

III Reunión Interdisciplinaria de Tecnología y Procesos Químicos

13 al 16 de abril de 2014. Los Cocos, Córdoba, Argentina.

RT093 - PRIMERAS APLICACIONES DE ASPEN PLUS AL BENEFICIO DE MINERALES DE LA REGION DEL NOA

S. Gamarra, L.A. Benitez, A. Riveros, L. Mattanella, H. Flores

RT094 - ELIMINACION DE AZUFRE MEDIANTE DESULFURACIÓN OXIDATIVA CON SBA-16 MODIFICADA CON TITANIO

L. Rivoira, B. Ledesma, V. Valles, M.V. Ponte, O. Anunziata, A. Beltramone

RT095 - SIMULACIÓN Y DISEÑO DEL PROCESO DE DESHIDRATACIÓN DE UNA PLANTA DE ACONDICIONAMIENTO DE GAS NATURAL

L.A. Benitez, J.P. Gutierrez, L. Ale Ruiz, E. Erdmann, E. Tarifa

RT096 - DESIGN OF AN ALGAE-BASED BIOREFINERY FOR THE INTEGRATED PRODUCTION OF BIODIESEL AND BIOPLASTICS

F.D. Ramos, V. Estrada, M.A. Villar, M.S. Díaz

RT098 - INTEGRATED SUPERCRITICAL EXTRACTION AND IMPREGNATION PROCESS FOR PRODUCTION OF ANTIBACTERIAL SCAFFOLDS

A. Fanovich, P. Jaeger

RT099 - OXIDACIÓN CATALÍTICA DE SULFUROS PARA AUMENTAR SU BIODEGRADABILIDAD

C. Saux, H. Bona, M.S. Renzini, L.B. Pierella

RT100 - DESARROLLO DE PELÍCULAS DE POLIETILENO HEMOCOMPATIBLES

A.L. Grafia, G. Michanetzis, Y. Missirlis

RT102 - MODELADO ECOLÓGICO DEL EMBALSE LOS MOLINOS

S.B. Rodriguez Reartes, V. Estrada, R. Bazán, N. Larrosa, A. Cossavella, A. López, F. Busso, M.S. Díaz

RT103 - SUR: BIBLIOTECA DE SIMULACIÓN PARA FLUIDOS MULTICOMPONENTES EN EL ENTORNO DE PROGRAMACIÓN INTERACTIVO IPHYTON

M. Gaitán, J. Scortechini, M. Cismondi

RT104 - CARACTERIZACIÓN DE FRACCIONES PESADAS DE FLUIDOS DE RESERVORIO PARA SU MODELADO EN BASE A ECUACIONES DE ESTADO

N. Heredia, M. Cismondi

RT105 - COMPORTAMIENTO DE FASES DE FLUIDOS SINTÉTICOS: RELEVAMIENTO DE DATOS Y PREDICCIONES CON LAS ECUACIONES DE ESTADO PR Y RKPR UTILIZANDO EL SOFTWARE SUR-FLUIDS

MODELADO ECOLÓGICO DEL EMBALSE LOS MOLINOS

S. B. Rodríguez Reartes⁽¹⁾, V. Estrada⁽¹⁾, R. Bazán^(2,3), N. Larrosa⁽³⁾, A. Cossavella^(3,4), A. López^(3,5), F. Busso⁽⁶⁾ y M. S. Díaz⁽¹⁾

⁽¹⁾PLAPIQUI - UNS - CONICET, Cno La Carrindanga Km. 7 - 8000 Bahía Blanca - Buenos Aires

⁽²⁾ISEA, Instituto Sup de Estudios Ambientales.

⁽³⁾Dpto. Qca. Industrial y Aplicada, FCEFyN - UNC, Av. Vélez Sarsfield 1611 - 5000 Córdoba.

⁽⁴⁾Secretaría de Recursos Hídricos y Coordinación-Ministerio de Agua, Ambiente y Energía

⁽⁵⁾ICTA, Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos

⁽⁶⁾Aguas Cordobesas S.A.

