

CAPÍTULO 6 APLICACIÓN.

Uno de los objetivos principales del desarrollo de un modelo de simulación, para aguas superficiales constituidas por flujo superficial, es conseguir entender mejor los procesos que tiene lugar dentro de estos medios que son los ríos. Una vez que el modelo de simulación proporcione resultados fiables se podrán corroborar los criterios de remediación para la recuperación del medio y optimizar su rendimiento.

Además de los procesos, el modelo de transporte considera un punto vertido de agua cloacal en un punto kilométrico determinado, interacciones químicas, bioquímicas, descomposiciones de sustancias en el agua, y interacciones entre los solutos y los componentes biológicos.

A continuación se muestra y se describe los valores escogidos para realizar el modelo de transporte reactivo y los resultados obtenidos para las especies que determinan la calidad del agua como es el oxígeno disuelto, la concentración de materia orgánica disuelta, los nutrientes, las bacterias y en el caso de eutrofización la población de algas.

6.1 PARÁMETROS DEL MODELO

El modelo ha querido representar un río ideal, con parámetros obtenidos del tramo medio del río Llobregat. Se ha realizado la hipótesis de que se trata de un cauce uniforme y homogéneo, simplificado en un modelo 1D, como se muestra en la figura 6.1.

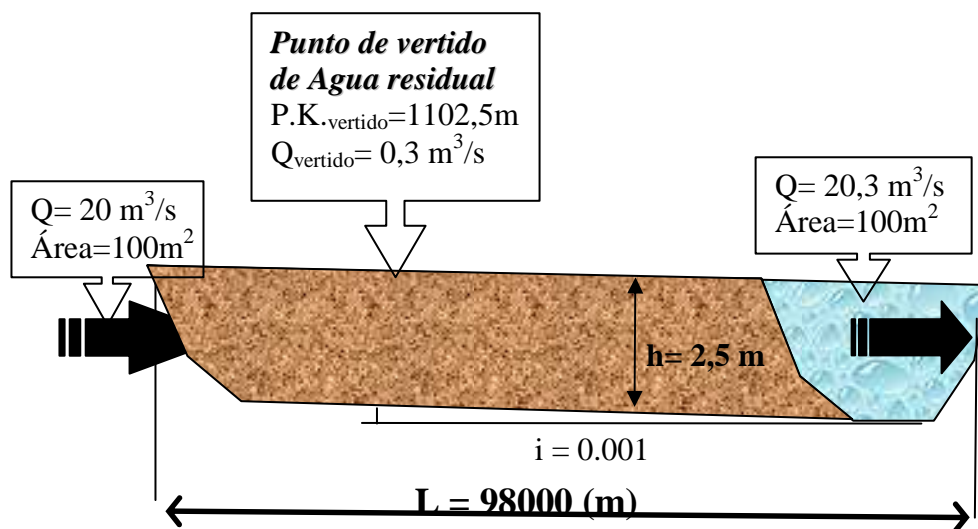


Figura 6.1: Río Modelado en 1D con un vertido de agua cloacal.

Las variables físicas del río modelado están definidas por la pendiente del cauce (i), el ancho (w), el caudal (Q), la profundidad del canal (d) y el área de flujo (A_f). Con estos datos se puede determinar el resto de variables como son la altura piezométrica (h),

velocidad del flujo (v), el tiempo de transito (t), la dispersividad (α) y el coeficiente de dispersión (D). Los valores adoptados se muestran en la tabla 6.1.

Tabla 6.1: Parámetros físicos para la definición del modelo

Parámetro	Descripción	Valor	Unidad
L =	Longitud	98000	m
i =	Pendiente	0,001	m/m
n =	Rozamiento	0,15	
W =	Ancho	40	m
Q =	Caudal	20	m ³ /s
A _f =	Área de flujo	100	m ²
d =	Profundidad	2,5	m
h =	Calado	2,5	m
v =	Velocidad	0,2	m/s
v* =	Velocidad de cizalla	0.1565	m/s
t =	Tiempo de transito	1225000	(s)
Δt =	Incremento de tiempo	61250	(s)
Δx =	Incremento de espacio	122.5	(m)
D =	Dispersividad	6.772	(m ² /s)
α =	Coficiente dispersivo	33.86	(m)

La mayoría de parámetros físicos del río han sido obtenidos por un río real, pero la dispersividad (α) e igual que el coeficiente de dispersión (D) se han calculado como se muestra en las ecuaciones 10 y 11 del Capítulo 4, respectivamente.

Entonces, para el modelo ya se pueden obtener numéricamente los dos criterios referidos a la discretización temporal y espacial para evitar problemas de estabilidad, como son el número de Courant (Cou) (ecuación 65) y el número de Peclet (Pe) (ecuación 66). A partir del número de Courant se obtiene el espaciado máximo entre nodos, que en principio al tener la longitud del modelo 1D definida, véase tabla 6.1, se obtiene un valor aproximado de 6126 nodos. Aquí surgía una problemática debido a que era una carga muy grande para el modelo, que para hacerlo funcionar completamente necesitaba aproximadamente treinta minutos. Se realizaron varias pruebas con diferente número de nodos, analizando los resultados obtenidos por estas pruebas y se comprobó que la influencia del número de nodos no era apreciable en la precisión de los resultados, con lo que se decidió que el modelo estuviera constituido por 801 nodos. Con este número de nodos los resultados eran del mismo orden de precisión que con 6126 y reducía el tiempo de ejecución del modelo considerablemente.

$$\text{Cou} = \frac{v \cdot \Delta t}{\Delta x} = 100 \quad (65)$$

$$\text{Pe} = \frac{v \Delta x}{D} = 3.62 \quad (66)$$

Con los valores de los parámetros bioquímicos se puede adquirir la estequiometría de las especies orgánicas e inorgánicas de todas las reacciones del modelo de transporte reactivo, que han estado propuestas en el Capítulo 5.

Tabla 6.2 : *Formulación de los compuestos orgánicos, Reichert (2001).*

Símbolo	Formulación
S _S	C _{0.0475} H _{0.08} O _{0.0175} N _{0.00429} P _{0.00032}
X _H	C _{0.04333} H _{0.08} O _{0.01563} N _{0.00857} P _{0.00097}
X _{N1}	C _{0.04333} H _{0.08} O _{0.01563} N _{0.0857} P _{0.00097}
X _{N2}	C _{0.04333} H _{0.08} O _{0.01563} N _{0.00857} P _{0.00097}
X _{ALG}	C _{0.03} H _{0.07} O _{0.03125} N _{0.00429} P _{0.00032}
X _{CON}	C _{0.03} H _{0.07} O _{0.03125} N _{0.00429} P _{0.00032}
X _S	C _{0.0475} H _{0.08} O _{0.0175} N _{0.00429} P _{0.00032}
X _I	C _{0.05083} H _{0.07} O _{0.0175} N _{0.00214} P _{0.00032}

Hay que destacar que los coeficientes estequiométricos, que se generan con las fracciones másicas y una serie de coeficientes de rendimiento, se muestran en el anejo II. Todos estos parámetros de las tablas 6.2 y 6.3 se han obtenido del artículo del RWQM n°1 de Reichert, et al. (2001).

Tabla 6.3: *Valores de los coeficientes de rendimiento, Reichert (2001).*

Parámetro	Valor	Unidad
Y _{H,aer}	0.60	gXH/gSS
Y _{H,anox,NO3}	0.50	gXH/gSS
Y _{H,anox,NO2}	0.30	gXH/gSS
f _{I,BAC}	0.20	gXI/gXH;XN1;XN2
Y _{N1}	0.13	gXN1/gNH4-N
Y _{N2}	0.03	gXN2/gNO2-N
f _{I,ALG}	0.20	gXI/gXALG
Y _{ALG,death}	0.62	g(XS+XI)/gXALG
Y _{CON}	0.20	gXCON/gXALG
f _e	0.40	gXS/gXCON
f _{I,CON}	0.20	gXI/g(XS+XI)
Y _{CON,death}	0.62	g(XS+XI)/gXCON
Y _{HYD}	1.00	gSS/gXS

6.2 MODELO DE TRANSPORTE REACTIVO

Para poder realizar el modelo de transporte reactivo basado en el código RCB, se define toda una serie de componentes del modelo, como son la malla, las condiciones iniciales y las condiciones de contorno. Estos datos se realizan modelando un medio hídrico superficial ideal con una longitud concreta y las condiciones de flujo en este medio

superficial se ha determinado de tal manera que resulta del valor medio de los caudales registrados en el río Llobregat, Barcelona.

6.2.1 Definición del modelo

Para la definición completa del modelo de flujo se deben tener determinada una serie de variables que van desde la malla de elementos finitos que cubre la geometría para un elemento 1D, como se considera el río, y hasta los parámetros hidráulicos, como son el caudal o la dispersividad longitudinal.

Geometría y malla

El río ideal, considerado para el modelo, tiene un punto de vertido de agua cloacal con un flujo variable en función de la población de la cual proviene el vertido. Los valores que se modelan en la geometría del río se pueden observar en la figura 6.1.

La malla, que se genera con este modelo, son elementos lineales que unen dos nodos por cada elemento finito. Para cubrir este modelo se realizó la búsqueda de resultados utilizando diferentes longitudes de malla, al final optando por el definitivo ya que cumple la condición de estabilidad numérica de Courant. La malla definitiva consta de 800 elementos, es decir, 801 nodos que contienen la información del sistema tanto de input, como son el primer nodo y el del vertido residual, como de output, que esta información la contienen todos. Por último decir que se supone que no existe flujo en la dirección transversal, ya que se trata de un modelo 1D.

Estos datos y valores son introducidos en el modelo como se muestra en el anejo I en el archivo GRI.inp.

Condiciones iniciales y de contorno

El código necesita como condiciones iniciales el flujo másico circulante por el río y el flujo másico del vertido. Entonces se resuelve considerando el flujo de entrada de agua del río propagándolo en toda la longitud del medio.

Por tanto se puede entender que como condiciones iniciales se ha escogido las concentraciones de las especies acuosas tanto químicas como bioquímicas: 'HCO3', 'HPO4', 'H', 'NH4', 'O2', 'NO2', 'NO3', 'N2', 'SS', 'XH', 'XN1', 'XN2', 'XALG', 'XS', 'XCON' y 'XI' y que se muestran en la tabla 6.5. Cabe destacar que la concentración de O₂, oxígeno, y de HCO₃⁻, carbonato, tienen la concentración de saturación, como se ha explicado en el Capítulo 5, y se produce la reaireación en función del déficit que se genera en el interior del río, la cual se considera una condición de contorno en la superficie superior del medio hídrico.

Las condiciones de contorno de entrada del río y de la salida del río, dependen del nivel medio de agua en el río. Existen diferentes aspectos para fijar las condiciones de contorno. Para definir la condición de contorno aguas arriba, es decir, la entrada del río, se considera es el caudal medio del río Llobregat, y que se considera $Q = 0,2$ (m³/s), este dividido por el área de flujo, $A_f = 100$ (m²), se obtiene el flujo de agua del río circulante, en condiciones naturales, como $q = 200$ (Kg/m²·s).

Para la condición de contorno del flujo de entrada del vertido en el río, se define según un equivalente de producción de masa de agua residual por habitante y por día y el número de habitantes de la población de la que proviene el vertido. Se asume como patrón de análisis una población de 250000 habitantes, con una carga de 100(Kg/hab*día) y que por tanto se genera un flujo de vertido de $q = 3$ (Kg/m²*s).

El nivel de agua en el interior del modelo está controlado por la condición de contorno de entrada y se propaga en el sentido de aguas abajo. Los nodos están todos saturados y varían en cada prueba debido a que varía caudal de vertido.

En el contorno de salida se fija la presión de agua de salida, que se considera una condición de contorno natural, es decir que queda libre de restricciones.

La determinación de la cantidad de materia orgánica dentro del agua residual se realiza a partir de la consideración de un valor determinado por ensayos de las especies orgánicas. Además al tener el valor estequiométrico de las especies para cada reacción, que conforman el modelo, y sabiendo la relación que existen entre el flujo circulante y el flujo del vertido, es decir sabiendo la dilución, se puede obtener el valor del índice DQO, como se muestra en la tabla 6.4.

Tabla 6.4: Valores de las especies orgánicas para un flujo másico de agua residual de 3 (Kg/m²*s).

