

**UCLV**  
Universidad Central  
"Marta Abreu" de Las Villas



**MFC**  
Facultad de Matemática  
Física y Computación

Departamento de Física

## **TRABAJO DE DIPLOMA**

Título del trabajo: Desarrollo de un modelo de infiltración con potenciales aplicaciones sobre la comunidad de bacterias anammox

Autor: César Raúl Medero Reguera

Tutores: M.Sc. Jorge Alberto Cárdenas Pestana

M.Sc. Noel Pérez Díaz

Santa Clara, Junio 2018  
Copyright©UCLV

Este documento es Propiedad Patrimonial de la Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas, y se encuentra depositado en los fondos de la Biblioteca Universitaria “Chiqui Gómez Lubian” subordinada a la Dirección de Información Científico Técnica de la mencionada casa de altos estudios.

Se autoriza su utilización bajo la licencia siguiente:

**Atribución- No Comercial- Compartir Igual**



Para cualquier información contacte con:

Dirección de Información Científico Técnica. Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas. Carretera a Camajuaní. Km 5½. Santa Clara. Villa Clara. Cuba. CP. 54 830

Teléfonos.: +53 01 42281503-1419

## Pensamiento

La imaginación es más importante que el conocimiento El conocimiento es limitado. La imaginación rodea el mundo.

Albert Einstein

## **Resumen**

En este trabajo se efectuó un estudio de modelos de infiltración en aguas subterráneas, lo cual permitió realizar la propuesta de un modelo preliminar de transporte de contaminantes en medios porosos con potenciales aplicaciones para la comunidad de bacterias anammox en acuíferos que se encuentran expuestos a la contaminación a causa de la actividad agrícola debido al uso de fertilizantes ricos en nitratos ( $NO_3^-$ ). Se propuso un modelo físico – matemático preliminar al cual se le dio solución analítica y se presentaron los métodos experimentales para calcular los parámetros que se utilizaron en la ecuación. Se evaluó el modelo para tres tipos de concentraciones como un caso de prueba y se aplicó para dos casos reales. Los resultados afirman que para las cargas utilizadas existió inhibición del *anammox* a partir de los 10 días.

## **PALABRAS CLAVE**

Modelo de infiltración, *Anammox*, Transporte, Medios porosos, Nitrato, Inhibición

## **Abstract**

In this work a study of infiltration models in groundwater was carried out, which allowed to make the proposal of a preliminary model of transport of pollutants in porous media with potential applications for the community of anammox bacteria in aquifers that are exposed to pollution because of the agricultural activity due to the use of fertilizers rich in nitrates ( $NO_3^-$ ). A preliminary physical-mathematical model was proposed, which was given an analytical solution and the experimental methods were presented to calculate the parameters that were used in the equation. The model was evaluated for three types of concentrations as a test case and was applied for two real cases. Results confirm that for the loads used there was anammox inhibition after 10 days.

## **KEYWORDS**

Infiltration model, Anammox, Transport, Porous media, Nitrate, Inhibition

# Índice

Resumen .....	I
Abstract.....	II
Introducción.....	1
CAPÍTULO I FUNDAMENTOS GENERALES DE LA MODELACIÓN DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN MEDIOS POROSOS Y METABOLISMO DE LAS BACTERIAS <i>ANAMMOX</i> .....	5
1.1 Aguas subterráneas. Características.....	5
1.2 Tipos de acuíferos.....	6
1.2.1 Según los materiales que lo constituyen .....	6
1.2.2 Según el grado de presión a que está sometida el agua.....	7
1.2.3 Contaminación en los acuíferos. ....	7
1.3 Concentración, solutos y solventes.....	10
1.3.1 Definición de la concentración.....	10
1.4 Ley de conservación de la masa.....	11
1.4.1 Balance de masa en sistemas naturales.....	13
1.4.2 Transporte de soluto en acuíferos.....	14
1.4.3 Medios Porosos .....	14
1.4.4 Transporte por Convección.....	16
1.4.5 Velocidad del flujo. Ley de Darcy.....	16
1.4.6 Transporte por dispersión: ley de Fick.....	18
1.4.7 Primera ley de Fick para el agua.....	19
1.4.8 Importancia del transporte de soluto por difusión.....	19
1.5 Características y metabolismo de las bacterias Anammox.....	21

1.5.1 Ciclo del nitrógeno .....	21
1.5.2 Actividad del anammox .....	24
1.5.3 Factores que afectan la actividad del anammox.....	24
1.5.4 Efecto de la concentración de sustrato y otras especies químicas.....	25
1.6 Conclusiones parciales.....	26
<b>CAPÍTULO 2 PROPUESTA Y ANÁLISIS DEL MODELO PRELIMINAR DE TRANSPORTE DE NITRATO HACIA ACUÍFEROS.....</b>	<b>27</b>
2.1 Propuesta del modelo.....	27
2.2 Condiciones iniciales y de contorno. ....	28
2.2.1 Condiciones Iniciales .....	29
2.2.2 Condiciones de contorno.....	29
2.3 Consideraciones y limitaciones del modelo.....	30
2.4 Modelos analíticos y numéricos aplicados a los acuíferos. ....	30
2.5 Determinación experimental de cada parámetro de la ecuación 2.1.7.....	32
2.5.1 Permeabilidad.....	32
2.5.2 Porosidad.....	32
2.6 Solución Analítica.....	35
2.7 Conclusiones Parciales. ....	44
<b>CAPÍTULO III ANÁLISIS Y RESULTADOS. ....</b>	<b>45</b>
3.1 Análisis de la solución. ....	45
3.2 Criterios de estabilidad. ....	47
3.3 Casos de prueba. ....	48
3.3.1 Caso 1.....	49
3.3.2 Caso 2.....	50
3.3.3 Caso 3.....	51

3.4 Caso real Aplicado.....	52
3.4.1 Caso real 1.....	53
3.4.2 Caso real 2.....	54
3.5 Influencia del nitrato sobre la actividad del anammox y la calidad del agua. ....	55
3.6 Conclusiones parciales.....	56
CONCLUSIONES.....	57
RECOMENDACIONES .....	58
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	59

## Lista de Figuras

Figura 1. Definición de concentración promediada por volumen (residente) para flujo unidireccional. Adaptado de (.....)	11
Figura 2 y 3 Estructura Fibrilar Granular .....	15
Figura 4 fotografías de arena, piedra arenisca, caliza, pan de centeno, y pulmón humano, respectivamente. ....	16
Figura 5 Dispositivo de Darcy.....	20
Figura 6. Ciclo del nitrógeno (Lopez-Castillo 2008) .....	22
Figura 7. Actividad relativa del anammox contra concentración de nitrato. (Carvajal-Arroyo, 2013).....	26

## **Lista de Tablas**

Tabla 1 Clase de permeabilidad de los suelos.....	32
Tabla 2. Resultados numéricos del Caso 1 .....	49
Tabla 3. Resultados numéricos del caso 2.....	50
Tabla 4. Resultados numéricos del caso 3.....	51
Tabla 5. Resultados numéricos del caso real 1.....	53
Tabla 6. Resultados numéricos del caso real 2.....	54

## Introducción

El agua es un recurso natural indispensable para la vida y debe considerarse un derecho humano básico por constituir una necesidad primordial. En las sociedades modernas es un bien muypreciado por la escasez que presenta y presentará en un futuro no muy lejano. Es sustento de la vida y el desarrollo económico está muy ligado a la disponibilidad de ella. El agua es fácilmente regenerada durante su ciclo natural. Esta aparente abundancia en la naturaleza la hace ser un vertedero habitual de contaminantes: pesticidas, desechos químicos y radiactivos, metales pesados, etc. El origen de la contaminación de las aguas debe buscarse en procesos naturales pero, sobre todo, en la actividad humana. Este problema se ha agravado considerablemente debido a la industrialización y el crecimiento demográfico y urbanístico. La contaminación de estepreciado recurso debe entenderse como un concepto relativo, asociado a las características físicas, químicas y biológicas que impiden o dificultan su uso según las aplicaciones a las que vaya destinada, ya sea por fenómenos naturales o por el uso de la actividad humana.