E-mail: brodriguez@plapiqui.edu.ar

INTRODUCCIÓN

La descarga de residuos provenientes de actividades antropogénicas al entorno afecta negativamente los ecosistemas provocando serios problemas ambientales. Particularmente, la descarga de nutrientes (nitrógeno y fósforo) en cuerpos de agua provoca el envejecimiento prematuro de los mismos al promover proliferaciones masivas de algas, pérdida de biodiversidad, disminución de la transparencia, eventos de mortandad de peces, disminución del oxígeno disuelto hipolimnético, etc. Este fenómeno, denominado "eutrofización", puede ser descrito a través de la formulación de modelos matemáticos que consideran los principales fenómenos biológicos, físicos y químicos relacionados con la dinámica algal y de nutrientes (Estrada et al., 2011).

En el presente trabajo, se muestra la calibración y validación de un modelo de calidad de agua basado en primeros principios, el cual representa los procesos ecológicos mediante ecuaciones algebraico-diferenciales. El modelo contiene un gran número de parámetros que deben ajustarse a las condiciones específicas del cuerpo de agua modelado. El embalse Los Molinos, un cuerpo de agua multipropósito ubicado 65 km al SO de la Ciudad de Córdoba, es nuestro caso de estudio. Su estado trófico es mesotrófico a eutrófico, -con registros de mortandad de peces por anoxia, blooms de *Ceratium hirundinella* y cianobacterias y presencia de cianotoxinas (Bazán, 2006; Cossavella, 2003). Por lo tanto, es fundamental contar con herramientas que contribuyan a la gestión de este importante recurso hídrico.

MÉTODOS

El modelo planteado considera balances dinámicos de los principales grupos de fitoplancton observados (dinófitas, criptófitas y cianófitas), nutrientes (nitrato, amonio, nitrógeno orgánico, fosfato, fósforo orgánico), oxígeno y demanda bioquímica de oxígeno. Resulta entonces un complejo set de ecuaciones algebraico-

diferenciales a derivadas parciales que luego se discretiza considerando dos capas horizontales en la columna de agua. Los Molinos es un embalse monomítico, estratificado térmicamente en verano; siendo la segmentación física definida consistente con las profundidades epilimnética e hipolimnética registradas a campo.

Los balances dinámicos en cada capa incluyen los ingresos (de agua y nutrientes) a partir de los tributarios, las lluvias, la evaporación, las salidas para potabilización y del río Los Molinos, los términos de generación y consumo, la transferencia entre capas, y la variabilidad de volumen del embalse (a través del cambio en la altura de la capa superior). Así mismo, el modelo considera las descargas externas de nutrientes provenientes de efluentes cloacales vertidos en el embalse en forma directa, y la descarga animal directa debida al uso del perillago como abrevadero (Henry y Heinke, 1999; Metclaf y Eddy, 2003). Los parámetros estimados forman parte de los términos de generación y consumo. Los dos grupos de fitoplancton considerados se diferencian en sus tasas máximas de crecimiento y mortalidad, la cinética del fósforo y del nitrógeno y sus requerimientos de luz.

Los principales parámetros biogeoquímicos del modelo son obtenidos por resolución de un problema de estimación dinámica de parámetros, sujeto al DAE formulado (gPROMS, 2012). El modelo completo contiene 22 ecuaciones diferenciales y 115 algebraicas (no expuestas en el presente resumen por cuestiones de espacio).

Los parámetros obtenidos permiten simular los perfiles de las variables de estado, los cuales representan satisfactoriamente los datos obtenidos para el embalse (ver Fig. 1). La Fig. 1 muestra los perfiles de dinófitas y nitratos comparados con los datos experimentales para 330 de simulación (el día 0 corresponde al 16 de enero de 2007 y el día 330 al 12 de diciembre de 2007).