Especie	Valor (unidad)	DQO (mol/l)
Ss	4.00E-01 (molSs/l)	3.36E-04
Xs	2.78E-05 (molXs/l)	2.33E-08
Xh	2.56E-02 (molXh/l)	1.93E-05
Xn1	1.46E-04 (molXn1/l)	1.10E-07
Xn2	2.56E-05 (molXn2/l)	1.93E-08
Xi	7.46E-05 (molXi/l)	6.53E-08
Xalg	1.12E-07 (molXalg/l)	3.26E-09
Xcon	1.12E-07 (molXcon/l)	3.26E-09
		total = 3.55E-04

El índice DQO para esta configuración de especies orgánicas resulta ser $3.55 \cdot 10^{-4}$ (mol/l), que es lo mismo que decir 11.37 (mg/l).

Para la determinación de las especies químicas inorgánicas consideradas en el agua limpia del río y del agua residual tiene unos valores aproximados a los aconsejados por el departamento de Hidrología y Climatología del instituto de Geología en la Universidad de Postdam (Alemania) que son los que se muestran en la tabla 6.5.

Los valores de las especies bioquímicas consideradas se muestra en la tabla 6.5 para el agua limpia y el agua cloacal con un $q = 3$ (Kg/m²*s).

Tabla 6.5: Especies consideradas en el modelo en la condición inicial circulante en el río y en el vertido.

Espece	Concentración inicial río (mol/l)	Concentración inicial vertido (mol/l)
'HCO3'	3.2E-05 (CO _{2(atm)})	1.43E-03
'HPO4'	1.04E-07	2.08E-03
'H'	1.86E-07	6.32E-07
'NH4'	5.71E-07	3.67E-05
'NO3'	6.43E-06	1.94E-05
'O2'	2.6E-04 (O _{2(atm)})	1.00E-10
'NO2'	1.43E-07	4.35E-04
'N2'	4.9E-04 (N _{2(gas)})	4.9E-04 (N _{2(gas)})
'SS'	4.75E-08	4.00E-01
'XH'	1.00E-09	2.56E-02
'XN1'	1.00E-10	1.46E-04
'XN2'	1.00E-10	2.56E-05
'XALG'	1.12E-07	1.00E-10
'XS'	1.00E-10	2.78E-05
'XCON'	1.12E-07	1.00E-10
'XI'	1.00E-10	7.46E-05

Todos estos datos son introducidos en el programa como archivo de entrada que se muestra en el anejo I y se trata de los archivos 1_che.inp y GEN.inp.

Constantes cinéticas

Los valores de las constantes cinéticas de primer orden, como las constantes de media saturación y las constantes de inhibición son obtenidas después de una serie de cálculos del artículo Biochemical process equations del RWQM n°1 del autor Reichert et al. (2001), y son los que se exponen en la tabla 6.6 y 6.7.

Tabla 6.6 : Valores de las constantes de inhibición y media saturación del modelo de transporte reactivo, (mol/l).

Constantes cinéticas de 1er orden (T=25°C)	Valor (s ⁻¹)
kdea_alg_25	1.46E-06
kdea_con_25	8.63E-07
kgro_alg_25	2.91E-05
kgro_con_alg_25	2.43E-07
kgro_con_Xs_25	7.67E-06
kgro_con_Xh_25	6.11E-06
kgro_con_Xn1_25	6.11E-06
kgro_con_Xn2_25	6.11E-06
kgro_h_aer_25	3.28E-05
kgro_h_anox_25	2.63E-05
kgro_N1_25	1.51E-05
kgro_N2_25	1.80E-05
khyd_25	4.93E-05

kresp_alg_25	1.46E-06
kresp_con_25	8.63E-07
kresp_h_aer_25	3.28E-06
kresp_h_anox_25	3.28E-06
kresp_N1_25	9.45E-07
kresp_N2_25	8.17E-07

Tabla 6.7 : Se muestran los valores de las constantes cinéticas de 1er orden del modelo de transporte reactivo, (s^{-1}).

Constantes de media saturación y de inhibición	Valor (mol/l)
KHPO4_alg	6.45E-07
KHPO4_h_aer	6.45E-07
KHPO4_h_anox	6.45E-07
KHPO4_N1	6.45E-07
KHPO4_N2	6.45E-07
KN_alg	7.14E-06
KNH4_alg	7.14E-06
KN_het_aer	1.43E-05
KNH4_N1	3.57E-05
KNO3_h_anox	3.57E-05
KNO2_h_anox	1.43E-05
KNO2_N2	3.57E-05
KO2_alg	6.25E-06
KO2_con	1.56E-05
KO2_h_aer	6.25E-06
KO2_N1	1.56E-05
KO2_N2	1.56E-05
Ks_h_aer	1.88E-03
Ks_h_anox	1.88E-03

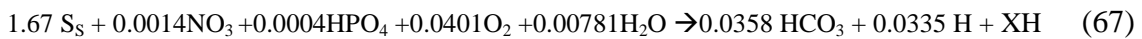
Estos valores se introducen en el modelo a partir del archivo de entrada que se muestra en el anejo I y que se llama Kinetics.dat.

Definición del sistema químico y bioquímico

La base de datos químicos y bioquímicos del modelo, se muestra en el anejo I en el archivo Master25.dat, donde para cada reacción que se introduce al sistema se tiene que resolver cada nodo. La simulación de transporte reactivo consta de las reacciones bioquímicas principales, que son las que se muestran en el anejo II, entonces el modelo queda definido a partir de las especies químicas y biológicas implicadas directamente con estas reacciones que han sido definidas en el apartado 5.1 y 5.2 del Capítulo 5 y el resto de especies químicas que se encuentran en equilibrio que se muestra en el apartado 5.3 del Capítulo 5.

En las ecuaciones 67 y 68 se muestra un proceso metabólico donde se ha realizado el cálculo de los coeficientes estequiométricos como se ha explicado en el Capítulo 5 con la definición de las sustancias orgánicas de la tabla 6.2 y los parámetros estequiométricos de la tabla 6.3, y en el que también se muestra la ley cinética con el valor de las constantes que constituyen las tablas 6.6 y 6.7, todas las reacciones se recogen en la primera parte del anejo II. La estequiometría se da considerando siempre que el coeficiente de las especies bacterianas es la unidad, como se enseña en la matriz estequiométrica en la segunda parte del anejo II.

El proceso bacteriano que se quiere mostrar es el crecimiento de las bacterias heterotróficas (X_H) por NO_3^- , ya que este metabolismo cinético incluye términos Monod catalización y Monod inhibición.



$$r_{\text{aergrwth et(NO}_3)} = (3.28\text{E} - 05) \frac{S_s}{(1.88\text{E} - 03) + S_s} \frac{O_2}{(6.25\text{E} - 06) + O_2} \frac{(1.43\text{E} - 05)}{(1.43\text{E} - 05) + \text{NH}_4} \quad (68)$$

$$\frac{\text{NO}_3}{(1.43\text{E} - 05) + \text{NO}_3} \left[\frac{\text{HPO}_4}{(6.45\text{E} - 07) + \text{HPO}_4} \right] \cdot X_H$$

Todos los procesos metabólicos con los coeficientes estequiométricos calculados en base a los parámetros de la tabla 6.2 y 6.3 se aportan en el anejo II.

Incógnitas del modelo

Una de las incógnitas del modelo de transporte reactivo, son los caudales de entrada de agua del vertido, que se determina a partir de un equivalente de población. Este equivalente se considera que tiene un valor medio de producción de masa de agua residual por habitante por tiempo y volumen, siendo 100 (Kg/día·habitante). Por tanto el caudal de agua residual varía en función de la población que provoque el vertido que se considere en el modelo de transporte reactivo.

Otra variable del modelo, sería las especies bioquímicas en el agua del río y en el agua de vertido del agua residual, pero gracias a la colaboración del Instituto Hidrológico de la Universidad de Postdam, como se ha comentado anteriormente, ha permitido determinar los parámetros que definían los dos tipos de aguas considerados en el modelo, el agua limpia del río y el agua residual. Para definir las especies orgánicas (S_s , X_s , X_H , X_{N1} , X_{N2} , X_{ALG} y X_{CON}), se obtiene a partir de ensayos biológicos que se someten las aguas contaminadas. Con los análisis se obtiene valores para las especies orgánicas y sabiendo las relaciones estequiométricas para cada reacción se puede deducir el índice DQO, véase tabla 6.4. Lo explicado anteriormente servía para todas las especies orgánicas excepto para los valores de las especies bacteriológicas X_H , X_{N1} y X_{N2} que su determinación a sido un trabajo bastante duro e incierto por falta de valores que dieran una idea aproximada de su posible población. Por tanto estas especies son las seleccionadas para realizar un análisis de sensibilidad del modelo en apartados posteriores de este estudio.

6.2.2 Resultados del modelo de transporte reactivo

La representación de resultados se realiza en diferentes gráficas donde se registra la concentración y la velocidad de los procesos que tienen lugar según la especie en función de su coeficiente estequiométrico.

Las gráficas de resultados de las concentraciones de las especies, se muestran en diferentes grupos como son los nutrientes, los gases disueltos, CIT y pH, materia orgánica sin vida, bacterias y por último organismos superiores. Los gráficos de resultados de las concentraciones de las especies, que se pueden considerar estacionarias, y los procesos, que provocan las variaciones de las concentraciones, se muestran como las velocidades de la reacción por el coeficiente estequiométrico de la especie considerada.

Para los resultados de las velocidades de los procesos que afectan a cada especie, se ha decidido representar los que intervienen en la especie de Ss, materia orgánica disuelta, y para el O₂. Se ha decidido la representación de solo estas dos especies al creer que son las especies que más se deben controlar en una contaminación de este tipo. Pero de todas maneras, en los sistemas bioquímicos hay que tener la idea de que todo está relacionado a partir de las bacterias que generan los procesos metabólicos. Por tanto ahora se muestra los resultados obtenidos en el modelo bioquímico multicomponente para una configuración química dada en las tablas 6.5 y 6.6 y correspondientes a cada tipo de agua.

Al producirse el vertido de agua residual, los procesos generados por los microorganismos presentes, provocan directamente un déficit de oxígeno, véase la figura 6.2. Los procesos que provocan el descenso son el crecimiento de bacterias heterotróficas en un momento inicial y con un fuerte descenso, pero que posteriormente una vez la materia orgánica presente ha sido eliminada, véase figura 6.4, estas bacterias no pueden crecer más. Posteriormente lo que provoca el consumo de oxígeno es la respiración aeróbica de estas bacterias, como se muestra en la figura 6.3. En el caso de que la concentración de oxígeno en el medio sea muy pequeña, la degradación de materia orgánica continúa, ya que las bacterias heterotróficas la siguen degradando anaeróbicamente, véase la evolución de esta materia orgánica disuelta en la figura 6.4.

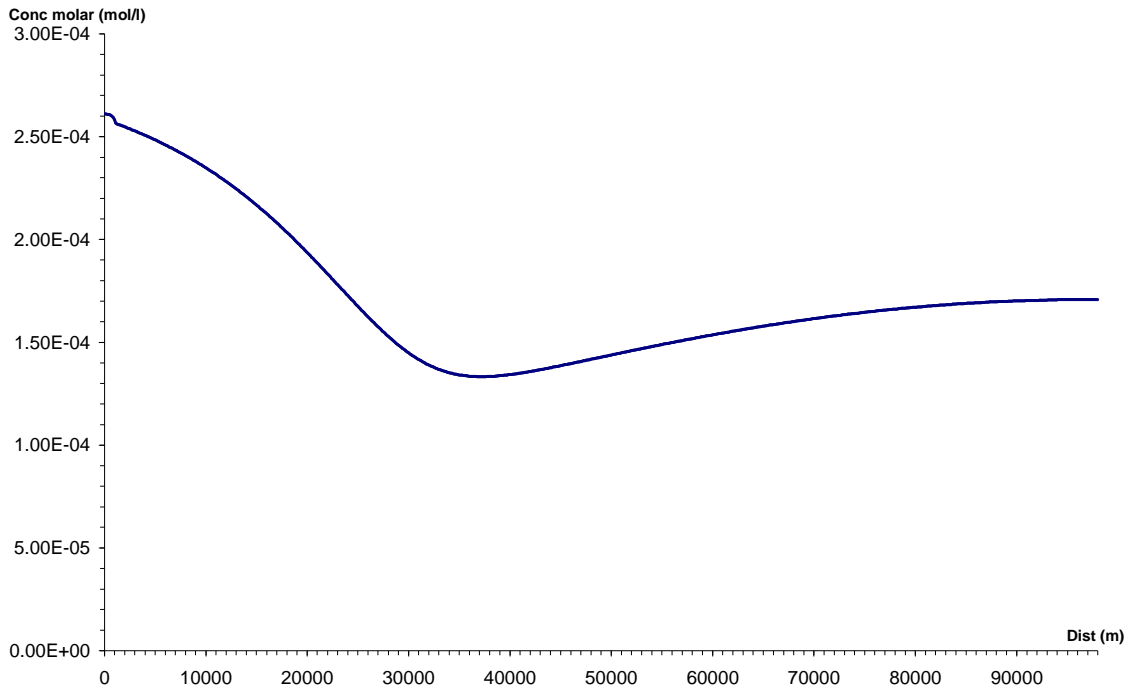


Figura 6.2: Evolución de la concentración de oxígeno para un vertido de 0.3 (m³/s)

La evolución de la concentración de oxígeno está en función de los procesos metabólicos, o no metabólicos, que suceden en el río. Existen procesos que provocan su consumo por metabolismos de crecimiento o respiración de las especies bacterianas. La posterior recuperación es provocada por la reaireación (O₂ atm) del río con la atmósfera, siguiendo la ley cinética del tipo $k_{O_2(atm)} \cdot (\text{Déficit de oxígeno})$, como se muestra en la figura 6.3.

