transporte advectivo y de transporte difusivo.

**Formulaciones matemáticas para el término  $S_k$  en la ecuación de conservación de masa, para las especies determinantes de calidad del agua (Martin M., M., 1998):**

## Formulaciones matemáticas para el término $S_k$ en la columna líquida:

Fitoplancton, fito

$$S_{k_{fito}} = \frac{\partial [fito]}{\partial t} = \left( G_{\max} (20^\circ) G_T G_I G_N - k_R (20^\circ C) \theta_R^{(T-20)} - k_D - k_G - \frac{V_{s,fito}}{H} \right) [fito] \quad [2]$$

Fósforo Orgánico, P.O.

$$S_{k_{PO}} = \frac{\partial [PO]}{\partial t} = D [fito] a_{PC} f_{PO} - k_{\min P} \theta_{\min P}^{(T-20)} X_{PRC} [PO] - \frac{V_{sPO} (1-f_{POD})}{H} [PO] \quad [3]$$

Fósforo Inorgánico, P.I.

$$S_{k_{PI}} = \frac{\partial [PI]}{\partial t} = D [fito] a_{PC} (1-f_{PO}) + k_{\min P} \theta_{\min P}^{(T-20)} X_{PRC} [PO] - G [fito] a_{PC} \frac{V_{sPI} (1-f_{PID})}{H} [PI] \quad [4]$$

Nitrógeno Orgánico, N.O.

$$S_{k_{NO}} = \frac{\partial [NO]}{\partial t} = D [fito] a_{NC} f_{NO} - k_{\min N} \theta_{\min N}^{(T-20)} X_{NRC} [NO] - \frac{V_{sNO} (1-f_{NOD})}{H} [NO] \quad [5]$$

Nitrógeno Amoniacal,  $NH_4^+$

$$S_{k_{NH_4^+}} = \frac{\partial [NH_4^+]}{\partial t} = D [fito] a_{NC} (1-f_{NO}) - k_{\min N} \theta_{\min N}^{(T-20)} X_{PRC} [NO] - G \cdot FP_{NH_4^+} [fito] a_{NC} - k_{nitri} \theta_{nitri}^{(T-20)} X_{NIT} [NH_4^+] \quad [6]$$

Nitratos,  $NO_3^-$

$$S_{k_{NO_3^-}} = \frac{\partial [NO_3^-]}{\partial t} = -G (1-FP_{NH_4^+}) [fito] a_{NC} - k_{nitri} \theta_{nitri}^{(T-20)} X_{NIT} [NH_4^+] - k_{denit} \theta_{denit}^{(T-20)} X_{DENIT} [NO_3^-] \quad [7]$$

Materia Orgánica, M.O.

$$S_{k_{MO}} = \frac{\partial [MO]}{\partial t} = D [fito] a_{OC} - k_{oxi} \theta_{oxi}^{(T-20)} X_{MO} [MO] - 2.86 k_{denit} \theta_{denit}^{(T-20)} X_{DENIT} [NO_3^-] - \frac{V_{sMO} (1-f_{MOD})}{H} [MO] \quad [8]$$

Oxígeno Disuelto, O.D.

$$S_{k_{O_2}} = \frac{\partial [OD]}{\partial t} = G [fito] \left( \frac{32}{12} + \frac{48}{14} a_{NC} (1-FP_{NH_4^+}) \right) + k_{rea} \theta^{(T-20)} ([OD]_{sat} - [OD]) - \frac{64}{14} K_{nitri} \theta^{(T-20)} X_{NIT} [NH_4^+] - k_{oxi} \theta^{(T-20)} [MO] X_{MO} - \frac{32}{12} k_{res} \theta^{(T-20)} [fito] - \frac{DOS}{H} \quad [9]$$

Carbono Inorgánico, C.I.

$$\begin{aligned}
 S_{kCI} = \frac{\partial [CI]}{\partial t} = & k_{reaco2} \theta_{reaco2}^{(T-20)} ([CO_2]_{sat} - [CO_2]) + \left(\frac{44}{12}\right) k_R \theta_R^{(T-20)} [fito] \\
 & - \left(\frac{44}{12}\right) k_{CRCIF} \theta_{CRCIF}^{(T-20)} [fito] + \left(\frac{44}{32}\right) k_{oxi} \theta_{oxi}^{(T-20)} X_{MO} [MO] \\
 & + \left(\frac{55}{14}\right) k_{denit} \theta_{denit}^{(T-20)} X_{DENIT} [NO_3^-]
 \end{aligned} \quad [10]$$