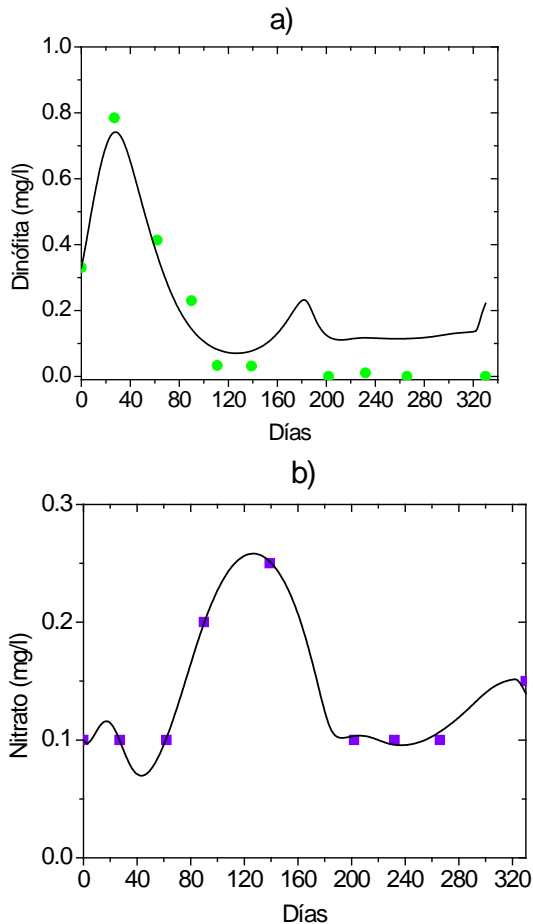


Fig. 1. Perfiles de simulación (línea) y datos observados (marcadores) de concentraciones de dinófitas (a) y nitrato (b) para la capa superior (año 2007). Resultados de estimación de parámetros.

Para poder evaluar las capacidades del modelo para representar el patrón del comportamiento biológico del embalse en otros períodos (Arhonditsis y Brett, 2005), se procedió a realizar la validación del mismo con un set independiente de datos experimentales observados para el año 2008. La Fig. 2 muestra los perfiles simulados para cianobacterias y dinófitas, comparados con los datos observados (el día 0 corresponde al 14 de enero de 2008 y el día 322 al 1° de diciembre de 2008). Se observa una reproducción razonable de los perfiles de concentración mostrados. Resultados similares se obtuvieron para las demás variables de estado monitoreadas

CONCLUSIONES

Los resultados numéricos obtenidos muestran que el modelo formulado, con los parámetros establecidos aquí, constituye una herramienta adecuada para la representación de la dinámica del embalse Los Molinos. Por lo tanto, el modelo podría utilizarse para la

determinación de estrategias de manejo del recurso hídrico.

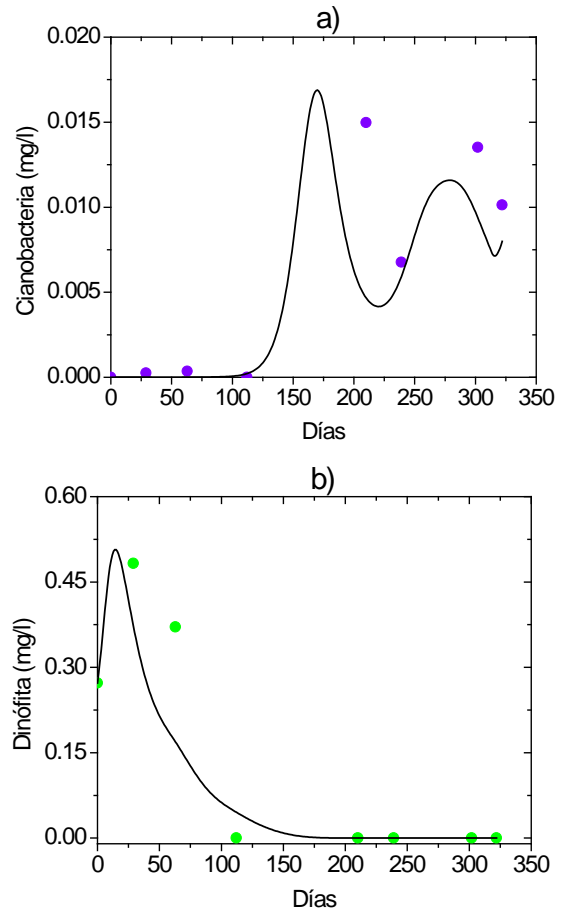


Fig. 2. Perfiles de simulación (línea) y datos observados (marcadores) de concentraciones de cianobacterias (a) y dinófitas (b) para la capa superior (año 2008).