Existen en la literatura varios estudios sobre transporte de contaminantes más enfocados hacia los ríos, lagos y el mares (Rodríguez 2008) pero muy pocos consideran los acuíferos subterráneos.

La creciente importancia de los acuíferos como fuente de agua potable y los potenciales efectos adversos que la contaminación puede representar para los diferentes usos, demanda del desarrollo de mejores métodos de predicción para el transporte de contaminantes hacia los mismos, tanto de tipo espacial como temporal. El desarrollo científico para resolver ecuaciones en derivadas parciales y el desarrollo tecnológico en la industria computacional durante las pasadas cuatro décadas han permitido resolver problemas complejos de transporte de flujo contaminante de una manera eficiente (Vedat, 2006). Debido al desarrollo de estas técnicas se han podido estudiar con mayor profundidad los campos de velocidades variables en acuíferos.

Las bacterias anammox (del inglés anoxicogenic amoniumm oxidation) son capaces de realizar la oxidación anoxigénica de amonio ( $NH_4^+$ ) usando como agente oxidante el nitrito ( $NO_2^-$ ) (Van de Graaf et al., 1995) y se ha reportado su existencia en disímiles ambientes acuáticos

ya sean marinos o de agua dulce (donde se encuentran los acuíferos subterráneos) y en sus respectivos sedimentos (Rodríguez 2010) Algunos de los contaminantes que pueden llegar a los acuíferos subterráneos como el nitrito y el amonio son sustratos para este tipo de bacterias que comprende un gran número de géneros. Otros como los sulfuros ( $S^-$ ), nitratos ( $NO_3^-$ ), ácidos o bases fácilmente disociables [aportan hidronio ( $H_3O^+$  o  $H^+$ ) e hidroxilo ( $OH^-$ ) respectivamente] son inhibidores del metabolismo de estas bacterias, debido fundamentalmente a los cambios en el pH del medio que producen y afectación en el gradiente de protones  $H^+$  que se establece en el orgánulo llamado anamoxosoma, donde fundamentalmente se desarrolla el metabolismo (Boran Kartal 2006) . La presencia de estos contaminantes a partir de determinados valores de concentración son capaces de reducir la actividad relativa del anammox y por consiguiente su productividad biológica (Carvajal-Arroyo, 2013). Afortunadamente las bacterias anammox no son nocivas para la salud humana y si muy buenas para la eliminación de nitrito y amonio que transforman en nitrógeno gaseoso ( $N_2$ ).

Hoy en día en nuestro país (y en muchos lugares del mundo), en el balance de la gestión medioambiental, persisten errores y deficiencias, provocados por la insuficiente conciencia y educación ambiental, la carencia de una exigencia mayor en la gestión, la limitada introducción y generalización de los resultados de la ciencia y la tecnología y la aún insuficiente incorporación de la dimensión ambiental en las políticas, planes y programas de desarrollo. De forma general, existe un nivel alto de vertimiento de contaminantes a las aguas superficiales debido a la mala política de algunas industrias y empresas que no tienen cuenta el importante aspecto que es la calidad del agua superficial en los ecosistemas cubanos así como de la existente en los acuíferos y cuencas subterráneas, ni las consecuencias que trae consigo el vertimiento desmedido de contaminantes. Basándonos en toda esta problemática, en esta investigación se plantea como **objetivo general**: proponer un modelo matemático preliminar de transporte de nitratos hacia el manto freático con potencial aplicación para evaluar la actividad relativa de las bacterias anammox.

Para dar cumplimiento a este objetivo general se proponen los siguientes **objetivos específicos**:

1. Dominar el estado del arte, y las herramientas matemáticas necesarios que permitan el análisis de modelos matemáticos de transporte de contaminantes hacia acuíferos.
2. Proponer un modelo preliminar de transporte físico de contaminantes hacia los acuíferos subterráneos considerando los nitratos.
3. Evaluar la actividad relativa de las bacterias anammox como un indicador de productividad biológica de las mismas en acuíferos subterráneos.

Estos objetivos hacen que se formulen las siguientes preguntas de investigación:

¿Puede el modelo preliminar de transporte de contaminantes hacia acuíferos dar una medida adecuada de la concentración de nitratos y la influencia de estos en la actividad relativa las bacterias anammox?

¿Con la aplicación del modelo es posible evaluar la productividad biológica de las bacterias anammox en los acuíferos?

Hoy en día debido al uso indiscriminado de los fertilizantes cada vez es mayor la contaminación de los suelos por sustancias nitrogenadas, esto tiene graves implicaciones tanto para la salud humana como para los seres vivos que habitan bajo la superficie terrestre y en las cuencas subterráneas. Las grandes concentraciones de nitrato en acuíferos subterráneos pueden inhibir la productividad biológica del proceso anammox que a su vez tiene una gran importancia ambiental ya que la eliminación de nitrógeno en aguas residuales tiene gran importancia en lo que se refiere a medio ambiente, lo que conocemos como eutrofización que es el enriquecimiento de nutrientes de un ecosistema. Recientemente se ha demostrado que las bacterias denominadas anammox son responsable de la reducción drástica del nitrógeno en estas aguas; por ello se le debe dedicar especial atención al comportamiento biológico de estos seres vivos.

Debido a la variabilidad del modelado de los parámetros, un modelo generalizado debe ser muy complejo. Los modelos complejos describen con más exactitud las condiciones reales de los sistemas y las predicciones con ellos tienden a ser más valiosas. Sin embargo requieren personal y tecnología altamente calificada, un gran número de datos y por tanto un mayor costo. Consecuentemente, modelos más simples que consideran solo los procesos más importantes tienden a ser más populares (Palmer, 2001). Por tanto par que un modelo de calidad de las aguas pueda ser aplicado confiablemente para predecir las condiciones de

diversos parámetros en el futuro, tiene que cumplir con una condición básica: reproducir aceptablemente las condiciones (Castagnino, 1975).

Para dar cumplimiento a los objetivos trazados, la tesis se encuentra estructurada de la siguiente forma:

### **Capítulo I**

En este capítulo se enuncian las fuentes principales que ocasionan problemas de contaminación en las cuencas subterráneas así como los tipos de cuencas. Además de describir los procesos que intervienen transporte de contaminante en medios porosos y su expresión matemática. Se explica el proceso de anammox y sus implicaciones.

### **Capítulo II**

En el capítulo II se propone un modelo matemático preliminar de transporte y se le da solución y se exponen las condiciones para las cuales se aplica este modelo. Se le da solución a la ecuación matemática que describe el fenómeno de transporte por el método de separación de variables y se analiza su solución. Además se enuncian las consideraciones y limitaciones que se tuvieron en cuenta a la hora de modelar el problema y darle solución.

### **Capítulo III**

En el capítulo 3 se analiza el término del modelo que es una serie, se analiza la convergencia y se calcula el error de truncamiento. Además se aplica a tres casos de prueba y 2 casos reales graficando en todos los casos las soluciones en gráficos en una dimensión y en tres dimensiones. Se hace un análisis de las soluciones obtenidas luego de observar numéricamente y gráficamente estas soluciones.