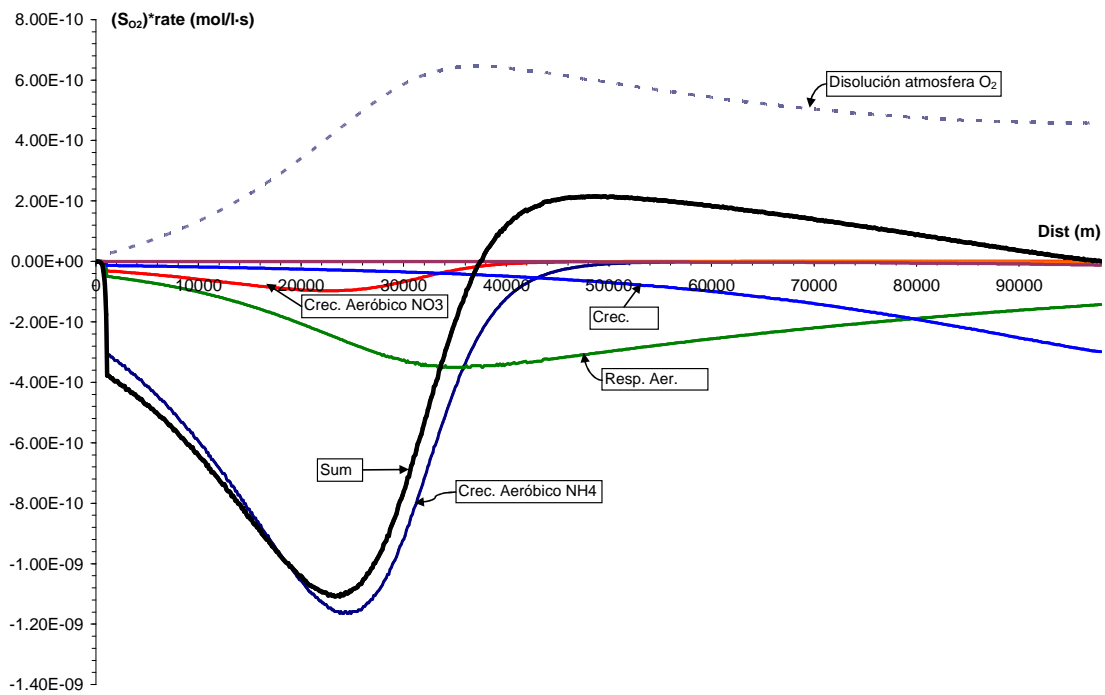


Figura 6.3: Procesos que intervienen en el consumo/producción de oxígeno.

Como se puede observar en la figura 6.3, las bacterias heterotróficas generan un brusco descenso de la concentración de oxígeno, principalmente utilizando como nutriente el NH_4^+ , donde en la figura 6.6 se visualiza la evolución de los nutrientes presentes en el agua que son especies nitrogenadas y fosfatadas.

Los microorganismos bacterianos dejan de crecer por la falta de materia orgánica (S_s) a la que degradar, esto se puede observar en la figura 6.4. Por tanto, únicamente, respiran produciendo un descenso de su concentración más prolongado y cada vez menor, ya que las bacterias se están degradando.

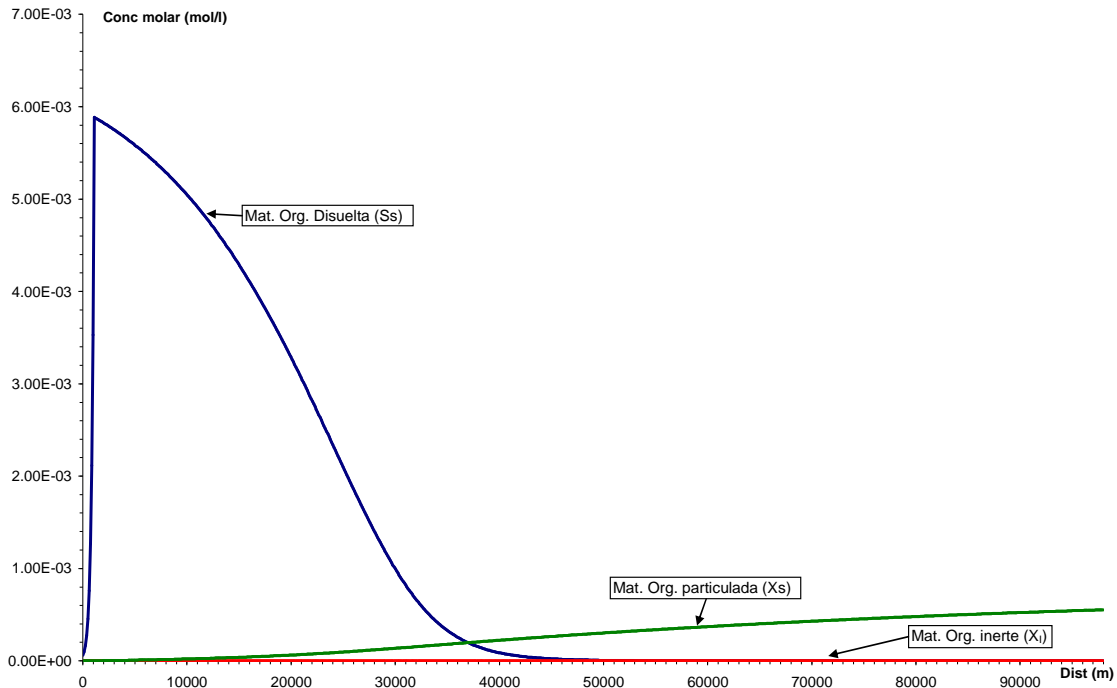


Figura 6.4: Evolución de la materia orgánica presente en el agua.

Observando la figura 6.4, además de la degradación de materia orgánica disuelta (S_s) que se aprecia claramente su descenso, también se incluye la materia orgánica particulada (X_s) y materia orgánica inerte (X_I). La materia orgánica particulada en comparación con la materia orgánica disuelta es muy pequeña y como ya se ha explicado en capítulos anteriores la materia particulada pasa a materia disuelta por la hidrólisis de la materia orgánica. Por lo que respecta a la materia orgánica inerte solo se acumula y no reacciona con nada.

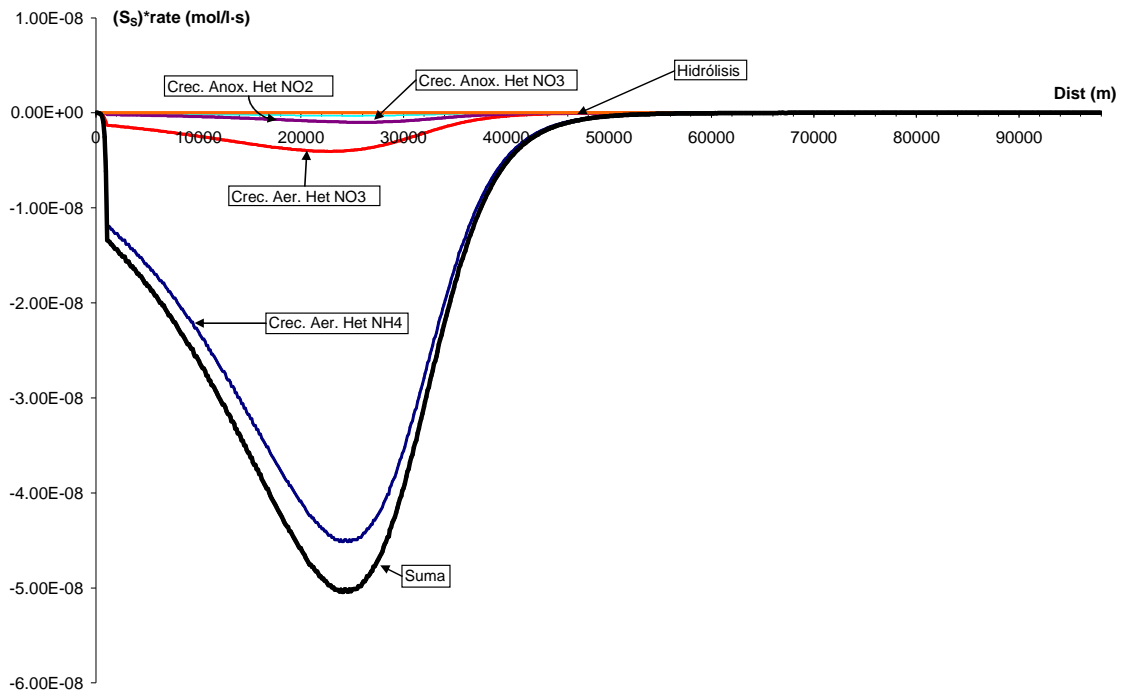


Figura 6.5: Procesos que afectan a la evolución de la materia orgánica (S_s) en aguas superficiales.

La degradación de la materia orgánica se produce principalmente por el crecimiento aeróbico de las bacterias heterotróficas con NH_4^+ , como nutriente y que en el modelo se llama 'Aer.GrowthHet(NH4)', pero donde también intervienen aunque en menor grado el crecimiento de heterótrofos con NO_3^- siendo 'Aer.GrowthHet(NO3)'. Incluso como el consumo de oxígeno es bastante grande se producen metabolismos anóxicos para el crecimiento de los microorganismos heterótrofos (X_H) como son 'Anox.GrowthHet(NO3)' y 'AnoxGrowthHet(NO2)', pudiéndose interpretar como desnitrificación, ya que utilizan el nitrógeno como oxidante para su crecimiento.

Entonces el consumo de la materia orgánica es directamente proporcional a la cantidad de microorganismos heterotróficos (X_H), por tanto una vez consumida toda la materia orgánica presente en el medio acuoso, las bacterias heterotróficas dejan de crecer y empiezan a decrecer, véase figura 6.6, debido a la oxidación de su propia materia celular por respiración y que en el modelo esta identificado como 'Aer.Resp.Het'.

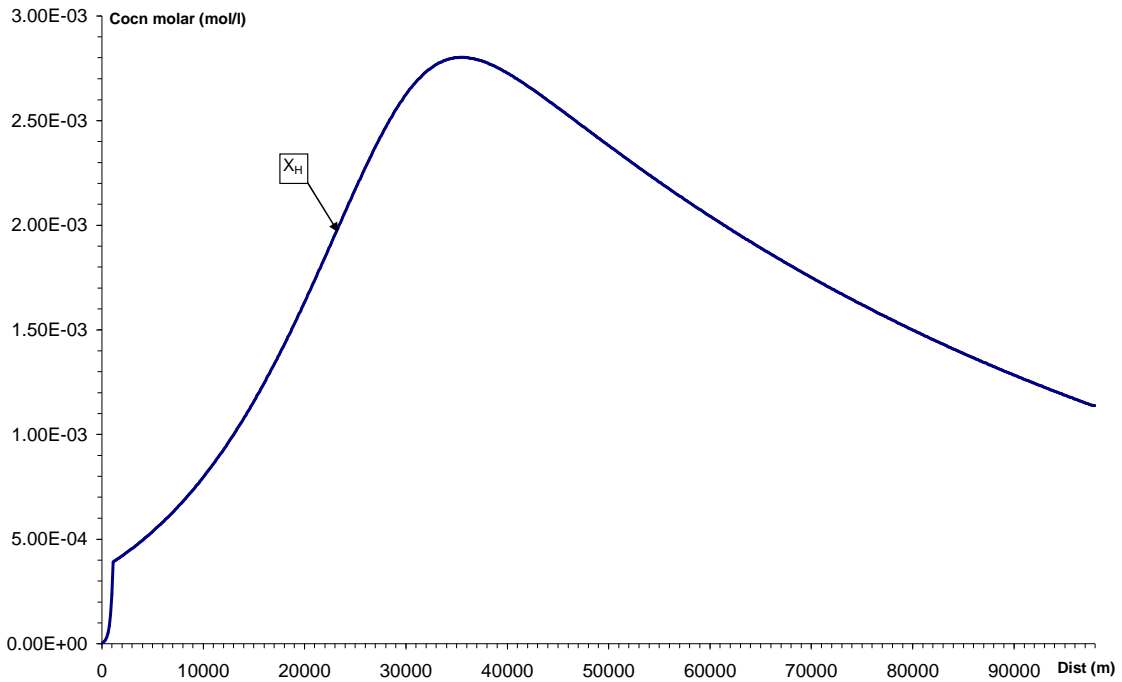


Figura 6.6: Evolución espacial de las bacterias heterotróficas (X_H).