REFERENCIAS

- Arhonditsis, G. B.; Brett, M. T., *Ecological Modelling* **187** (2–3): 179-200 (2005).
- Bazán, R., Evaluación de la calidad del agua, nivel de eutroficación y sus consecuencias en el Embalse Los Molinos (Córdoba). Tesis de Maestría. Fac. Ciencias Químicas, UNC. Córdoba (2006).
- Cossavella A., Influencia de efectos antrópicos y naturales en el proceso de eutroficación de las aguas del embalse Los Molinos. Tesis de Maestría, UTN-Córdoba (2003).
- Estrada, V.; Parodi, E.; Diaz, M.S. *Computers and Chemical Engineering*, 33, 1760-1769 (2009).
- Estrada, V.; Rodriguez Reartes S.B.; Diaz M.S., *Computer Aided Chem. Eng.* 29: 1281-1285 (2011).
- gPROMS *Process Systems Enterprise*, www.psenterprise.com/gproms (2012).
- Henry, J. G., Heinke, G. W. *Ingeniería Ambiental*. 2nd ed., Prentice Hall, Méjico (1999).
- Metclaf & Eddy. *Wastewater Engineering: Treatment and Reuse*. 4th ed. McGraw Hill, New York (2003).

MODELADO ECOLÓGICO DEL EMBALSE LOS MOLINOS



S.B. Rodríguez Reartes¹, V. Estrada¹, R. Bazán^{2,3},

N. Larrosa³, A. Cossavella^{3,4}, A. López^{3,4}, F. Busso⁵ y M.S. Díaz¹

{brodriguez, vestrada, sdiaz}@plapiqui.edu.ar

¹Planta Piloto de Ingeniería Química (UNS - CONICET). Camino La Carrindanga km. 7 - 8000 Bahía Blanca - Argentina

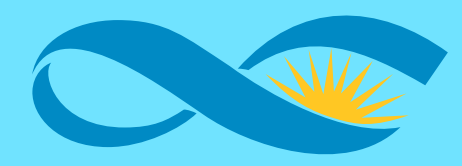
²ISEA, Instituto Sup de Estudios Ambientales. ³Dpto. Qca. Industrial y Aplicada, Fac. Cs. Exactas, Físicas y Naturales - UNC.

⁴Secretaría de Rec. Hídricos y Coordinación - Ministerio de Agua, Ambiente y Energía. ⁵ICTA, Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos.

⁶Aguas Cordobesas S.A.



PLAPIQUI



CONICET
UN S

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

- Eutrofización: causada por la creciente descarga de nutrientes asociada a las actividades industriales, domésticas y agrícolas (Fuentes Difusas y Puntuales).
- Promueve el crecimiento acelerado y la acumulación del fitoplancton (blooms).
- Algunas especies de cianobacterias presentes en los blooms pueden producir hepato- y neurotoxinas (peligrosas para la salud).
- La aplicación de estrategias de restauración requiere del *modelado sistemático de los procesos de eutrofización* en un marco de optimización dinámica (gPROMS, 2012).
- Estimación dinámica de los parámetros de un modelo de eutrofización basado en primeros principios (Estrada y Díaz, 2010; Rodríguez-Reartes et al., 2013) para ajustar a las condiciones ambientales específicas del sitio en estudio (basada en datos observados para el cuerpo de agua del año 2007).
- Validación de los resultados para un nuevo set de datos de campo (año 2008).

Embalse Los Molinos

Características del cuerpo de agua (Bazán, 2006)	
Área de la cuenca (km ²)	978
Superficie (km ²)	21.1
Profundidad máxima (m)	52
Profundidad media (m)	14
Volumen máximo (hm ³)	400
Tiempo de retención (días)	288
Estado Trófico	MESOTRÓFICO
Usos	Agua potable (0.5 millón hab.) Generación de energía Riego Control de crecidas Esparcimiento



Modelo Ecológico

Balances de Masa:

Total

$$\rho A \frac{dh_U}{dt} = \sum_{k=1}^{NIN} Q_{IN,k} - \sum_{m=1}^{NOUT} Q_{OUT,m} + Q_{rain} - Q_{evap}$$

k = Ingresos por tributarios (ríos San Pedro, Los Espinillos, del Medio y Los Reartes) y descargas directas (Metcalf & Eddy, 2003, Henry y Heinke, 1999)
m = Salidas (potabilización y río Los Molinos)
j = Cianobacterias, Criptófitas, Dinófitas, NO₃, NH₄⁺, ON, PRS, OP, DBO, DO