## EL MODELO DE EQUILIBRIO QUÍMICO, MINTEQA2

MINTEQA2 es un programa para el cálculo de la especiación de los componentes en equilibrio químico en sistemas acuosos diluidos, desarrollados por la U.S. EPA (United States Environmental Protection Agency). Puede utilizarse para calcular la composición en equilibrio de disoluciones diluidas preparadas en laboratorio o de sistema acuáticos naturales. MINTEQA2 calcula las concentraciones en equilibrio de cada especie, a partir de sus concentraciones totales iniciales (Allison et al., 1991).

### Descripción del modelo MINTEQA2

Un sistema de n componentes independientes, que se pueden combinar para formar m especies, puede representarse por un conjunto de ecuaciones de acción de masas de la siguiente forma (Allison et al., 1991):

$$K_i = \{S_i\} \prod_j X_j^{-a_{ij}} \quad [11]$$

donde,  $K_i$  es la constante de equilibrio de formación de la especie  $i$ ;  $\{S_i\}$  es la actividad de la especie  $i$ ;  $X_j$  es la actividad de la componente  $j$ ;  $a_{ij}$  es el coeficiente estequiométrico del componente  $j$  en la especie  $i$ ; y  $\Pi$  es la productoria de los términos  $X_j^{-a_{ij}}$ .

La concentración  $[S_i]$  de la especie  $i$  está relacionada con la actividad  $\{S_i\}$  por el coeficiente de actividad  $\gamma_i$ , por la siguiente expresión:

$$\{S_i\} = \gamma_i [S_i] \quad [12]$$

Además de las m ecuaciones de acción de masas, se tienen n componentes independientes, cada uno de los cuales cumple el siguiente balance de masas:

$$Y_i = \sum_j a_{ij} C_j - T_j \quad [13]$$

donde,  $T_j$  es la concentración disuelta total del componente  $j$ , determinada analíticamente;  $Y_i$  es la diferencia entre la concentración disuelta total calculada del componente  $j$  y la concentración analítica conocida de dicho componente.

MINTEQA2 utiliza el método de aproximación de Newton–Raphson, para estimar el valor de las  $X_j$  en cada nueva iteración. La solución del sistema de ecuaciones [11] y [13] es aquel conjunto de actividades de los componentes  $X_j$  que hace que la diferencia entre la concentración calculada y la medida analíticamente,  $Y_j$ , sea igual a cero.

### PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO DEL MODELO

La Figuras 3 ilustra la manera de alimentar el modelo de calidad del agua, con datos generados por la ejecución previa de un modelo hidrodinámico.