Y los procesos metabólicos que provocan la variación de las especies bacteriológicas heterótrofas se muestran en la figura 6.7.

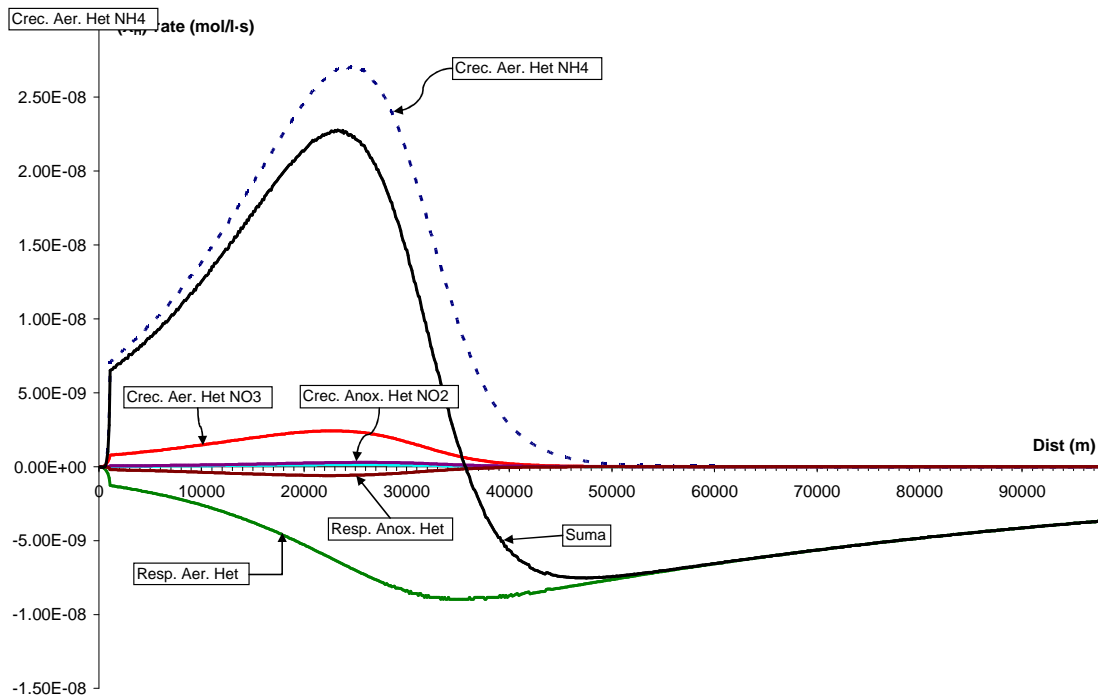


Figura 6.7: Procesos que generan las bacterias heterotróficas

En todos estos procesos también influye la presencia de nutrientes, sustancias nitrogenadas y fosfatadas, en las aguas contaminadas por el agua de vertido, figura 6.8.

Pero como la concentración de los nutrientes es muy grande no provoca limitación en ningún metabolismo, sino que más bien, las bacterias se alternan en su consumo y producción.

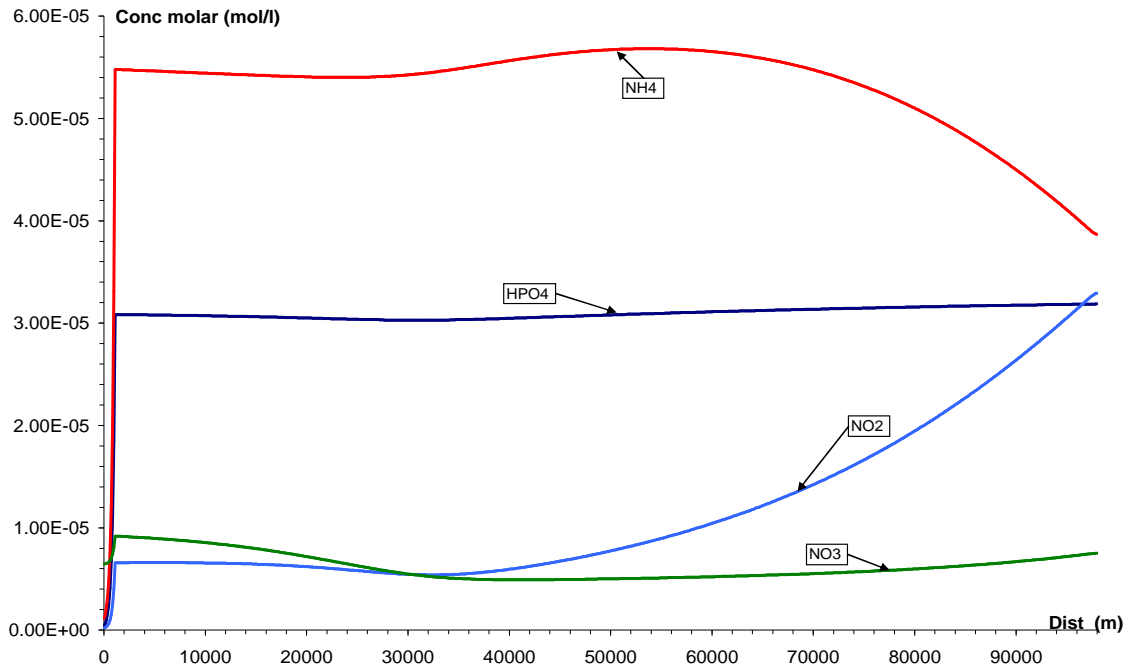


Figura 6.8: Evolución espacial de las especies nitrogenadas y fosfatadas.

Si se observa la curva de amonio, se aprecia que al inicio del vertido se genera un leve descenso provocado por el crecimiento de bacterias heterótrofas, pero que este descenso es pequeño ya que está compensado por la respiración de estas mismas bacterias que liberan al medio NH_4^+ . El posterior aumento es debido a que las bacterias heterótrofas ya no crecen, porque ya no queda materia orgánica que degradar, y solo respiran, liberando amonio.

La última variación del amonio es producida por el crecimiento de la bacteria nitrificadora de primer estadio (X_{N1}) que oxida el amonio (NH_4^+) a nitrito (NO_2^-), de una manera exponencial como se puede observar en la figura 6.9.

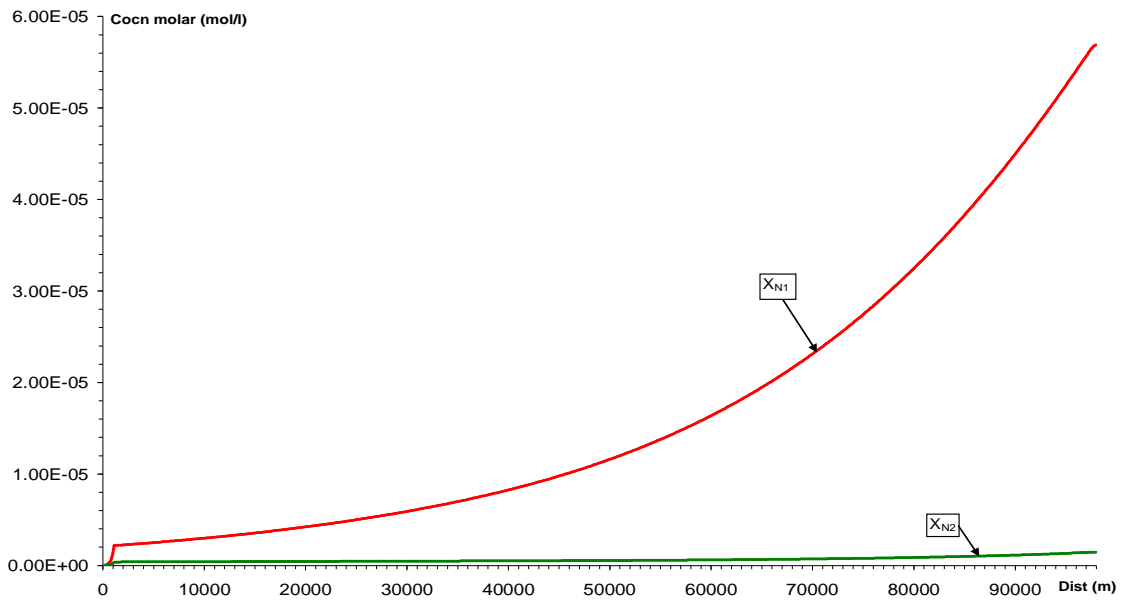


Figura 6.9: Evolución de las especies nitrificadoras con el espacio.

Debido a todos estos procesos metabólicos, las especies inorgánicas carbonatadas se compensan en su producción y consumo como se muestra en la figura 6.10 el CIT (Carbono Inorgánico Total). La evolución del pH del medio hídrico superficial donde se aprecia una cierta acidificación en las distancias próximas al vertido por la liberación de protones (H^+) de los metabolismos de crecimiento y de respiración de las bacterias heterotróficas, pero posteriormente cuando ya no crecen bacterias heterótroficas y su respiración va disminuyendo conforme disminuye su población y el medio se alcaliniza.

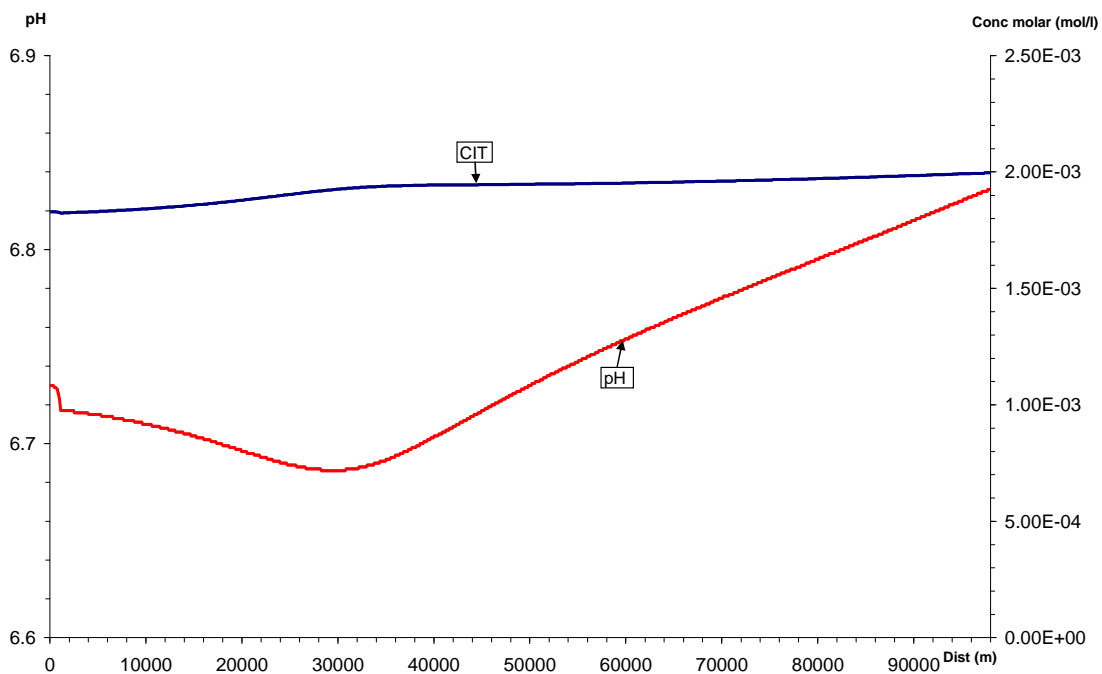


Figura 6.10: Evolución espacial del bicarbonato y del pH

Por último, comentar la posibilidad a que el medio sufra eutrofización por generación de algas, véase figura 6.11. En este caso analizado los resultados dan a conocer que la posibilidad de eutrofización del medio es probable, ya que el crecimiento de algas

aumenta pero que será un proceso lento, ya que la población de algas es muy minoritaria.