Capa superior

$$\frac{dC_{Uj}}{dt} = \sum_{k=1}^{NIN} \frac{Q_{INUL,k}}{V_U} C_{INUL,k} - \sum_{m=1}^{NOUT} \frac{Q_{OUTU}}{V_U} C_{Uj} + r_{Uj} - \frac{kdA}{\Delta h_U h_U} (C_{Uj} - C_{Lj}) - \frac{C_{Uj}}{h_U} \frac{dh_U}{dt}$$

Capa inferior

$$\frac{dC_{Lj}}{dt} = \sum_{m=1}^{NOUT} \frac{Q_{OUTL}}{V_L} C_{Lj} + r_{Lj} + \frac{kdA}{\Delta h_L h_L} (C_{Lj} - C_{Uj}) - \frac{C_{Lj}}{h_L} \frac{dh_L}{dt}$$

Hipótesis simplificatorias:

- Fósforo es el nutriente limitante
- Densidad constante
- Área transversal constante en la capa superior
- Concentraciones horizontales promedios

Ecuaciones Algebraicas:

Generación Neta

Entradas al modelo: Temperatura

- Radiación solar
- Caudales
- Precipitaciones
- Evaporación
- Conc. nutrientes

$$r_{i,PO_4} = \begin{cases} -R_{i,PO_4,uptake} + R_{i,PO_4,death} + R_{i,OP,miner} & i=U \\ -R_{i,PO_4,uptake} + R_{i,PO_4,death} + R_{i,OP,miner} + R_{i,PO_4,sed} & i=L \end{cases}$$

$$r_{i,OP} = R_{i,OP,death} - R_{i,OP,miner} - R_{i,OP,settling}$$

$$R_{i,PO_4,uptake} = \sum_j (\alpha_{pc} R_{j,growth}) \quad R_{i,PO_4,death} = \sum_j (C_{ij} k_{j,death} \alpha_{pc} (1 - f_{OP}))$$

$$R_{i,OP,death} = \sum_j (C_{ij} k_{j,death} \alpha_{pc} f_{OP}) \quad R_{L,PO_4,se diment} = S_p \left(1 - \frac{C_{LDO}}{K_{DOS} + C_{LDO}} \right) A$$

$$R_{i,OP,miner} = k_{mp} \theta_{mp}^{(t-20)} \frac{\sum_j C_{ij}}{K_{mpc} + \sum_j C_{ij}} C_{i,OP} \quad R_{i,OP,settling} = \frac{k_{OP,settling} (1 - f_{DOP})}{h_i} C_{i,OP}$$