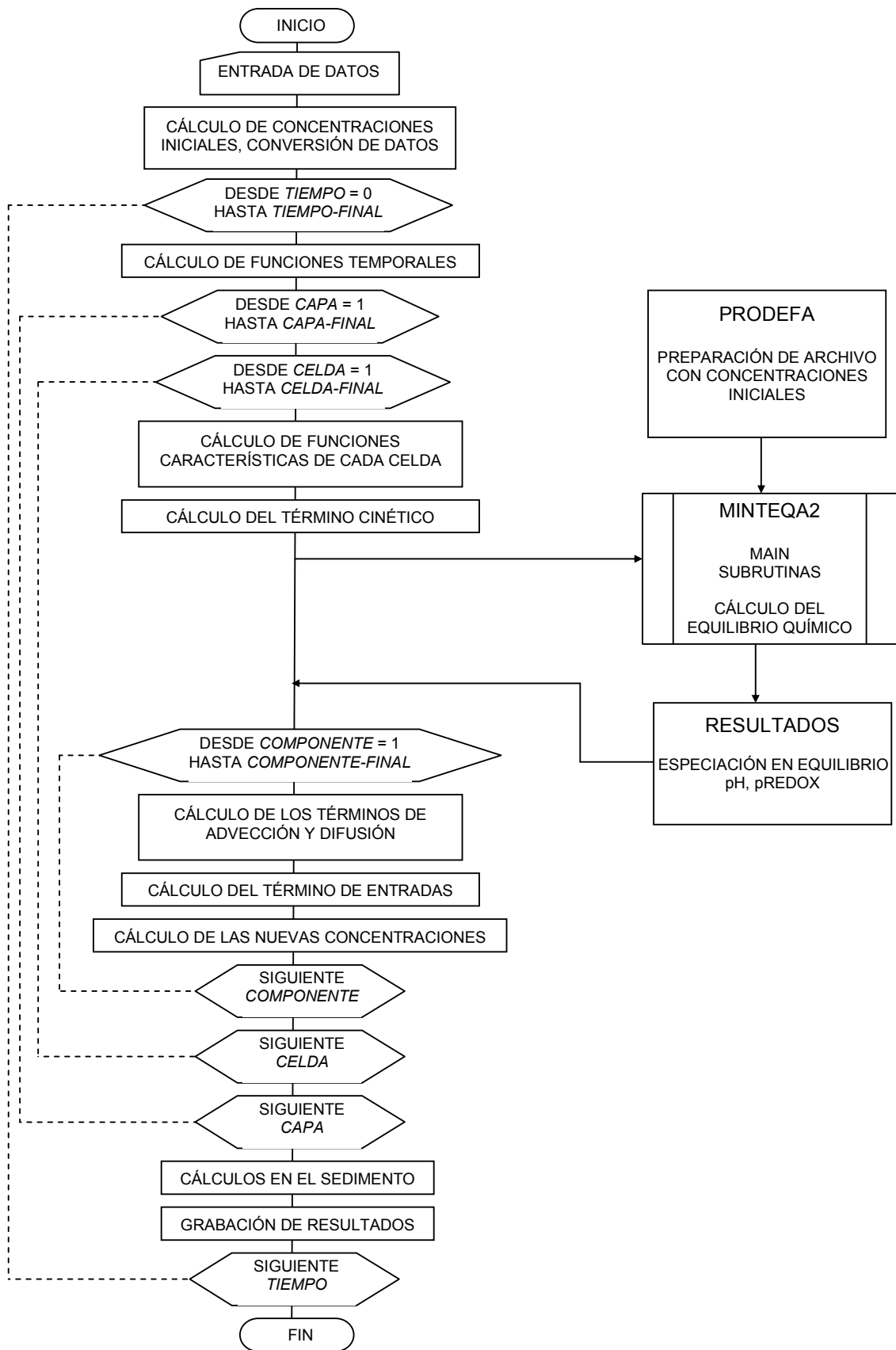


**Figura 3.-** Representación esquemática de los datos de entrada al modelo de calidad del agua, y de los resultados que genera el mismo.

La Figura 4 presenta la secuencia de pasos cíclicos para la ejecución del modelo de calidad del agua, aplicado a un ecosistema léntico de agua.