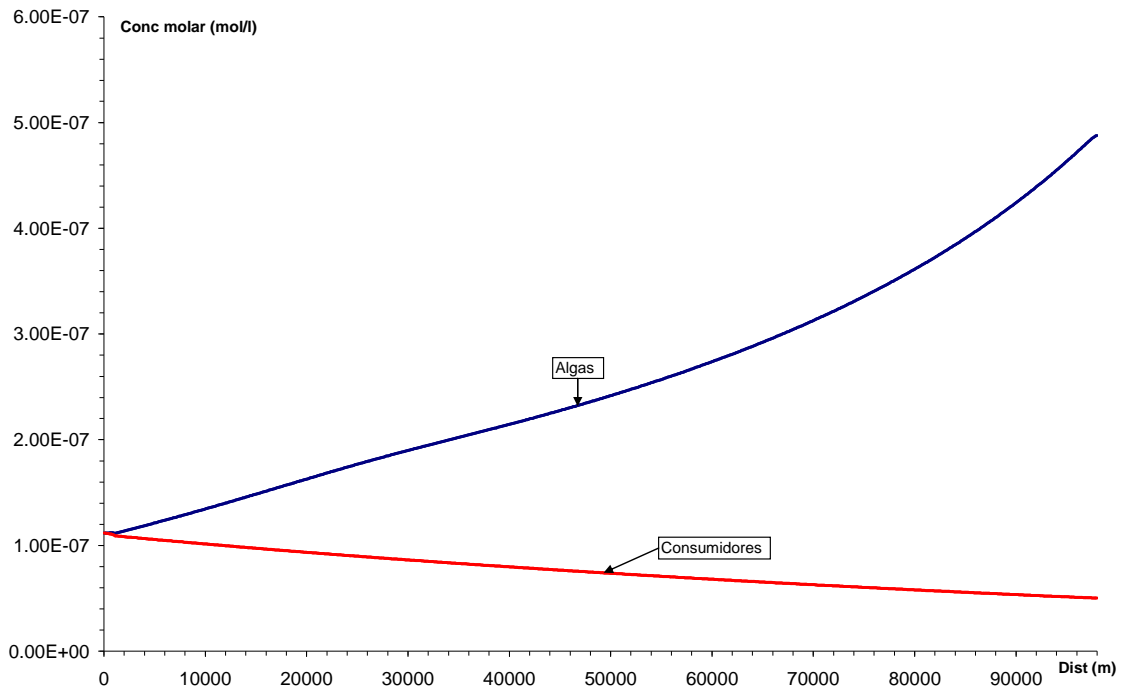


Figura 6.11: Evolución espacial de los organismos superiores presente en el medio superficial.

6.3 ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD DEL MODELO

Este apartado está dedicado a evaluar y analizar la variación de los resultados que se obtienen al cambiar los parámetros más inciertos, con respecto al modelo de referencia, el cual ha sido mostrado en el apartado 6.2.2. Las variables no determinadas, son el caudal de entrada de agua residual y el contenido en especies bacterianas (X_H , X_{N1} y X_{N2}).

6.3.1 Análisis de sensibilidad al variar el caudal de agua contaminada

Al entrar un vertido de agua residual en contacto con un río, el cual inicialmente se considera agua limpia, se producen diferentes efectos siendo el principal la pérdida de calidad del medio. Se realizan variaciones del flujo de agua de vertido que entra por el contorno, manteniendo el valor de los demás parámetros constante.

Se realiza la estimación del flujo de agua residual según un equivalente de agua residual que se genera una masa por habitante y por día, como se puede visualizar en la tabla 6.8. Por tanto, utilizando este dato se puede realizar la estimación de los procesos de un vertido para una población pequeña el cual la agresión al medio es prácticamente ínfima y para una gran ciudad, de 4 millones de habitantes, donde sería un caso extremo de contaminación.

Tabla 6.8: Valores del flujo de agua residual en función de la población considerada, en color gris el flujo seleccionado como patrón .

	Población	Media por habitante		Caudal de agua residual		Flujo de agua residual	
1	86400	100	(l/dia*hab)	0.1	(m3/s)	1	(Kg/m2.s)
2	250000	100	(l/dia*hab)	0.289351852	(m3/s)	2.893519	(Kg/m2.s)
3	600000	100	(l/dia*hab)	0.694444444	(m3/s)	6.944444	(Kg/m2.s)
4	925000	100	(l/dia*hab)	1.070601852	(m3/s)	10.70602	(Kg/m2.s)
5	4000000	100	(l/dia*hab)	4.62962963	(m3/s)	46.2963	(Kg/m2.s)

Como sería esperable, en los casos en que el flujo másico de agua contaminada sea menor al caso considerado de referencia, la contaminación sobre este medio también lo es, provocando una menor déficit de oxígeno, pero esto también provoca que la materia orgánica presente tenga una degradación más lenta. En el caso contrario, donde se produzca un vertido de agua residual mayor del que se ha asumido como referencia (tabla 6.8) es esperable que los metabolismos sucedan antes y con mayor magnitud, provocando un déficit de oxígeno mayor e incluso desoxigenando el medio, véase figura 6.12. En esta figura se puede observar que un flujo de agua residual mayor al que se ha asumido de referencia provoca inicialmente un fuerte déficit de oxígeno en el medio, que una vez los organismos heterótrofos han degradado la materia orgánica se inicia una lenta recuperación de oxígeno en el medio acuoso por reaireación, ya que también actúa la nitrificación consumiendo oxígeno pero en menor magnitud y permite cierta recuperación de oxígeno en el medio. En el caso de que el flujo residual sea menor el déficit de oxígeno es menor debido a la lenta degradación de materia orgánica, como se esperaba.

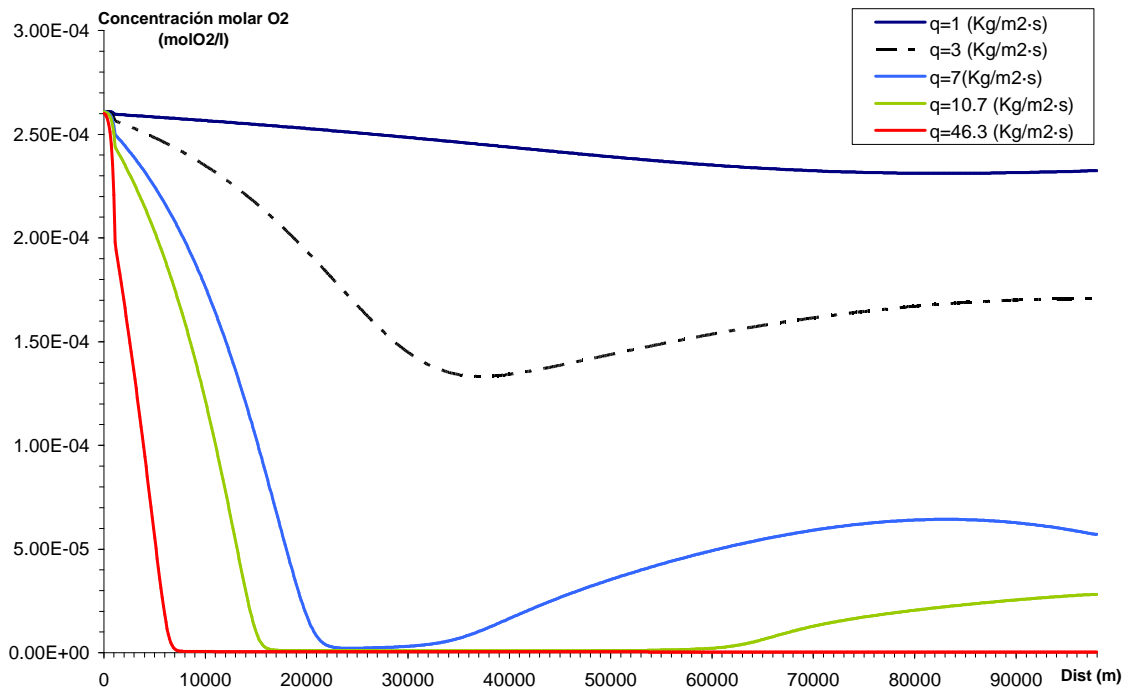


Figura 6.12: Variación de la concentración de oxígeno al varia el flujo de agua residual.

Como se puede observar en el caso de tener una población de 4 millones de personas que provoca un flujo de vertido de 46.3 (Kg/m²·s), (tabla 6.10), la eliminación del oxígeno presente en el medio que esta en saturación, por tanto en equilibrio con la atmósfera, se produce en 6 Km y no se produce ninguna recuperación en los 92 Km restantes del río. Esto provoca la destrucción total del ecosistema existente anteriormente.

La figura 6.12 esta directamente relacionada con las bacterias presentes en el agua y con la materia orgánica que degradan las bacterias heterótrofas utilizando el oxígeno, para que estas puedan crecer, como se muestra en la figura 6.13. La recuperación del oxígeno se produce por que las bacterias heterótrofas ya no crecen por falta de materia orgánica y solo respiran degradándose ellas mismas, necesitando menos oxígeno y por tanto permitiendo una reaireación lenta del medio. Entonces el caudal de agua residual, es una variable que condiciona claramente la evolución de la recuperación del medio, como se muestra en la figura 6.14.

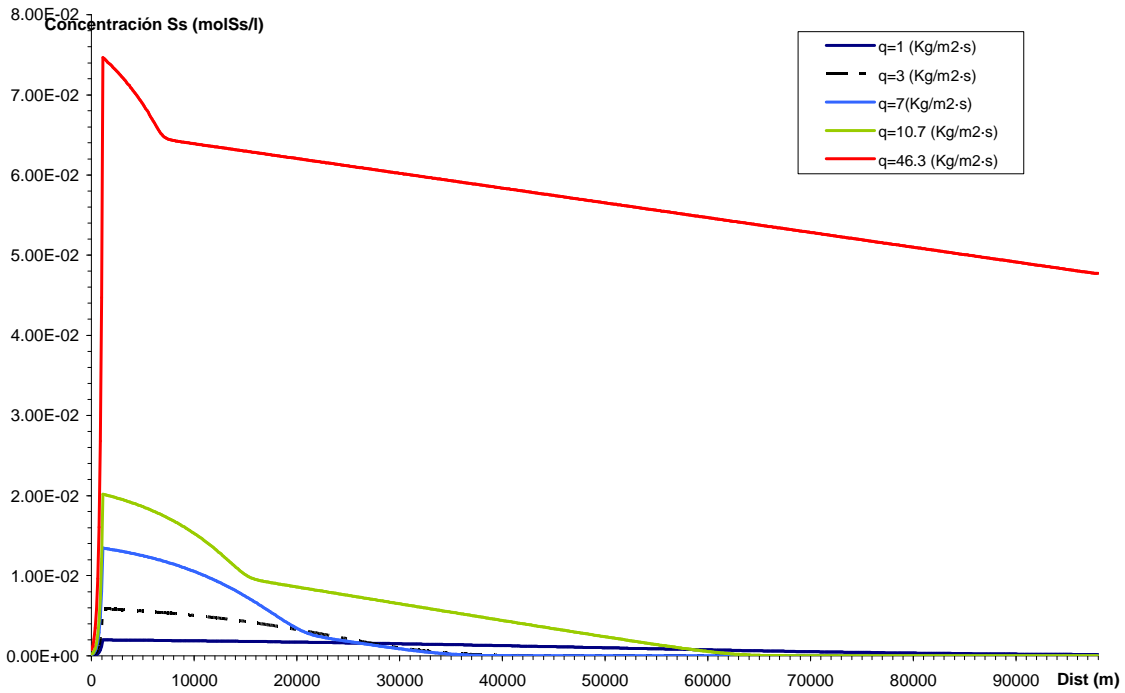


Figura 6.13: Degradación de materia orgánica en función del flujo másico de vertido.