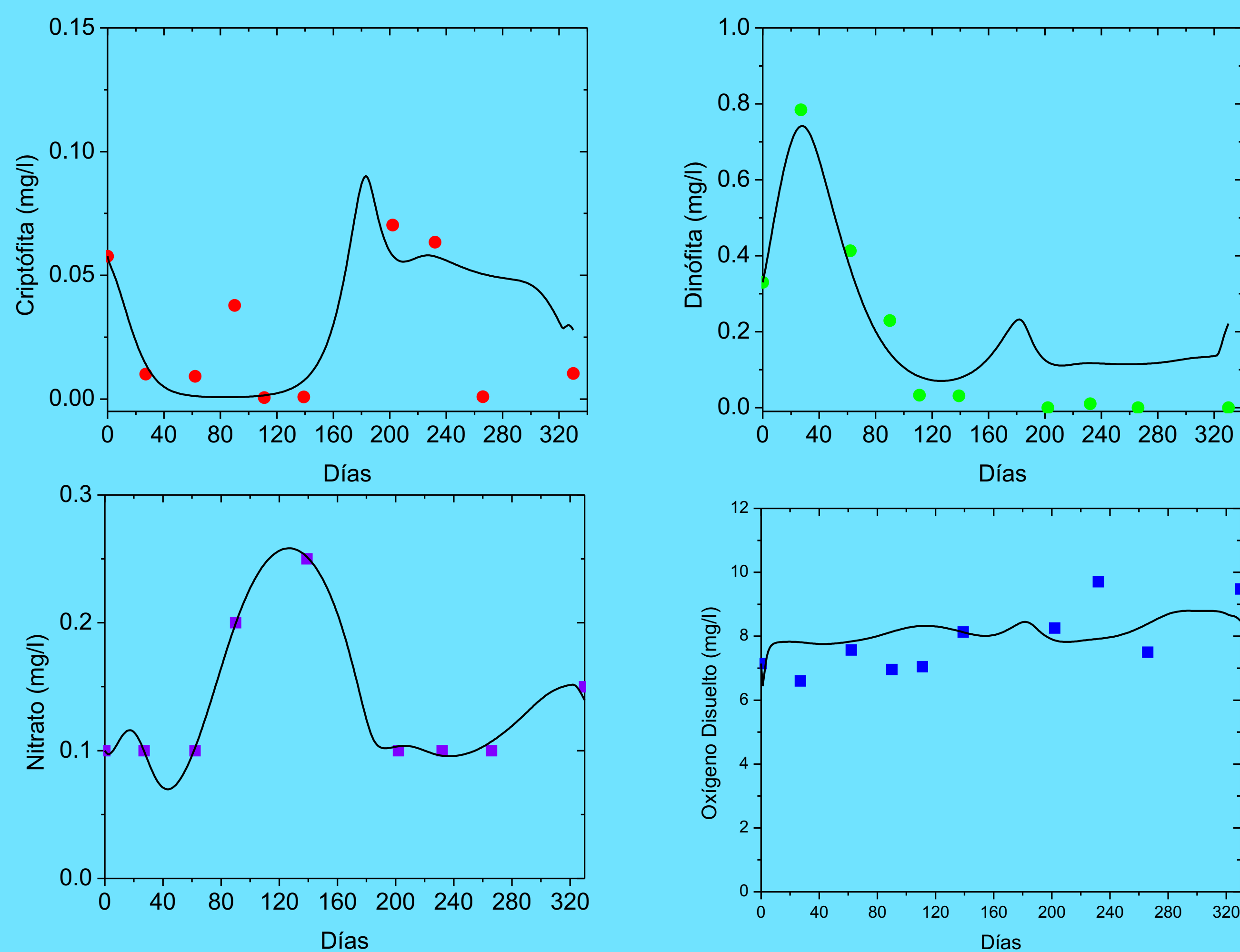
ESTIMACIÓN DE PARÁMETROS

El problema de estimación dinámica de parámetros es:

$$\min \left[\Phi = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N^j} \sum_{k=1}^{N^k} (C_{ijk}^M - C_{ijk})^T V^{-1} (C_{ijk}^M - C_{ijk}) \right]$$