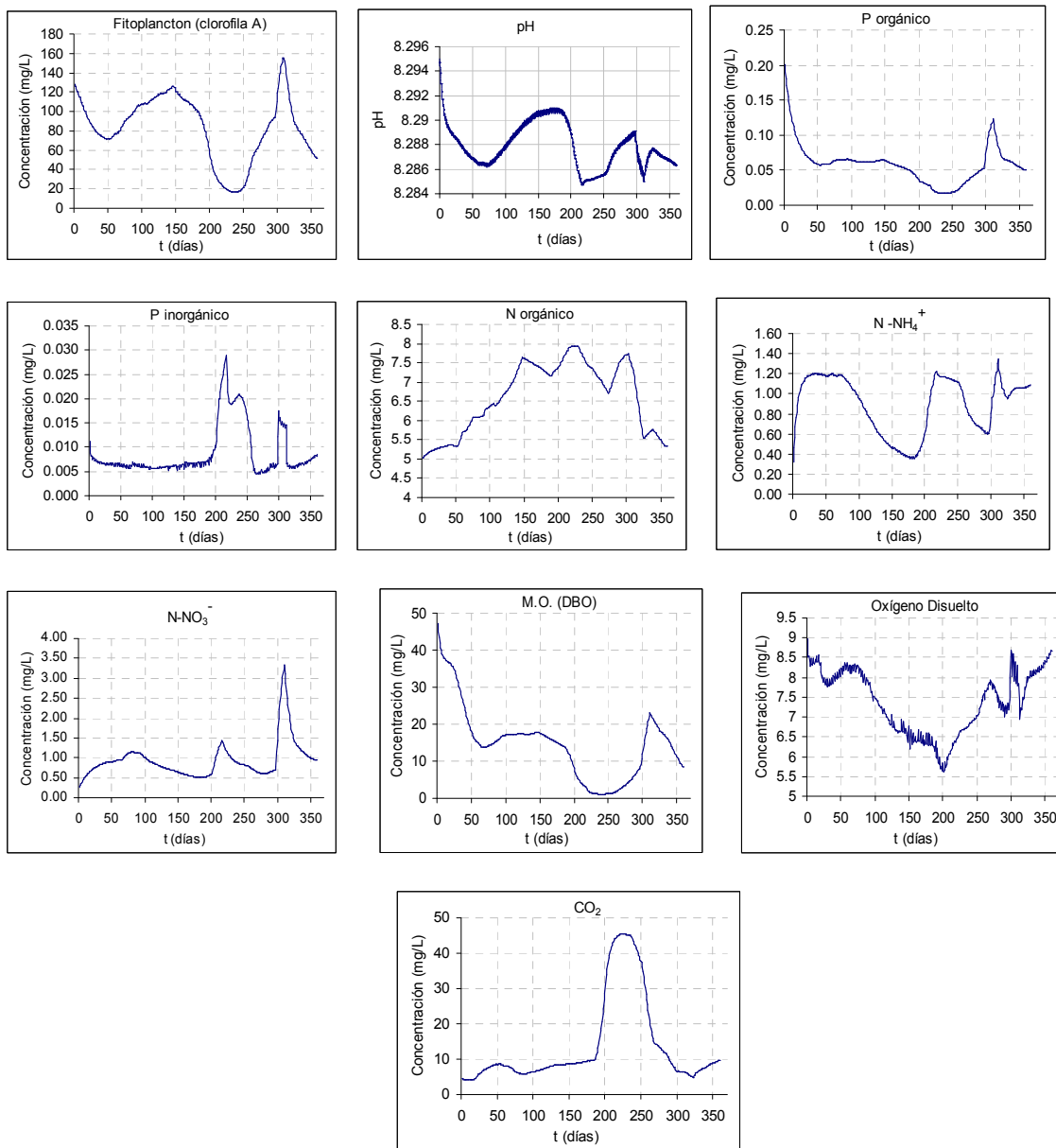
### RESULTADOS

En la figura 5 se presentan, de manera gráfica, las variaciones del pH y de las nueve especies constituyentes del agua, simuladas en la columna líquida del ecosistema natural La Albufera de Valencia, España, tras una ejecución del modelo de calidad del agua, para un periodo de simulación de 360 días.



**Figura 4.-** Algoritmo de cálculo del modelo de calidad del agua.





**Figura 5.-** Resultados gráficos de la variación temporal de las especies constituyentes de calidad del agua simuladas.

## CONCLUSIONES

Es posible enlazar un modelo de calidad del agua con un modelo de cálculo del equilibrio químico de la disolución acuosa.

Se presentó un modelo de calidad del agua en sistemas lénticos, que sirve para simular el comportamiento del fitoplancton y de nutrientes, considerando el equilibrio químico entre especies químicas disueltas.

El presente modelo introduce la innovación de modelar el pH y el potencial redox, a través del programa de cálculo del equilibrio químico MINTEQA2, aplicado a la disolución acuosa de la columna líquida de un ecosistema léntico.

El modelo de calidad del agua propuesto permite predecir el efecto del pH, el potencial redox y la temperatura del agua sobre la variación espacial y temporal de especies determinantes de la calidad del agua de ecosistemas lénticos.