# **CAPÍTULO I FUNDAMENTOS GENERALES DE LA MODELACIÓN DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EN MEDIOS POROSOS Y METABOLISMO DE LAS BACTERIAS ANAMMOX**

La creciente importancia de los acuíferos como fuente de agua potable y los potenciales efectos adversos que la contaminación puede representar para los usuarios de los acuíferos demanda del desarrollo de mejores métodos de predicción para el transporte de contaminantes en acuíferos tanto de tipo espacial como temporal. El desarrollo científico para resolver ecuaciones en derivadas parciales y el desarrollo tecnológico en la industria computacional durante las pasadas cinco décadas han permitido resolver problemas complejos de transporte de flujo contaminante de una manera eficiente (Vedat, 2006). Debido al desarrollo de estas técnicas se han podido estudiar con mayor profundidad los campos de velocidades variables en acuíferos. Para desarrollar un problema de transporte de soluto se requiere modelación del flujo de aguas subterráneas y del transporte de soluto. Los modelos de flujo de aguas subterráneas y transporte de soluto son herramientas matemáticas que pueden ser solucionados por métodos analíticos o métodos numéricos que se aproximan en gran medida a la realidad.

En las cuencas subterráneas se ha encontrado la presencia de algunas bacterias, entre las cuales se encuentran aquellas que realizan la oxidación anaeróbica del amonio (anammox). La importancia fundamental de estas bacterias es que son capaces de oxidar el amonio en presencia del nitrito para formar el gas dinitrógeno ( $N_2$ ), uno de los principales componentes de la atmósfera terrestre que no contamina (Sobrinó Serran, 2007). Por tal razón estas bacterias han sido usadas desde la década del 90 en diversas plantas procesadoras de aguas residuales con excelentes resultados. Este proceso puede ser afectado por algunos sustratos que emplea la bacteria en su metabolismo y otras especies químicas que pueden encontrarse disueltas en las aguas.

## **1.1 Aguas subterráneas. Características.**

Las aguas subterráneas son aquellas que se encuentran bajo la superficie terrestre, representa una parte importante del agua de los continentes y generalmente se acumulan en acuíferos, que no son más que formaciones geológicas donde se almacena y circula aprovechando la

porosidad, la filtración, la permeabilidad y la geometría de la roca. Es un recurso muy importante para la economía pues es el principal elemento que se utiliza en la agricultura y en la industria. La porosidad y estructura del suelo determinan el tipo de acuífero y la circulación de las aguas subterráneas (Fuentes, 2002). El agua subterránea puede circular y almacenarse en el conjunto del estrato geológico: este es el caso de suelos porosos como arenosos, de piedra y aluvión. También puede circular y almacenarse en fisuras o fallos de las rocas compactas que no son en ellas mismas permeables, como la mayoría de rocas volcánicas y metamórficas.

Por otra parte, los acuíferos se comportan como si fuera un embalse, en donde hay que considerar: un caudal de entrada, un caudal de salida y una capacidad de almacenamiento y regulación.

El caudal de entrada o recarga de agua está constituido generalmente, por el agua infiltrada procedente de precipitaciones, aguas superficiales, riegos, aguas residuales, etc. La salida o descarga de agua se produce por el afloramiento superficial en fuentes y manantiales o mediante descarga subterránea hacia los cauces de los ríos, otros acuíferos vecinos o el mar. En el caso de acuíferos explotados por el hombre, la salida del agua se produce, también, mediante bombeo. La capacidad de almacenamiento de un acuífero viene determinada por su volumen (definido por su extensión y espesor) y por su porosidad y fisuración. La reserva es la cantidad de agua almacenada en el acuífero.

## **1.2 Tipos de acuíferos.**

Se pueden considerar varios tipos de acuíferos atendiendo a sus características (Fuentes, 2002)

### **1.2.1 Según los materiales que lo constituyen pueden ser:**

- Acuíferos porosos: Están constituidos por materiales sueltos no consolidados (gravas y arenas, generalmente). El agua circula con facilidad por los poros o espacios que dejan entre sí las partículas sólidas.
- Acuíferos fisurados: Están constituidos por rocas consolidadas, en donde el agua circula por las fisuras y grietas formadas por las mismas. Algunas rocas tales como las calizas y las dolomitas bajo determinadas condiciones son solubles en agua con lo

cual la fisuras se agrandan formando conductos y cavidades de considerable tamaño, fenómeno que recibe el nombre de Karstificación.

- Acuíferos porosos y fisurados: Las areniscas y los conglomerados son un tipo de roca intermedia entre las consolidadas y las no consolidadas. Están formadas por materiales sueltos (arena en el caso de la arenisca y grava en el caso de los conglomerados) unido mediante un cemento (generalmente calcáreo o silíceo).

### 1.2.2 Según el grado de presión a que está sometida el agua, pueden ser:

- Libres, no confinados o freáticos: La superficie del agua está a la presión atmosférica, debido a que no tiene encima ningún terreno que actúe como capa confinante. Por tanto, al ser perforado el acuífero, el nivel piezométrico de este (es decir, la cota a que se estabiliza el nivel del agua) coincide con el nivel del agua en el acuífero.
- Cautivos, confinados o a presión: El techo del acuífero está limitado por una capa de terreno impermeable, con lo cual el agua está sometida a mayor presión que la atmosférica. Cuando se perfora un sondeo, el agua asciende en el mismo hasta que la presión de la columna de agua se iguala con la presión del acuífero. El agua surge por sí sola hasta la superficie del suelo cuando el nivel piezométrico del sondeo se sitúa por encima de la cota del terreno (sondeo surgente o artesiano).
- Semicautivos o semiconfinados: El techo del acuífero está limitado por un terreno semipermeable, con lo que se dan unas características intermedias entre los dos tipos anteriormente citados.

### 1.2.3 Contaminación en los acuíferos.

Los tipos de contaminación que pueden afectar a un medio natural se clasifican según el factor ecológico que altere, aunque suelen afectar a más de un factor

- Contaminación física. Las sustancias que modifican factores físicos, pueden no ser tóxicas en sí mismas, pero modifican las características físicas del agua (sólidos en suspensión, turbidez y color, tensoactivos, temperatura) y afectan a la biota acuática.
- Contaminación química. Algunos efluentes cambian la concentración de los componentes químicos naturales del agua causando niveles anormales de los mismos o introducen sustancias extrañas al medio ambiente acuático. En este sentido es en

el que puede hablarse propiamente de contaminación (salinidad, pH, sustancias marcadamente tóxicas, desoxigenación, contaminación por agentes bióticos).

**Las causas que originan la contaminación de los acuíferos pueden clasificarse en cuatro grupos:**

- **Contaminación por actividades domésticas y urbanas:** Los residuos sólidos procedentes de estas actividades se colocan en vertederos, en donde las materias solubles son lixiviadas por el agua de lluvia. La contaminación de los acuíferos no aparece inmediatamente, pero puede durar muchos años, aun después de la desaparición del vertedero. Cuando éste se coloca en un lugar inadecuado desde el punto de vista hidrogeológico, la contaminación se extiende hasta puntos muy alejados, a pesar de la depuración natural que se produce en el terreno. El emplazamiento de los vertederos y su control, ejercido por técnicos competentes, son los únicos medios seguros para evitar o aminorar la contaminación. Esta contaminación se agrava cuando en estos vertederos también se colocan residuos industriales.
- **Contaminación por actividades agrícolas y ganaderas:** La contaminación originada por las actividades agrícolas y ganaderas es, seguramente, la causa más importante y más generalizada de la contaminación de acuíferos. Las actividades que generan los principales problemas son las siguientes:
- **Fertilización:** Los fertilizantes nitrogenados son los que originan mayor grado de contaminación. En condiciones normales de cultivo, los compuestos nitrogenados, tanto orgánicos como inorgánicos, evolucionan rápidamente a nitratos que no son adsorbidos por el suelo y pueden, por tanto, ser lixiviados por el agua de drenaje. El amonio es retenido por el complejo adsorbente del suelo, por lo que su presencia en las aguas subterráneas es mínima (menos de 1 por 100 del nitrógeno total lixiviado). En muchas zonas del planeta se ha detectado un incremento alarmante de nitratos en las aguas subterráneas, sobrepasando los límites máximos para que se considere agua potable esto puede causar daños a la salud, principalmente a los niños pequeños ocasionándole enfermedades como la metemoglobinemia.
  - **Aplicación de productos fitosanitarios:** Los productos fitosanitarios aplicados al suelo o a las plantas son contaminantes que pueden ser lixiviados