La población de bacterias heterótrofas empieza a disminuir, es decir, a dominar en su metabolismo la degradación de su microorganismo, como la respiración, una vez la materia orgánica ha sido consumida completamente. Como se puede observar en la figura 6.13 y en la figura 6.14 la relación existente entre la presencia de materia orgánica y las bacterias heterótrofas en función del flujo de agua residual que se quiera modelar.

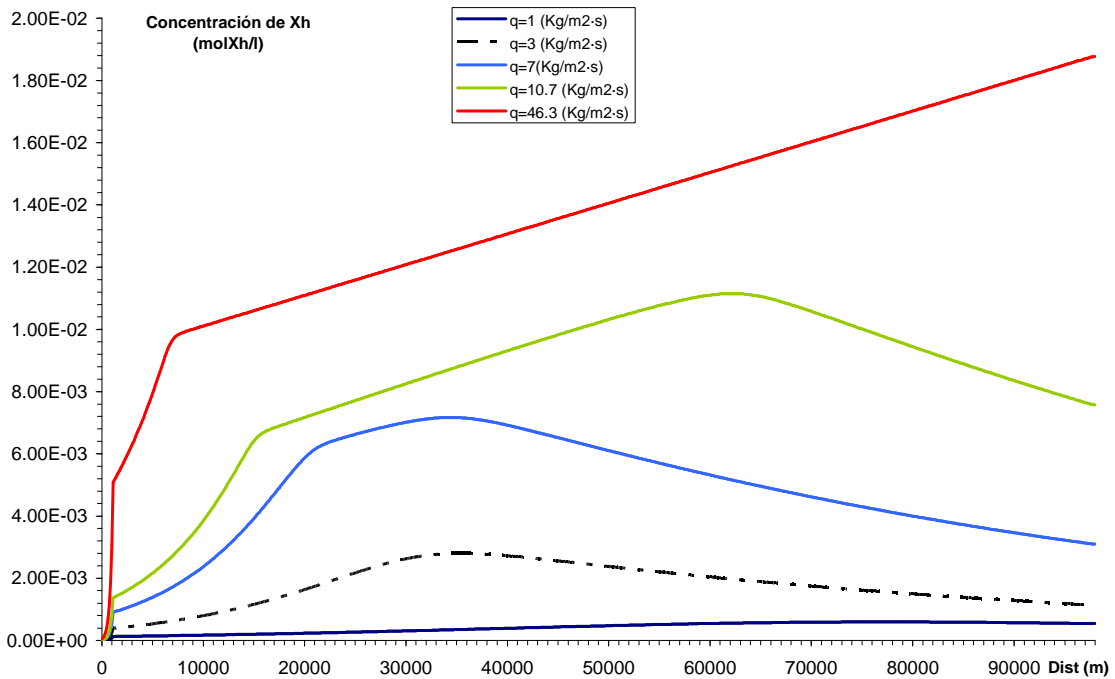


Figura 6.14: Evolución espacial de las bacterias heterótrofas en función del flujo másico considerado.

Un aspecto importante del estudio del vertido es la situación anóxica, donde las bacterias heterótrofas (X_H) degradan la materia orgánica por oxidación mediante sustancias formadas por nitrógeno, como son los nitratos (figura 6.15) y los nitritos (figura 6.16).

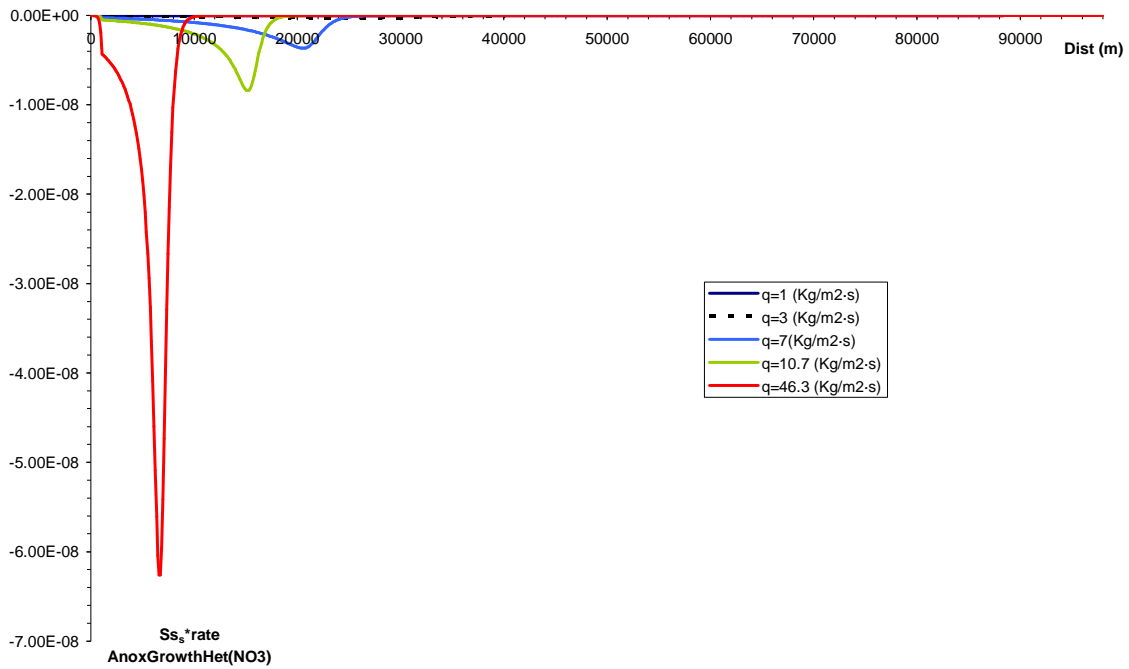


Figura 6.15: Procesos de denitrificación por NO_3^- .

Se puede observar que como es lógico con un flujo másico mayor el déficit de oxígeno aumenta (figura 6.12) entonces la nitrificación sigue a esta relación produciendo una mayor degradación anóxica de materia orgánica disuelta, ya que las sustancias de nitrógeno no son limitantes.

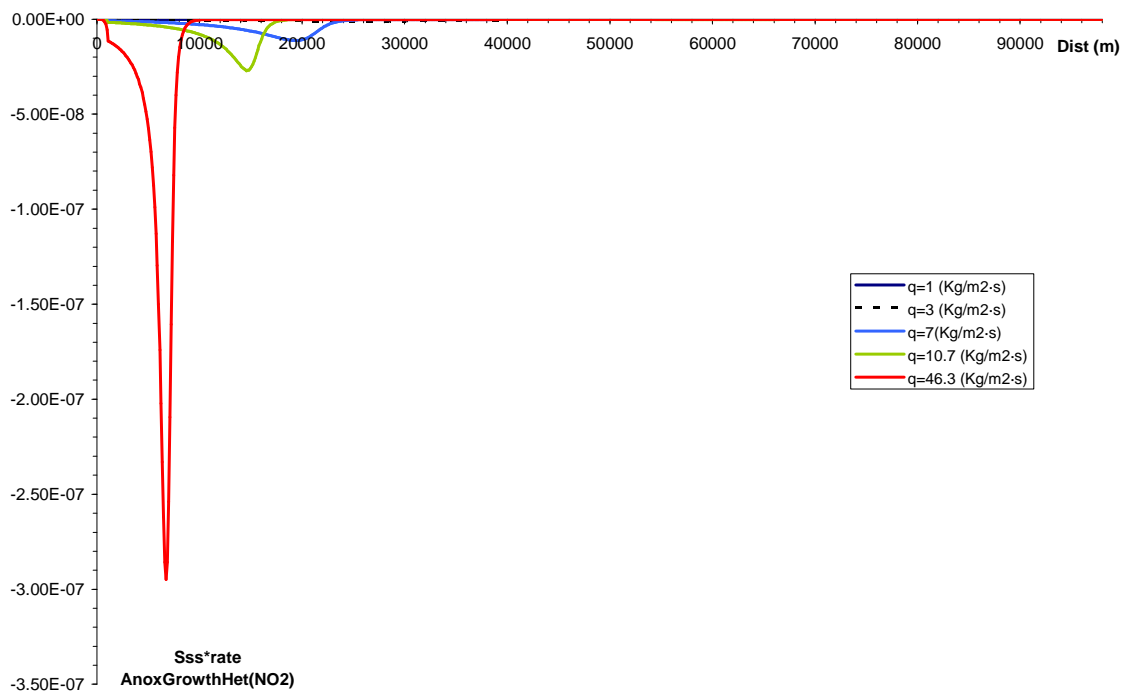


Figura 6.16: Procesos de denitrificación por NO_2^- .

6.3.2 Análisis de sensibilidad de la cantidad de bacterias modeladas

El otro parámetro del modelo a considerar es la concentración de las especies bacterianas. Estos microorganismos están representados por tres especies diferentes que son las bacterias heterótrofas (X_H), bacterias nitrificadoras de primer estadio (X_{N1}) y bacterias nitrificadoras de segundo estadio (X_{N2}). Estas especies bacterianas se diferencian del resto de microorganismos por las funciones metabólicas que realizan. El motivo para que sean estas las especies bacterianas, para realizar un análisis de sensibilidad, es por la gran incertidumbre que generan en las aguas superficiales residuales como parámetro a determinar. Existen muy pocos métodos de medida de estas especies, y menos aun que aporten resultados fiables y creíbles. Por este motivo las especies bacterianas resultan ser una variable independiente interesante para evaluar los resultados con su variación.

La variación de estas especies bacterianas se ha realizando modificando la concentración de entrada en el agua residual y manteniendo las otras sustancias modeladas con igual concentración que la asumidas en el patrón, véase tabla 6.5. Se ha variando la concentración de las bacterias en un orden de magnitud mayor y un orden menor, partiendo de la concentración de referencia. Entonces se obtienen tres tipos de aguas residuales, que al entrar en contacto con el agua limpia del río se obtiene un valor del índice DQO, para cada tipo de agua modelada.

Las concentraciones consideradas para las bacterias y el valor de DQO que genera se muestran en la tabla 6.9 y en la tabla 6.10.

Tabla 6.9: Valores de las bacterias para cada tipo de agua modelada.

Especie	Patrón	Patrón*10 ¹	Patrón*10 ⁻¹
X_H	2.56E-02	2.56E-01	2.56E-03
X_{N1}	1.46E-04	1.46E-03	1.46E-05
X_{N2}	2.56E-05	2.56E-04	2.56E-06

Tabla 6.10: Valores del índice DQO que generan los tres tipos de agua.

Patrón	Patrón*10 ¹	Patrón*10 ⁻¹	Índice DQO
3.55E-04	5.30E-04	3.38E-04	(mol/l)
11.37	16.97	10.81	(mg/l)

Para entender las variaciones que generan los tipos de agua considerados, y de las cuales se muestran su progreso a lo largo del río modelado, pudiendo registrar y analizar

su evolución y comportamiento de los principales parámetros químicos y orgánicos. Estos parámetros son las especies químicas como el oxígeno, los nutrientes y las especies orgánicas.

Para poder analizar la evolución del oxígeno es muy importante tener en cuenta la concentración de bacterias consideradas, ya que estos organismos son los que provocan el primer y principal descenso del oxígeno. También cabe destacar que la evolución espacial del oxígeno puede ser debida a diferentes orígenes. Esto se puede comprobar en la figura 6.17.

Como es esperable, con una mayor concentración de bacterias en un agua contaminada el déficit de oxígeno que se genera en la situación inicial es mayor. Lo opuesto ocurre al descender la concentración bacteriana.

Un segundo análisis de la evolución del oxígeno es que la recuperación de esta especie química también varía al modificar la concentración de bacterias. Observen que con una mayor carga bacteriana la recuperación se ha más lenta por la gran concentración de bacterias, las cuales respiran y provocan que el oxígeno disuelto no se recupere a través de la reaireación con la atmósfera. La lenta recuperación de oxígeno también la provoca la nitrificación de 1er estadio y de 2º estadio, que se genera una vez la degradación de materia orgánica a terminado. Por eso, no permite que el oxígeno disuelto en agua se recupere.