## REFERENCIAS

- Aguirre R., N., Palacio B., J., Ramírez R., J.** (2007). “Características limnológicas del embalse El Peñol-Guatapé, Colombia”. Revista Ingenierías. Universidad de Medellín.
- Aguirre R., N., Palacio B., J., Ramírez R., J.** (2001). “Aplicación de algunos modelos de calidad de agua en dos sitios del embalse El Peñol- Guatapé, Colombia”. Revista Facultad de Ingeniería. Universidad de Antioquia.
- Barnwell, T.O. y col.** (1985). *Rates, Constants, and Kinetics Formulations in Surface Water Quality Modeling*. U.S. Environmental Protection Agency, Athens, Georgia. EPA/600/3-85/040.
- Barnwell Jr., T. O., L. C. Brown, and R. C. Whittemore.** (2004). “Importance of field data in stream water quality modeling using QUAL2E-UNCAS”. Journal of Environmental Engineering 130, (6): 643-647.
- Camacho B., L. A., Díaz-Granados, M., Giraldo, E.** (2007). “Contribución al desarrollo de un modelo de calidad del agua apropiado para evaluar alternativas de saneamiento del Río Bogotá”. Bogotá, Colombia.
- Camacho B., L., Lee, M. J. and Whitehead, P.** (1998). “Extension of the QUASAR river model to incorporate dead-zone mixing”. Hydrology and Earth System Science. European Geophysical Society. Vol. 2, p 353.
- Chapra S.C.** (1997). “Surface Water-Quality Modeling”, University of Colorado at Boulder, McGraw-Hill Series in Water Resources and Environmental Engineering, New York, USA. 844 pp.
- Chapra, S.C., Pelletier, G.J.** (2003). *QUAL2K: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality: Documentation and Users Manual*. Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, Medford, MA.
- Chapra, S.C. and Martin, J.L.** 2004. *LAKE2K: A Modeling Framework for Simulating Lake Water Quality (Version 1.2): Documentation and Users Manual*. Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, Medford, MA.
- Di Toro, D.M. y Matystik, W.F.** (1980). *Mathematical Models of Water Quality in Large Lakes, Part 1. : Lake Huron and Saginaw Bay*. EPA-600/3-80-056, 28-30.
- Di Toro, D. M., J. J. Fitzpatrick, and R. V. Thomann.** (1983). *Documentation for water quality analysis simulation program (WASP) and model verification program (MVP)*. U.S.EPA Ecological Research Series.
- James A.** (1993). “Modeling Water Quality in Lakes and Reservoirs”, In: An Introduction to Water Quality Modeling, 2Ed, John Wiley and Sons, England.
- Jiménez, N., Toro, F. M., Vélez, J. I., Aguirre, N.** (2005). *A methodology for the design of quasi-optimal monitoring networks for lakes and reservoirs*. Journal of Hydroinformatics. IWA, Publishing.
- Margalef R.,** (1983). “Limnología”, Ediciones Omega, Barcelona España.
- Martin, J. L., R. A. Ambrose, and T. A. Wool** (2006). *WASP7 Benthic Algae-Model Theory and User's Guide*.
- Martin M., Miguel** (1998). *Modelación de la Calidad de Aguas Superficiales. Aplicación al caso de la Albufera de Valencia*. Tesis Doctoral. Universidad Politécnica de Valencia.
- Martin, J., Edinger J., Higgins J and Gordon J.** (2007). *Energy Productions and Reservoir Water Quality*. American Society of Civil Engineers, Virginia, U.S.A.
- Orlob, G. T.** (1983). *Mathematical modeling of water quality*. Mathematical Modeling of Water Quality.
- Pelletier, G. J. and S. C. Chapra** (2005). *QUAL2Kw Theory and Documentation, A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality*.
- Stumm, W. y Morgan, J.J.** (1981). *Aquatic Chemistry*. Wiley-Interscience. New York.
- Thomann R.V. and Mueller J.A.** (1987). “Principles of Surface Water Quality Modeling and Control”, Manhattan College, Harper International Edition, New York, U.S.A.
- Wool, T. A., Ambrose, R. B., Martin, J. L., and Comer, E. A.** (2001). *The water quality analysis simulation program, WASP6. Part A: Model documentation*. U.S. Environmental Protection Agency, Center for Exposure Assessment Modeling, Athens, GA.
- Zhen-Gang, Ji** (2008). *Hydrodynamics and Water Quality. Modeling Rivers, Lakes, and Estuaries*. Ed. John Wiley and Sons, Inc., New Jersey, U.S.A. 626 p.