por el agua de drenaje. El grado de contaminación viene en función de varios factores: toxicidad, persistencia en el suelo, grado de solubilidad y concentración del producto. En general, los productos organoclorados son los que constituyen mayor riesgo, por su elevada persistencia y toxicidad; la baja solubilidad y el elevado grado de adsorción por el suelo limitan ese riesgo. Los pesticidas organofosforados se degradan con facilidad y son fuertemente adsorbidos por el suelo, por lo que representan un riesgo menor que los anteriores. Los herbicidas a base de ácidos fenoxialquílicos son poco tóxicos, pero comunican mal sabor y olor. Los herbicidas a base de nitrofenol son muy tóxicos y muy solubles, por lo que alcanzan con facilidad al acuífero.

- **Riego:** Las plantas absorben únicamente una mínima parte de las sales aportadas por el agua de riego, por lo que dichas sales son lixiviadas, en última instancia, por el agua de drenaje, pasando a formar parte del agua subterránea. La cantidad de sales que pasan al acuífero por este concepto viene en función de varios factores: calidad del agua, dosis de riego, contenido de sales del suelo, etc. El riesgo de aumento de salinización se incrementa con la reutilización, aguas abajo, del agua de riego sobrante. En zonas de regadío intensivo es frecuente la contaminación por nitratos, especialmente cuando se utilizan sistemas de riego con poca eficiencia (riego por gravedad).
- **Vertido de estiércol y purines:** El estiércol sólido o fluido y los purines líquidos procedentes de la actividad ganadera son una fuente importante de nitrógeno y, por consiguiente, de nitratos, que pueden contaminar las aguas subterráneas cuando se incorporan al suelo con el riego en zonas inadecuadas desde el punto de vista hidrogeológico. Los lixiviados procedentes de la actividad ganadera intensiva suelen tener altas concentraciones de gérmenes patógenos. El riesgo de contaminación causado por la ganadería extensiva es escaso, ya que los residuos se dispersan por un área extensa, lo que favorece su autodepuración en el suelo.
- **Contaminación por actividades industriales y mineras:** La contaminación producida por actividades industriales es tan variada como el tipo de industria que la origina. La contaminación ocasionada por actividades mineras se produce, sobre

todo, por las evacuaciones de los lavaderos de mineral y por la lixiviación que provoca el agua de lluvia en las escombreras. Los residuos industriales sólidos se eliminan por medio de escombreras y vertederos, mientras que los líquidos se vierten, generalmente, en cauces superficiales, en excavaciones o en acuíferos salinos o secos. Mención especial merecen los residuos radiactivos, que exigen un emplazamiento con unas condiciones muy estrictas debido a su peligrosidad y persistencia.

- **Contaminación por intrusión marina.** En los acuíferos costeros, el agua salada se introduce, como si fuera una cuña, por debajo del agua dulce, debido a la mayor densidad de aquélla. En la separación entre el agua salada y el agua dulce se forma una interface o zona en donde el agua tiene una salinidad intermedia. Cuando existe equilibrio natural, el agua marina permanece estacionaria, mientras que el agua dulce, alimentada por corrientes subterráneas, fluye hacia el mar. Cuando se produce un bombeo intenso de agua dulce, el flujo hacia el mar disminuye, lo que provoca un avance hacia tierra adentro de la cuña de agua salada.

### **1.3 Concentración, solutos y solventes.**

En el caso de las aguas subterráneas, el solvente es casi siempre agua; los constituyentes inorgánicos y orgánicos disueltos son los solutos. Para analizar los problemas de calidad del agua subterránea de manera eficiente, se deben especificar las cantidades relativas de soluto (las partes disueltas) y solvente (agua), lo que se puede lograr mediante el uso del concepto de concentración y sus unidades.

#### **1.3.1 Definición de la concentración.**

La concentración de masa es la masa de soluto disuelto en una unidad especificada de volumen de solución. Esta concentración también se llama concentración promediada en volumen o concentración residente y se denota por  $C$ . La definición de concentración residente se muestra en la Figura (1). La concentración residente debe definirse en el contexto del volumen elemental representativo o de manera equivalente en un área elemental representativa, ya que son cantidades macroscópicas. Las concentraciones residentes ( $C$ ) pueden verse por su volumen local o microscópico (PARKER, 1986). Si en un flujo de agua subterránea unidireccional  $m_A$  es la masa de soluto para un constituyente A en un volumen de fluido  $V$ , la definición de la concentración de volumen promediado o residente es:

$$C = \frac{\Delta m_A}{\Delta V} \quad (1.3.1)$$

donde,

$$\Delta V = \theta S \Delta x \quad (1.3.2)$$

$\theta$ - Porosidad,

S- el área de la sección transversal del tubo Figura (1)

$\Delta x$ - longitud del volumen del fluido

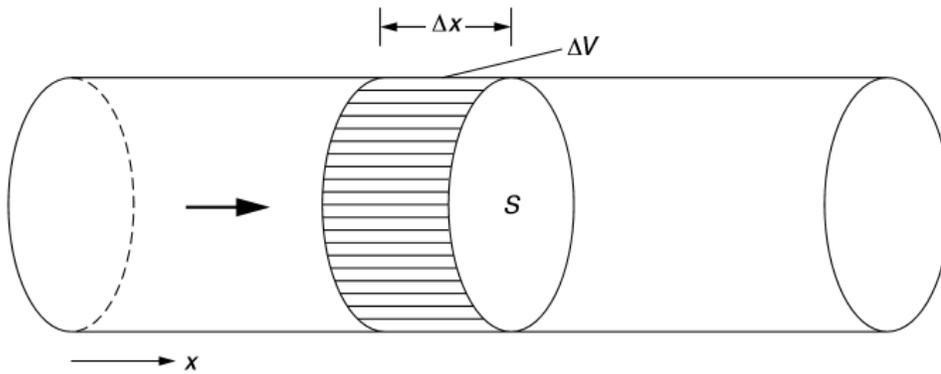


Figura 1. Definición de concentración promediada por volumen (residente) para flujo unidireccional. Adaptado de (Kref & A, 1986)

$$C = \frac{\Delta m}{\theta_e S \Delta x} \quad (1.3.3)$$

$\theta_e$ - porosidad efectiva

La porosidad efectiva es la porción del espacio de poro en un material poroso saturado en el que se produce el flujo de agua. En otras palabras, es el volumen de los huecos interconectados de una muestra.

#### 1.4 Ley de conservación de la masa.

La ley de conservación de la masa o ley de Lomonósov-Lavoisier es una de las leyes fundamentales en todas las ciencias naturales. Como su nombre lo indica, la masa es la misma (se mantiene constante) ante cualquier transformación en el sistema ya que esta no se crea ni se destruye. A menudo esta ecuación es expresada en una ecuación de balance de masa o de

materia (ecuación de continuidad) (Zhen - Gang, 2008), la cual indica la cantidad de flujo de masa entrante en un volumen de control y el flujo de masa que sale del mismo teniendo en cuenta la reacción que ocurre dentro del sistema. Para un fluido incomprensible (densidad constante) en un volumen de control finito, el flujo de agua entrante es igual al flujo de agua saliente. La representación de la ecuación de balance de masa queda:

$$\text{acumulación de masa} = \text{masa entrante} - \text{masa saliente} + \text{fuentes} - \text{sumideros} \quad (1.4.1)$$

Con frecuencia, en la hidrodinámica, la ecuación de conservación de la masa se demuestra y se aplica a una columna de agua o volumen de control finito que permite que las variables entren y dejen este volumen o queden almacenados dentro de él, pero su forma o posición en el espacio no cambian. Para una columna de agua dada, la afluencia menos el desagüe debe ser igual al cambio del volumen durante el tiempo. La ecuación (1.4.1) puede quedar reescrita como:

$$dm = (m_{in} - m_{out} + m_r) \cdot dt \quad (1.4.2)$$

Donde

$dm$  – Acumulación de masa.