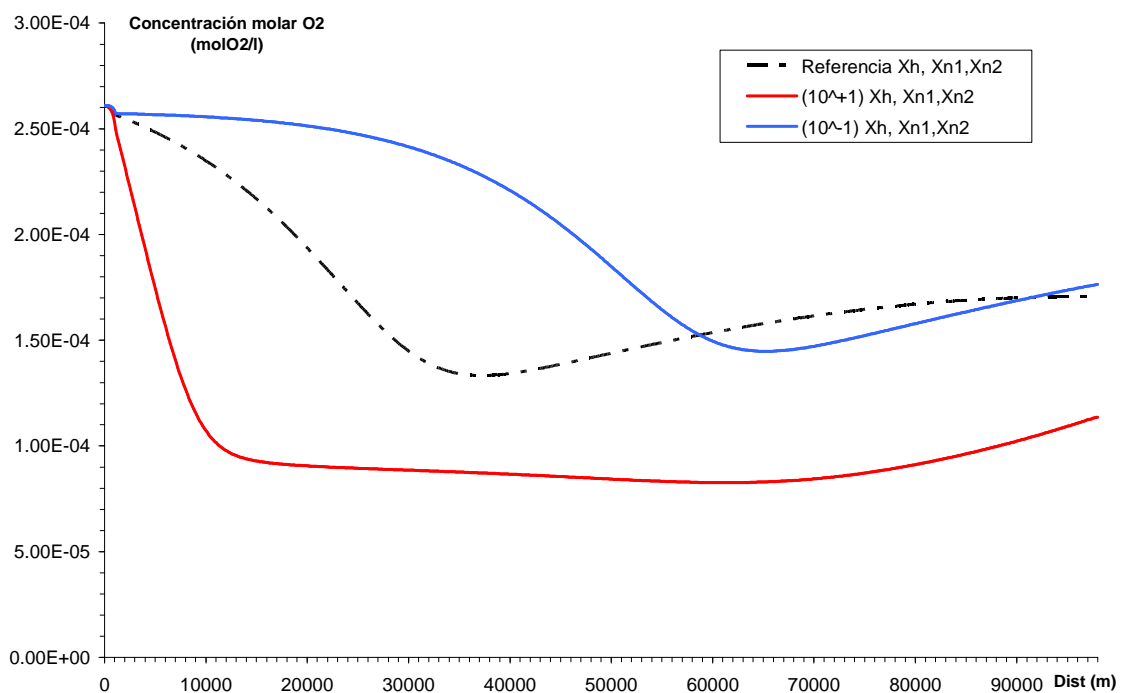


Figura 6.17: Evolución de la concentración de oxígeno disuelto en agua en función de el tipo agua.

El comportamiento de la curva de oxígeno disuelto en el agua superficial varía claramente cuando se aumenta o se disminuye las especies bacterianas. Como se puede observar en la figura 6.17, al incrementar en un orden de magnitud las bacterias presentes en el agua provoca que la curva de oxígeno se ensanche y alcance un valor de oxígeno cercano a $8 \cdot 10^{-5}$ (molO₂/l), mientras en la curva de oxígeno de referencia no descendía de $1.3 \cdot 10^{-4}$ (molO₂/l). En cambio para una menor concentración de oxígeno el

valor de oxígeno desciende casi a $1.4 \cdot 10^{-4}$ (molO₂/l), siendo valores más cercanos al de referencia. Este comportamiento puede ser debido a la concentración de materia orgánica disuelta (Ss) presente en el agua, ya que como mayor es la cantidad de bacterias heterótrofas menor es el tiempo para degradarla. A partir de la degradación de la materia orgánica genera un fuerte crecimiento de las bacterias heterotróficas y su metabolismo catabólico de respiración aeróbica consume más oxígeno como mayor es la cantidad de estas bacterias.

La variación de las especies orgánicas y en particular la concentración de materia orgánica disuelta (Ss) se muestra en la figura 6.18.

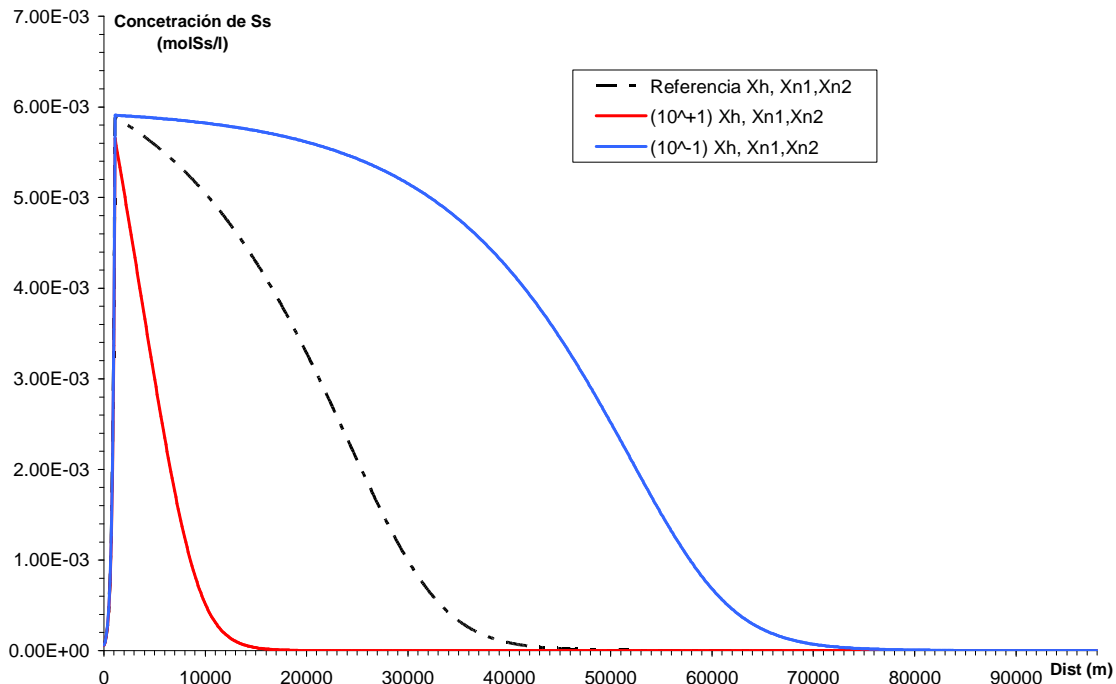


Figura 6.18: Evolución espacial de la concentración de materia orgánica disuelta (Ss) en función de la concentración de bacterias presentes en el agua.

Los resultados que se obtienen debido a la evolución de la materia orgánica disuelta siguen el comportamiento natural, en los cuales se puede observar que como mayor es la carga bacteriana. Cabe observar que la degradación de la materia orgánica se produce a mayor velocidad como mayor es el número de bacterias heterotróficas del modelo.

Los últimos parámetros analizados, con la variación de la concentración de bacterias, son las especies químicas utilizadas como nutrientes y en especial las especies nitrificadas que son el amonio (NH₄⁺), el nitrito (NO₂⁻) y el nitrato (NO₃⁻). Estas especies son representadas en figuras 6.19, 6.20, 6.21, donde se muestra la evolución espacial de la especie considerada para cada tipo de agua.

El amonio es utilizado como nutriente en el crecimiento aeróbico de bacterias heterotróficas e igual que el nitrato. Mientras el nitrito y el nitrato es utilizado para el crecimiento de estas bacterias pero en condiciones anóxicas.

Las bacterias nitrificadoras afectan principalmente a estas especies químicas ya que son los principales organismos en degradar las sustancias formadas por nitrógeno, pero todo esto sucede una vez la materia orgánica disuelta en agua ha sido eliminada completamente.

Como se puede observar en la figura 6.19, en los kilómetros iniciales existe una pequeña eliminación de amonio debido al crecimiento aeróbico y/o anaeróbico de bacterias heterotróficas, donde a mayor cantidad de estas bacterias mayor es el descenso inicial.

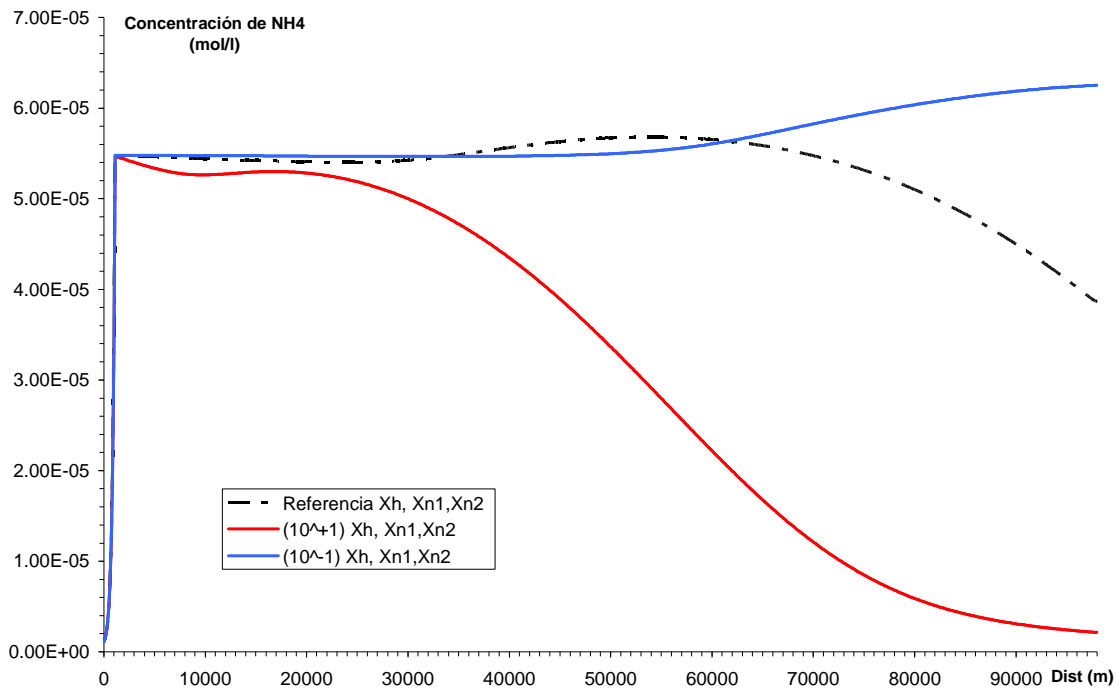


Figura 6.19: Evolución espacial del amonio en el medio modelado en función del tipo de agua considerada.

Una vez la materia orgánica disuelta ha sido eliminada del sistema multicomponente, véase la figura 6.18., empieza a actuar la nitrificación en primer estadio, que elimina el amonio, véase figura 6.19, y produce nitrito, véase figura 6.20.

Es esperable que con una mayor concentración de bacterias nitrificadoras de primer estadio, la eliminación del amonio tenga una velocidad mayor que en los otros casos, donde es menor la concentración de las bacterias.

Estas bacterias crecen nitrificando y dejan de hacerlo cuando el amonio del sistema ha sido eliminado. A continuación se inicia la nitrificación de segundo estadio que oxida el nitrito del sistema para el crecimiento de las bacterias nitrificadoras de segundo estadio (X_{N2}) produciendo nitrato. Esta secuencia se puede observar en las figuras 6.19, 6.20 y 6.21. En estas figuras se puede observar claramente que con una alta concentración de bacterias nitrificadoras se desarrolla completamente los dos estadios en que ha sido desglosada la nitrificación. Por tanto con una concentración menor de bacterias en el agua contaminada, no se desarrolla completamente estas dos secuencias, sino que solo se puede observar la tendencia inicial de estos metabolismos.