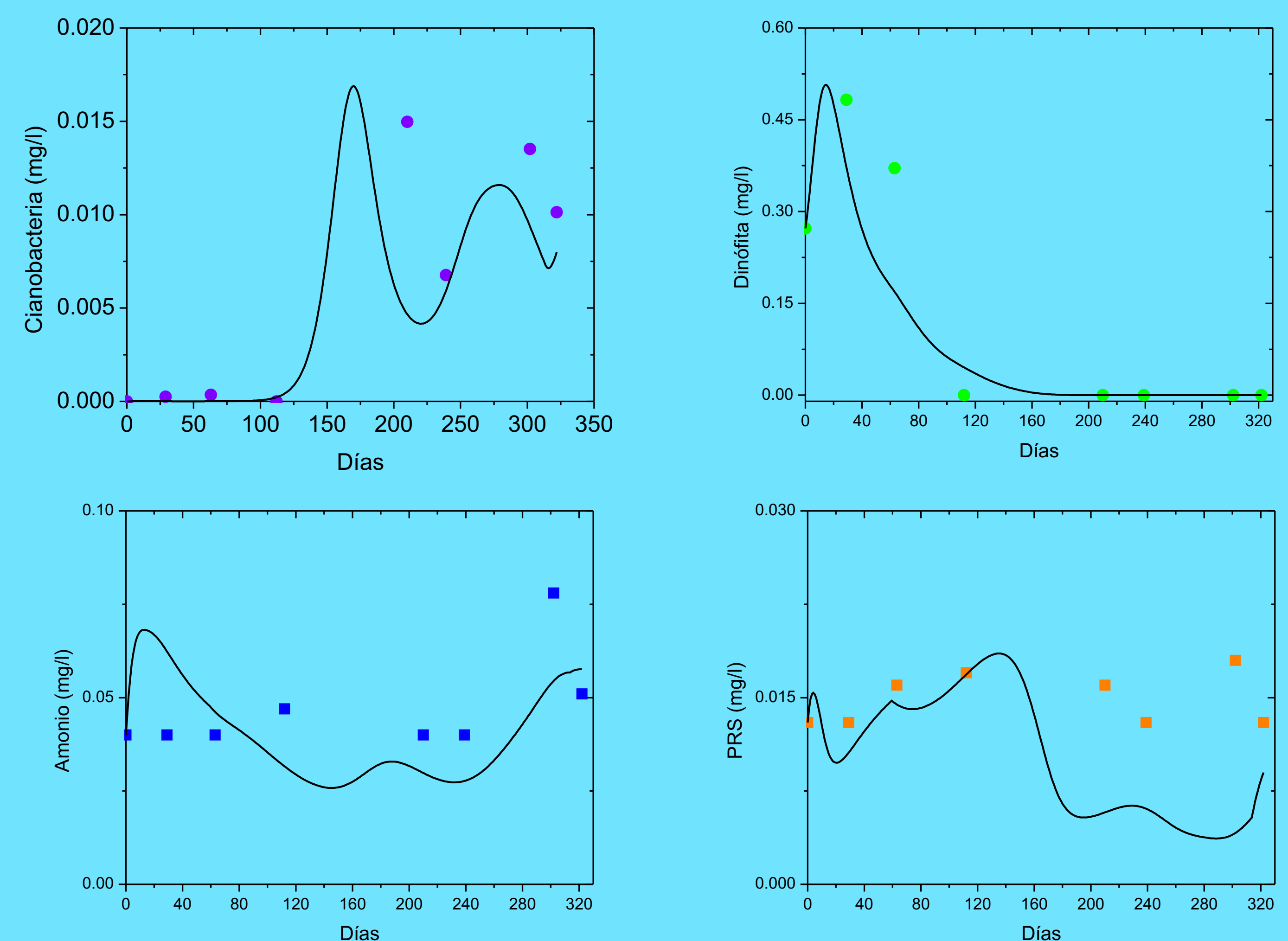
s.t. Modelo de eutrofización EDA

$$C(0) = c^0 \quad C_L \leq C \leq C_U \quad p_L \leq p \leq p_U$$



Resultados de la Estimación de Parámetros: Datos experimentales (marcadores) para el año 2007 y perfiles simulados (líneas).

VALIDACIÓN



Resultados de Validación del Modelo: Datos experimentales (marcadores) para el año 2008 y perfiles simulados (líneas).

CONCLUSIONES

- Se resolvió un problema de estimación dinámica con una estrategia de parametrización del vector de variables de control en gPROMS (2012) para establecer los parámetros óptimos de un modelo de calidad de agua para el Embalse Los Molinos.
- Se validaron los parámetros obtenidos con un set independiente de datos experimentales.
- Los resultados presentados muestran que el modelo formulado, con los parámetros establecidos, constituye una herramienta adecuada para la representación de la dinámica del embalse Los Molinos.
- El modelo podría utilizarse para la determinación de estrategias de manejo del recurso hídrico.

REFERENCIAS

- Estrada, V., Díaz, M.S. (2010). Environmental Modelling & Software 25(12): 1539-1551.
gPROMS Process Systems Enterprise, www.psenterprise.com/gproms (2012).
Henry, J. G., Heinke, G. W. (1999) Ingeniería Ambiental. 2nd ed., Prentice Hall, Méjico.
Metcalf & Eddy. (2003) Wastewater Engineering: Treatment and Reuse. 4th ed. McGraw Hill, New York.
Rodríguez Reartes, S.B, Estrada, V., Bazán, R., Larrosa, N., Cossavella, A., López, A., Busso, F., Díaz, M.S.
VII Congreso Argentino de Ingeniería Química (CAIQ 2013). Trabajo completo 19-012.