$m_{in}$  – Tasa de masa en el flujo.

$m_{out}$  – Tasa de masa fuera del flujo.

$m_r$  – Tasa neta de producción de todas las fuentes y sumideros

$dt$  – Incremento del tiempo.

Para desarrollar la ecuación en términos de flujo de masa (velocidad a la que la masa entra o deja la columna de agua), la ecuación (1.4.2) se divide por el incremento de tiempo,  $dt$ , lo cual nos lleva a la siguiente ecuación de balance de masa para el agua (o un contaminante particular)

$$\frac{dm}{dt} = \frac{\partial m}{\partial t} + \nabla \cdot (mv) = m_{in} - m_{out} + m_r \quad (1.4.3)$$

La fórmula anterior es la ecuación básica para la conservación de la masa y es usada de forma extensiva en hidrodinámica y en estudios de la calidad del agua (Zhen - Gang, 2008).

### 1.4.1 Balance de masa en sistemas naturales.

La concentración de cualquier sustancia en un punto cualquiera de un sistema natural ha de cumplir la ecuación fundamental de conservación de la materia. Así, la ecuación diferencial que representa la variación de concentración de un contaminante al cabo de un tiempo es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial(u_x C)}{\partial x} - \frac{\partial(u_y C)}{\partial y} - \frac{\partial(u_z C)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left( E_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( E_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( E_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + S_k \quad (1.4.4)$$

donde,

$C$  – Concentración del contaminante, mg/L o mol/L.

$t$  – Tiempo, s

$u_x, u_y, u_z$  – Componentes del vector velocidad real del agua; velocidad longitudinal, transversal y vertical, m/s.

$E_x, E_y, E_z$  – Componentes del tensor de dispersión en el seno del fluido; coeficientes de dispersión longitudinal, transversal y vertical, m<sup>2</sup>/s.

$S_k$  – Fuente o sumidero del contaminante, por unidad de volumen de fluido y de tiempo, mg/L·s o mol/L·s.

Esta ecuación muestra que, en un sistema completamente mezclado,

$$\text{Acumulación} = \text{Entradas} - \text{Salidas} \pm \text{Fuente / Sumidero} \quad (1.4.5)$$

Describamos los términos de la ecuación (1.4.5):

**Acumulación:** El primer miembro de la ecuación representa la acumulación de materia en el elemento diferencial de volumen, es decir, la variación de la concentración presente con respecto al tiempo. La acumulación viene expresada como la suma de las entradas menos las salidas del elemento diferencial de volumen originadas por el transporte convectivo-dispersivo (convección-dispersión), más un término genérico de fuente/sumidero que más adelante se explicara con más detalles.

**Transporte por Convección:** Los términos en velocidad del segundo miembro de la ecuación representan el transporte por convección. La convección se refiere al transporte vertical por los flujos que mueven partes del material contaminante, pero no los distorsiona significativamente ni los diluye, en una primera aproximación se puede decir que el

contaminante se mueve casi sin mezclarse con el cuerpo de agua describiendo un flujo en pistón. El término que aparece en la ecuación representa la diferencia entre las entradas y salidas del elemento diferencial de volumen por este concepto.

**Transporte por dispersión:** El término dispersión en la hidrodinámica hace referencia a la propagación del contaminante debido a la dispersión mecánica, al mezclado turbulento y a la difusión molecular.

#### **1.4.2 Transporte de soluto en acuíferos.**

La cuantificación del transporte de solutos para acuíferos o sistemas de aguas subterráneas se basa en la teoría del transporte de soluto convectivo-dispersivo (o advectivo-dispersivo), que también es aplicable en otros medios de transporte, como las aguas superficiales. Básicamente, la teoría del transporte de soluto convectivo-dispersivo se basa en la primera ley de Fick (véase la ecuación 1.4.11), la cual se estableció a mediados del siglo XIX. La primera ley de Fick se extendió al transporte de solutos en aguas subterráneas al incluir los efectos de la dispersión. No hay duda de que el mecanismo de migración de solutos en los sistemas de aguas subterráneas es más complejo que el de los sistemas de flujo de agua superficial. Diferentes constituyentes de soluto tienen diferentes tasas de migración, dependiendo de sus características físicas y químicas, así como de las características del suelo. Además, algunos constituyentes de soluto pueden estar sujetos a descomposición o degradación. Estos fenómenos hacen que la migración de solutos en el agua subterránea sea relativamente compleja en comparación con los solutos para el agua superficial. La selección de modelos de transporte de solutos predictivos, así como los parámetros de transporte de solutos, requiere un conocimiento profundo del mecanismo físico de la teoría del transporte de solutos junto con las limitaciones de los modelos.

#### **1.4.3 Medios Porosos**

Los fenómenos de transporte y transferencia en medios porosos se pueden distinguir al menos dos niveles de descripción: microscópico y macroscópico. El nivel microscópico corresponde al conocimiento del valor de los campos en cada punto. En principio, cabe plantear y resolver modelos matemáticos de los problemas a nivel microscópico en términos de las variables especificadas en puntos dentro de cada fase, sea fluida o sólida, que ocupan un dominio de medio poroso. Obviamente, en la práctica, este procedimiento no es factible, ya que es

imposible describir en detalle la geometría de las fronteras de interface, y observar y medir magnitudes a este nivel. Por consiguiente, el modelo matemático de problema de transporte se simplifica trasladándolo desde el nivel microscópico al macroscópico o continuo, donde es formulado en términos de variables medibles que son promedios de magnitudes microscópicas.

Los medios porosos naturales o los manufacturados son, en general, medios materiales heterogéneos, no uniformes y anisótropos, constituidos por una matriz sólida que encierra un espacio libre, el espacio de poro, que puede ser ocupado por la misma sustancia que la matriz, pero en estado fluido, líquido o vapor, o por sustancias diferentes también en estado fluido. Estas sustancias que ocupan el espacio de poro en estado fluido pueden ser puras o mezclas de varias distintas en diferentes estados de agregación.

Para mostrar la complejidad de los medios porosos se muestran fotografías de los que entendemos como más característicos de cada clase. De entre los medios porosos artificiales cabe destacar los tejidos (estructura fibrilar), Figura 2, y el cemento (estructura granular), Figura 3. Los medios geológicos tienen gran interés por su importancia práctica tanto en la explotación de yacimientos de petróleo y de gas como en hidrología subterránea y cárstica. Las Figuras 4, a, b, c, d, e y f reproducen fotografías de arena, piedra arenisca, caliza, pan de centeno, y pulmón humano, respectivamente.