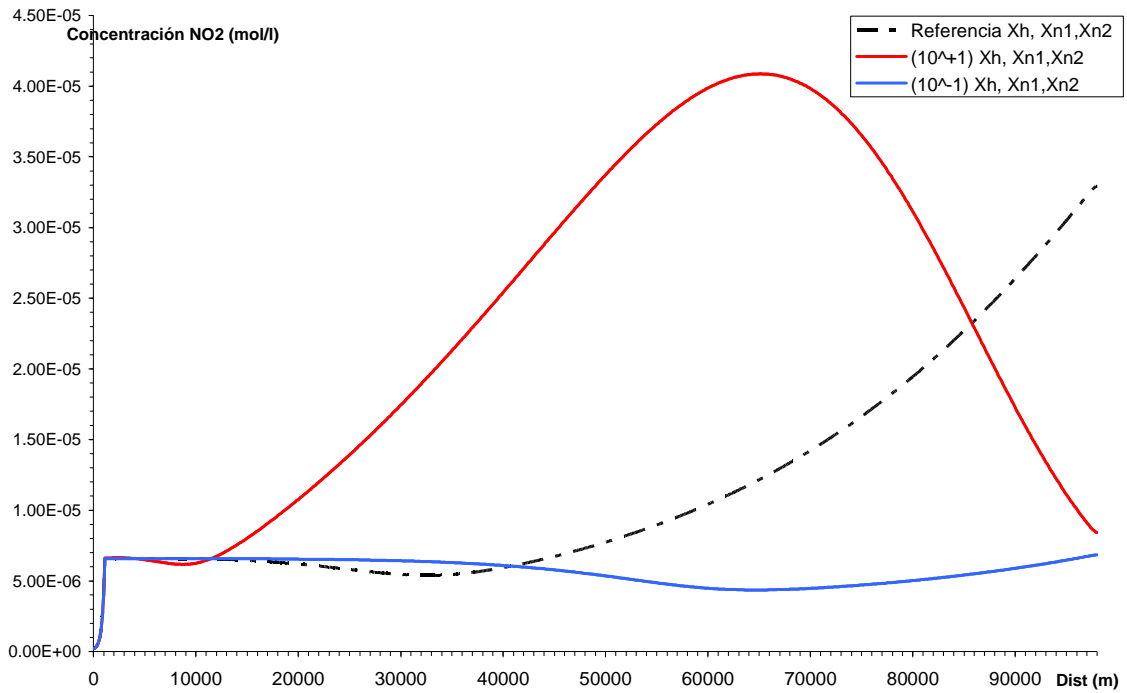


Figura 6.20: Evolución espacial del nitrito en función de la concentración de bacterias.

El nitrato, como se ha explicado para el amonio, se utiliza como nutriente de las bacterias heterotróficas por eso en los kilómetros iniciales se produce un descenso, mayor y más rápido como mayor es la presencia de estas bacterias.

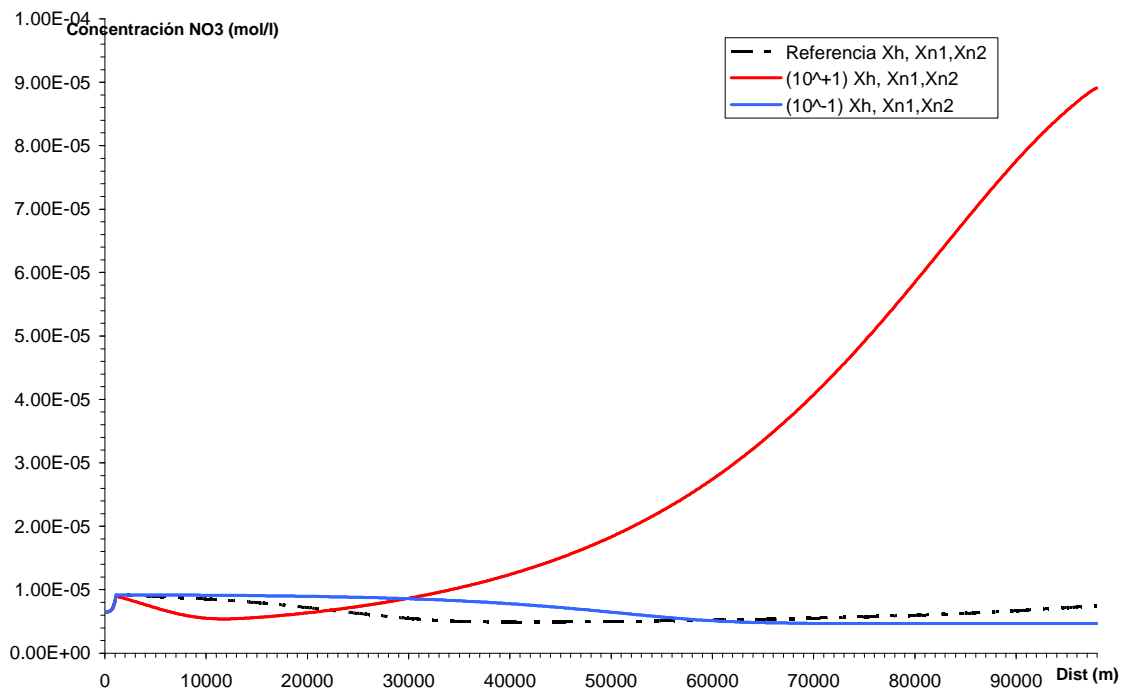


Figura 6.21: Concentración de nitrato en el medio según las bacterias presentes en el agua.

Por último se muestra en las figuras 6.22, 6.23 y 6.24 las poblaciones de bacterias heterotróficas, nitrificadoras de primer estadio y nitrificadoras de segundo estadio,

correspondientemente. Estas figuras se muestran en función del tipo de agua y así poder observar las variaciones de población que se generan. Se obtienen unos resultados de crecimiento y muerte de estos microorganismos que se pueden considerar naturales, debido a lo explicado en los comentarios anteriores en este capítulo de resultados.

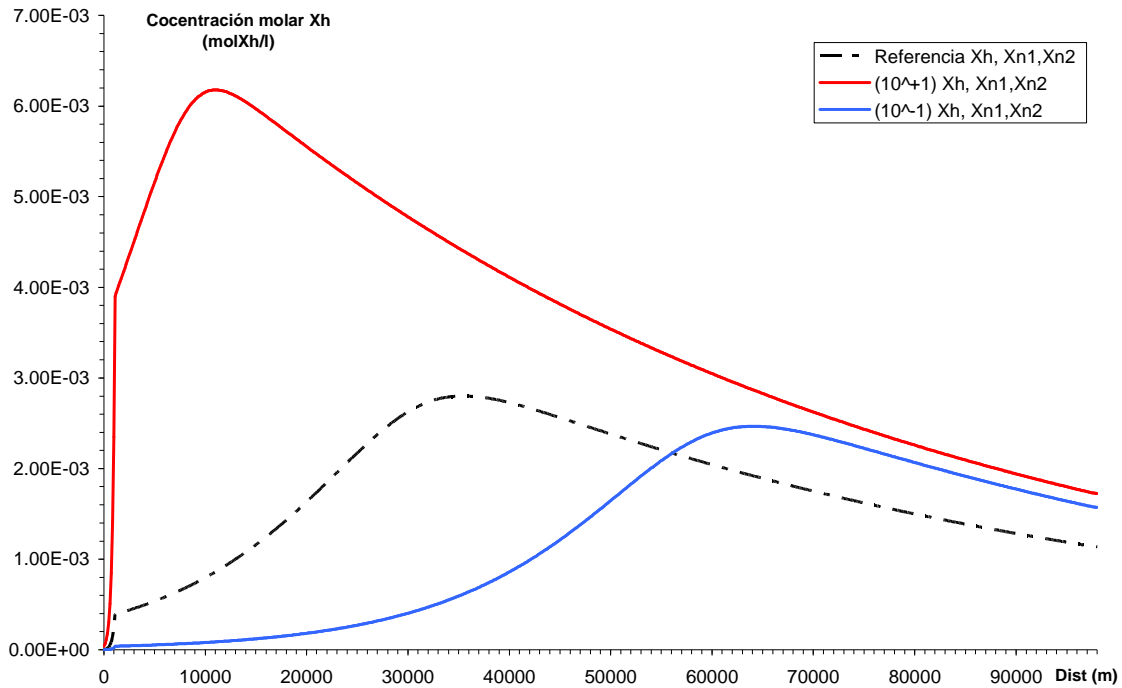


Figura 6.22: Evolución espacial de las bacterias heterotróficas en función de la concentración inicial.

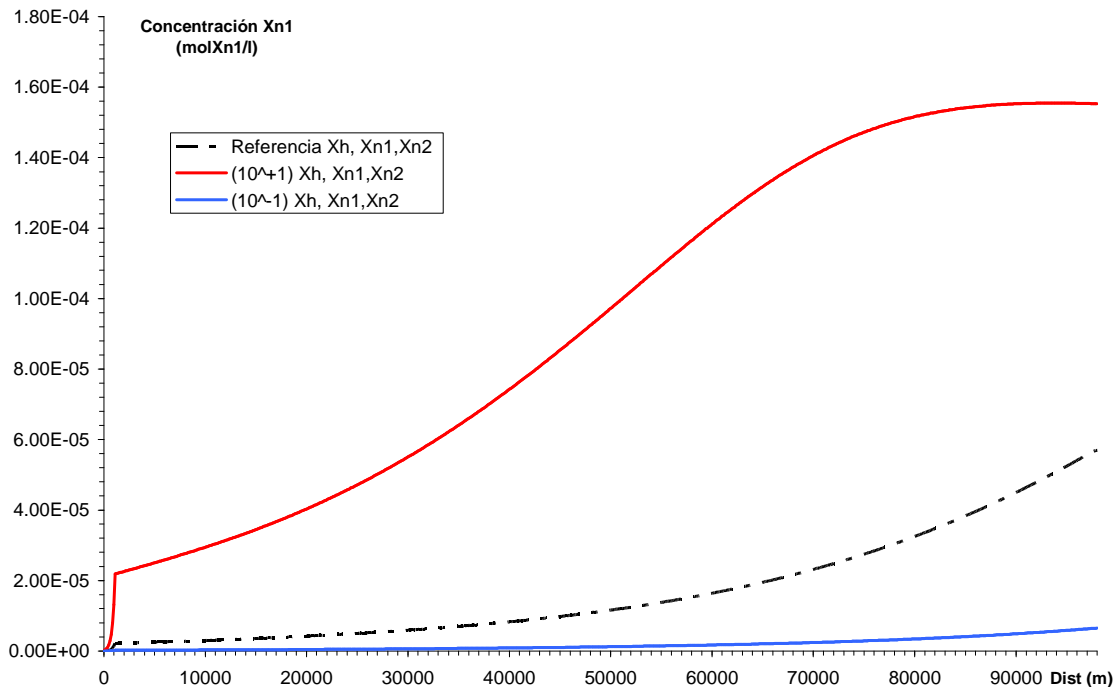


Figura 6.23: Evolución espacial de las bacterias nitrificadoras en primer estadio en función de la concentración inicial.

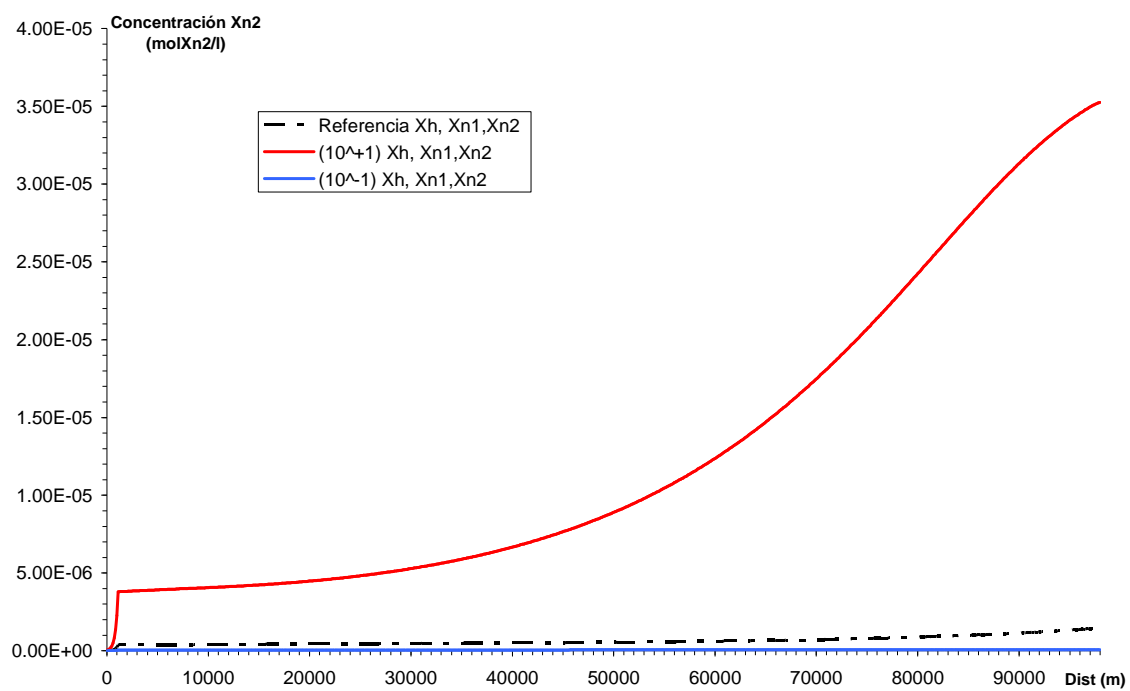


Figura 6.24: Evolución espacial de las bacterias nitrificadoras de segundo estadio en función de la concentración inicial.