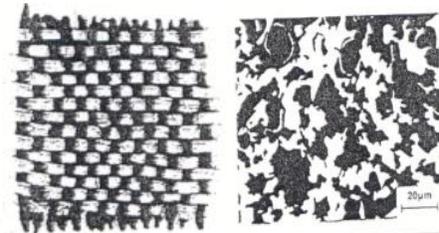


Figura 2 y 3 Estructura Fibrilar Granular

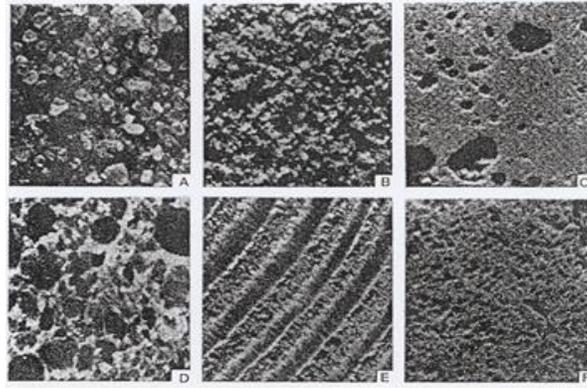


Figura 4 fotografías de arena, piedra arenisca, caliza, pan de centeno, y pulmón humano, respectivamente.

#### 1.4.4 Transporte por Convección.

Este proceso se debe al movimiento del fluido, ya sea aire o agua (Advección, término similar, normalmente se asocia al movimiento vertical debido a diferencias de densidad). Luego un los elementos químicos presentes en el aire o en el agua serán pasivamente llevado por este movimiento convectivo de masas.

El movimiento convectivo es descrito matemáticamente por la dirección y la magnitud de su velocidad, matemáticamente el transporte por convección es representado como:

$$F_{con} = V * \nabla C \quad (1.4.6)$$

Donde:

V– velocidad del flujo y

$\nabla C$ – trata sobre la variación de la concentración por unidad de área.

#### 1.4.5 Velocidad del flujo. Ley de Darcy.

En 1856, en la ciudad francesa de Dijon, el ingeniero Henry Darcy fue encargado del estudio de la red de abastecimiento a la ciudad. Parece que también debía diseñar filtros de arena para purificar el agua, así que se interesó por los factores que influían en el flujo del agua a través de los materiales arenosos, y lo presentó en el resultado de sus trabajos como un apéndice en su informe final. Ese pequeño anexo ha sido la base de todos los estudios físico-matemáticos posteriores sobre el flujo del agua subterránea.

Matemáticamente la Ley de Darcy tiene la forma:

$$q = -K \frac{\partial h}{\partial l} \quad (1.4.7)$$

donde

$q$ – velocidad de Darcy (caudal que circula por cada metro cuadrado)

$K$ – conductividad hidráulica

$\frac{\partial h}{\partial l}$ – gradiente hidráulico

Según (Sanchez San Ramon, 2009) podemos afirmar que para un medio poroso la ley de Darcy toma la forma:

Velocidad lineal media = Velocidad de Darcy/ Porosidad eficaz,

entonces matemáticamente la ecuación de velocidad se escribe:

$$q = -\frac{K}{\theta} \frac{\partial h}{\partial l} \quad (1.4.8)$$

Si llamamos velocidad real a la registrada a lo largo de un recorrido a través de un medio poroso, sería igual a:

Velocidad real = Velocidad lineal media \* coeficiente

Este coeficiente depende de la tortuosidad del medio poroso, y aproximadamente puede ser igual a 1. En la práctica generalmente se utiliza la expresión 1.4.6 diciendo que hemos calculado la velocidad real, pero tenemos que tener en cuenta el error que estamos cometiendo.

El factor  $K$  puede descomponerse de la siguiente forma:

$$K = k \frac{\gamma}{\mu} \quad (1.4.9)$$

donde

$\gamma$ – peso específico del fluido

$\mu$ – viscosidad dinámica

$k$ – permeabilidad

Para expresar de forma general la velocidad de Darcy en medios porosos (Kohn, Kruse, & Santo, 2000):

$$V = -\frac{k_i}{\theta} (\nabla P + \rho g \nabla z) \quad (1.4.10)$$

donde,

$k_i$ – representa la permeabilidad

$\theta$ – porosidad

P– presión

$\rho$ – densidad

g – gravedad

#### **1.4.6 Transporte por dispersión: ley de Fick.**

En la hidrodinámica el estudio de la dispersión se divide en dos conceptos: difusión turbulenta y difusión molecular.

- ***Difusión molecular:*** La difusión molecular es el desplazamiento aleatorio de las moléculas de solutos entre las moléculas de agua debido al movimiento browniano de las partículas. En la práctica se observa una homogenización de las partículas en la solución, de manera que el efecto es como si las moléculas se “desplazaran” desde las zonas de mayor concentración a las de menor, por lo que siempre que exista un gradiente de concentración, se dará este fenómeno. Es un proceso extraordinariamente lento que no suele ser importante a efectos prácticos en el estudio de sistemas naturales.
- ***Difusión turbulenta:*** La difusión turbulenta hace referencia al transporte de sustancias disueltas y pequeñas partículas causada por turbulencias a pequeña (micro) escala. Se trata de un transporte advectivo a microescala producido por fluctuaciones turbulentas de la velocidad instantánea. Dichas fluctuaciones están producidas por los esfuerzos cortantes que se dan en el interior de las masas de agua. Su magnitud es varias veces superior a la difusión molecular. Puede darse en las tres direcciones del espacio, pero suele ser anisotropía. (Martín - Monerris & Marzal - Doménech, 2010)

### 1.4.7 Primera ley de Fick para el agua.

Para describir la difusión de un constituyente de soluto cuantitativamente, debe establecerse una relación entre el flujo de masa por unidad de tiempo por unidad de área  $F_s$  y el gradiente de concentración  $\nabla C$ . El primer estudio cuantitativo de difusión fue realizado por un médico alemán Adolf E. Fick (1829 a 1901) en 1855, quien notó una analogía entre la difusión molecular y la transferencia de calor por conducción.

$$F_s = D\nabla C \quad (1.4.11)$$

Donde  $D$  es el tensor dispersión hidrodinámica y está definido como (Bear, 1972) :

$$d_{ij} = \alpha_T |v| + (\alpha_L + \alpha_T) \frac{u_i u_j}{|v|} \quad (1.4.12)$$

Donde:

$\alpha_T$  – Dispersión transversal

$\alpha_L$  – Dispersión longitudinal

$u_i u_j$  – Componentes de la velocidad de flujo

$|v|$  – Módulo de la velocidad de flujo

### 1.4.8 Importancia del transporte de soluto por difusión.

Los mecanismos reconocidos que afectan el transporte de solutos a través de materiales geológicos saturados incluyen el transporte como resultado del movimiento masivo de la fase fluida (convección o Advección) y el transporte dispersivo causado por la variación en la velocidad, en la velocidad media y difusión molecular. En materiales geológicos de grano fino, el mecanismo principal del transporte de solutos es la difusión molecular.

#### **Transporte por dispersión en medios porosos**

Consideremos un flujo promedio de agua subterránea unidimensional. Esto también se puede visualizar en el experimento Darcy. Las direcciones medias del flujo se muestran en el sentido de la velocidad de Darcy. Debido a las formas irregulares de granos y poros, las velocidades del fluido local dentro de los poros individuales se desvían de la velocidad promedio del poro. Dichas variaciones de velocidad hacen que el soluto sea transportado a gradientes descendentes a diferentes velocidades, lo que lleva a un proceso de mezcla que es

macroscópicamente similar a la mezcla causada por el transporte difusivo. Debido a la naturaleza pasiva del proceso de dispersión, el término dispersión mecánica se usa a menudo para describir la mezcla causada por variaciones de velocidad locales (Fried, 1975).

Henry Darcy utilizó un aparato similar al que hoy conocemos como permeámetro figura 4 el cual consiste en un recipiente de sección constante por el cual se hace circular agua a través de un medio poroso, conectando a uno de sus extremos un depósito elevado de nivel constante y en el otro extremo se regula el caudal de salida mediante una llave y se mide la altura de la columna de agua antes y después de atravesar la sección porosa.

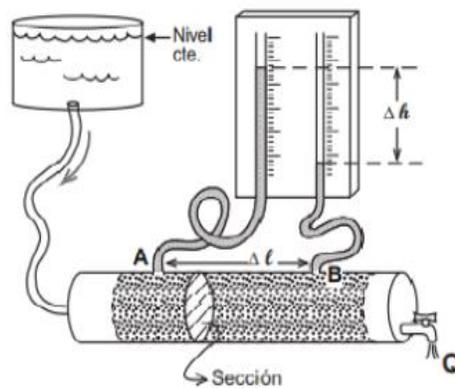


Figura 5 Dispositivo de Darcy

donde

$q$  – caudal

$\Delta h$  – diferencia de potencial

$\Delta l$  – distancia entre A y B

$\frac{\Delta h}{\Delta l}$  – gradiente hidráulico

Básicamente un permeámetro es un recipiente de sección constante por el que se hace circular agua conectando a uno de sus extremos un depósito elevado de nivel constante. En el otro extremo se regula el caudal de salida mediante un grifo que en cada experimento mantiene el caudal también constante. Finalmente, se mide la altura de la columna de agua en varios puntos.

Darcy encontró que el caudal que atravesaba el permeámetro era linealmente proporcional a la sección y al gradiente hidráulico

### **Termino fuente/sumidero**

El último término del segundo miembro de la ecuación 1.4.5 representa todas las posibles entradas y salidas de la sustancia en estudio no asociadas al transporte convectivo-dispersivo que puedan producirse por unidad de tiempo y de volumen de fluido

En esta ecuación se desprecia este término puesto que no vamos a considerar la sorción ya que la sustancia que se va a tratar no reacciona con el solvente sino que se disuelve completamente, por tanto no tiene sentido incluir este término.

## **1.5 Características y metabolismo de las bacterias Anammox**

El proceso de anammox juega un papel primordial en el ciclo del nitrógeno, hoy en día es muy utilizado en plantas de tratamiento de aguas contaminadas con nitrito y amonio

### **1.5.1 Ciclo del nitrógeno**

El ciclo del nitrógeno es uno de los ciclos biogeoquímicos más importantes que tienen lugar en la naturaleza, permitiendo mantener un equilibrio dinámico entre las distintas formas de nitrógeno y la composición de la biosfera. Se trata de un proceso cíclico a través del cual el nitrógeno se incorpora al suelo y pasa a formar parte de los organismos vivos antes de regresar a la atmósfera. El ciclo del nitrógeno está compuesto por diferentes procesos naturales que mediante la acción de diversos microorganismos suministran este elemento a los seres vivos.

El nitrógeno, parte esencial de las proteínas y los aminoácidos, se encuentra mayoritariamente en la atmósfera. El porcentaje de nitrógeno en el aire es del 79%. Sin embargo, este nitrógeno gas tiene que ser transformado químicamente para poder ser utilizado por los seres vivos a través de su fijación y asimilación. Posteriormente, mediante una serie de reacciones, este nitrógeno asimilado es convertido en compuestos susceptibles de ser utilizados por organismos vivos. Estas reacciones se llevan a cabo a través del ciclo del nitrógeno. Ver figura ( ).

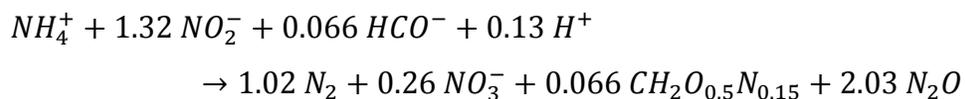


**Desnitrificación:** Conversión del nitrato a gas nitrógeno, realizada exclusivamente por bacterias, arqueobacterias como eubacterias Gram positivas y Gram negativa. Los intermediarios en la ruta reductora son el ion nitrito y el óxido nitroso, cuando hay un alto contenido de nitrato se libera algo de óxido nitroso junto al gas nitrógeno.

Sin embargo, recientemente se han descubierto nuevos microorganismos que intervienen en el ciclo global del nitrógeno. Uno de estos organismos son las bacterias anammox, que oxidan el amonio a nitrógeno gas utilizando el nitrito como receptor de electrones en condiciones anaerobias y sin la necesidad de materia orgánica (M Strous, Heijnen, Kuenen, & Jetten, 1998).

(Broda, 1977) Fue el primero que postuló, a partir de cálculos termodinámicos, la posible existencia en la naturaleza de microorganismos capaces de realizar la oxidación anaerobia del amonio, la cual se creía que sólo podía llevarse a cabo en condiciones aerobias. En 1995, (Mulder, 1995) y su equipo de trabajo confirmaron experimentalmente la teoría desarrollada por Broda, al observar, en un reactor de una planta de tratamiento de aguas residuales de Gist-Brocades, la eliminación simultánea de amonio y nitrato en condiciones anaerobias, que directamente se transformaban en nitrógeno gas. Este nuevo sistema de desnitrificación, patentado en el año 1992 (EP-0-327-184-A1), se denominó anammox.

Posteriormente, (Van de Graaf et al., 1995) demostraron que el proceso anammox es un proceso biológico ya que la concentración de biomasa responsable de esta oxidación es proporcional a la velocidad de consumo de amonio y nitrito. Además, determinaron que el aceptor de electrones era el nitrito y no el nitrato. (M Strous et al., 1998) Propusieron, a partir de trabajos experimentales la estequiometría del proceso anammox.



Estas bacterias realizan la oxidación anaeróbica de  $NH_4^+$  con  $NO_2^-$  (reacción catabólica) produciendo  $N_2$  y  $NO_3^-$  como principales productos.



Este proceso se lleva a cabo por varias bacterias quimiolitotróficas, relacionadas con planctomycetes. Se han estudiados una variedad de estas especies como son la Brocadia,

Kuenernia, Jettenia y Anammoxoglobus para aguas dulces y en el caso de los ecosistemas marinos la Scalindua. Estas bacterias se encuentran en casi cualquier lugar del planeta, en los océanos y en todos los ecosistemas de aguas dulces ya sean subterráneos o superficiales además de las plantas de tratamiento de aguas residuales.

### **1.5.2 Actividad del anammox**

La actividad de anammox (AA) se midió en función de la tasa de producción de  $N_2$  y expresado en  $mmol$ , se calculó a partir de la pendiente máxima en el transcurso del tiempo de la concentración de  $N_2$  en el espacio. La única excepción fue por el efecto inhibitor del oxígeno disuelto y  $N_2H_4$ , que se evaluó en función de la tasa de consumo de  $NO_2^-$ . La inhibición se expresó como la actividad relativa del anammox (RAA) (%) =  $[AA_{inhibidor} / AA_{referencia}] \times 100$ . En el experimento que evalúa el efecto de diferentes valores iniciales de pH, se escogió como pH de referencia de AA aquel donde fue óptimo la actividad del anammox. El resultado fue que el consumo de  $NO_2^-$  y  $NH_4^+$ , así como formación de  $NO_2^-$  correspondía a la producción de  $N_2$  de acuerdo con la estequiometría de la reacción de anammox en todos los ensayos por lotes. El valor de pH final se midió para confirmar que el óptimo rango fue mantenido.

### **1.5.3 Factores que afectan la actividad del anammox**

El proceso anammox es sensible a alteraciones de los diferentes parámetros que intervienen en el sistema y a la presencia de tóxicos e inhibidores, lo que puede retardar la puesta en marcha del proceso. A continuación, se presenta la influencia de los parámetros fisicoquímicos que intervienen en el proceso (pH, temperatura, oxígeno disuelto, entre otros), así como los efectos de la concentración de sustrato (amonio y nitrito).

#### **Según el PH**

La actividad de las bacterias anammox puede verse afectada por el pH. Según (Jetten et al., 1999), el rango de pH activo para llevar a cabo el proceso anammox está entre 6.7 y 8.3, con un pH óptimo de 8 para la especie *Brocadia anammoxidans*, en el que se obtiene la mayor tasa de eliminación de amonio y nitrito.

#### **Según la Temperatura**

(M. Strous, Kuenen, & Jetten, 1999) Calcularon las velocidades de eliminación de sustrato y de generación de nitrato a diferentes temperaturas. Estos autores observaron que la temperatura óptima para llevar a cabo el proceso anammox oscilaba entre 37 y 43°C. En este sentido, para determinar la temperatura óptima a la que operan los microorganismos anammox, (Egli et al., 2001) llevaron a cabo estudios a diferentes temperaturas (entre 10 y 45°C). La máxima actividad anammox observada fue a 37°C. Por otro lado, no se observó actividad anammox a una temperatura de 45°C y la actividad a 11°C era un 24% de la observada a 37°C. Entre 20 y 37°C se determinó una actividad anammox inferior a la obtenida a 37°C.

#### **1.5.4 Efecto de la concentración de sustrato y otras especies químicas.**

(M. Strous et al., 1999) También determinaron que las bacterias anammox no eran inhibidas por elevadas concentraciones de amonio y nitrato. Sin embargo, en este mismo estudio se comprobó que el proceso era inhibido por la presencia de nitrito cuando la concentración era superior a 100 mg. Analizando las concentraciones de nitrito que inhiben el proceso anammox se deduce que los géneros *Kuenenia* y *Scalindua* tienen una tolerancia más elevada al nitrito que el género *Ca. Brocadia*. Sin embargo, cuando más elevada es la concentración de biomasa anammox se produce una mayor degradación de nitrito y por lo tanto una menor inhibición del proceso.

El nitrato es una especie química que puede generarse a partir del uso de fertilizantes y en algunos procesos industriales. Esta especie puede infiltrarse a través de distintas capas del suelo hasta llegar a los acuíferos subterráneos y de acuerdo a la cantidad podría considerarse como una especie contaminante de estas aguas. La presencia de  $NO_3^-$  podría afectar la calidad del agua que usualmente la sociedad consume y además a las especies biológicas que pudiesen encontrarse en ellas como las bacterias anammox. Se ha estudiado como es influenciada la actividad relativa del anammox por la presencia de diversas especies químicas entre ellas el nitrato figura 6.

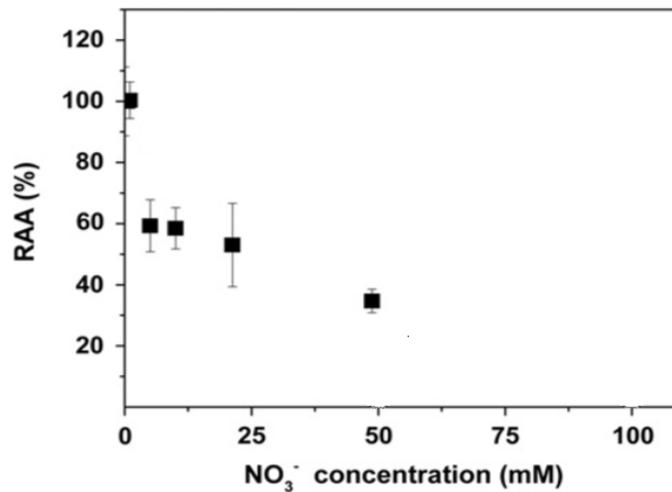


Figura 7. Actividad relativa del anammox contra concentración de nitrato. (Carvajal-Arroyo, 2013)

Como puede verse para concentraciones mayores de 50mM existe una fuerte inhibición de estas bacterias.

### 1.6 Conclusiones parciales.

Los temas tratados en este capítulo dan la oportunidad de conocer las características de las aguas subterráneas y los principales tipos de acuíferos que existen. Además de dar las principales herramientas para conocer el modelado de la infiltración de contaminantes en medios porosos y los procesos físicos que influyen en el mismo. Por último se hace un estudio general del proceso anammox y las ventajas e implicaciones que tiene el mismo como parte del ciclo del nitrógeno y para el medio donde habitan. Se expuso la actividad relativa del proceso de anammox con respecto a la concentración de nitratos para describir cómo afecta este en la actividad biológica del mismo.

## CAPÍTULO 2 PROPUESTA Y ANÁLISIS DEL MODELO PRELIMINAR DE TRANSPORTE DE NITRATO HACIA ACUÍFEROS

En este capítulo expondremos la ecuación del modelo matemático y las condiciones en las cuales trabajaremos. Se presenta la solución analítica del modelo así como el método por el cual se le dio solución al problema matemático que estamos tratando. Además se tratan los métodos experimentales para el cálculo de los coeficientes que aparecen en la ecuación.

### 2.1 Propuesta del modelo

Después de haber hecho un estudio de los problemas de contaminación en aguas subterráneas, así como los procesos físicos, químicos y biológicos que intervienen en el fenómeno de transporte de contaminantes al manto freático, se afronta el análisis de la modelación del sistema. El modelo tiene sus bases en la ecuación de balance de masa y a partir de esta se comienza trabajar con las condiciones del caso de estudio.

Escribiendo la ecuación 1.4.4 en función de los operadores de forma general:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = V * \nabla C - \nabla(D\nabla C) \quad (2.1.1)$$

Esta es una ecuación descrita en tres dimensiones pero para el caso de estudio no era de interés trabajar con ella por lo tanto se decidió para una primera aproximación adaptarla a una dimensión.

Transformando la anterior ecuación a una dimensión nos queda:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = V \frac{\partial C}{\partial z} - \frac{\partial(D \frac{\partial C}{\partial z})}{\partial z} \quad (2.1.2)$$

Como en este caso trabajaremos con una sola coordenada el tensor dispersión toma la forma (Vedat, 2006)

$$d = \alpha * v \quad (2.1.3)$$

donde:

$\alpha$ – coeficiente de dispersividad

$v$ – Velocidad del flujo

Escribiendo la ecuación con el nuevo término de dispersión nos queda:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = V_z \frac{\partial C_z}{\partial z} - \frac{\partial(d \frac{\partial C}{\partial z})}{\partial z} \quad (2.1.4)$$

Ahora trabajando algebraicamente

$$\frac{\partial C}{\partial t} = V_z \frac{\partial C_z}{\partial z} - d \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (2.1.5)$$

Sustituyendo ahora el término de dispersión:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = V_z \frac{\partial C_z}{\partial z} - \alpha V_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (2.1.6)$$

Introduciendo el término de velocidad de Darcy para medios porosos descrita en el capítulo anterior obtenemos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{K}{\theta} \rho g \frac{\partial C}{\partial z} - \alpha \frac{K}{\theta} \rho g \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = 0 \quad (2.1.7)$$

Ecuación que describe el comportamiento del flujo contaminante.

## 2.2 Condiciones iniciales y de contorno.

El tipo de ecuaciones diferenciales presentadas se encuentra comúnmente en varias ramas de la física – matemática, como la dinámica de fluidos, la electricidad, el magnetismo, el flujo de calor, el flujo de agua subterránea y otros. Aunque las ecuaciones mencionadas anteriormente se aplican al transporte de solutos en un campo de flujo, no incluyen ninguna información con respecto a ningún caso específico de flujo o la forma y los límites del dominio de transporte de solutos.

La forma y los límites, así como las condiciones iniciales para un problema particular de transporte de solutos, corresponden a una de las soluciones de la correspondiente ecuación diferencial para el acuífero. En base a numerosas condiciones iniciales y de contorno, se desarrollaron varias soluciones para las ecuaciones diferenciales de transporte de solutos de una dimensión durante las últimas cuatro décadas. La comprensión del significado físico de las diferentes condiciones iniciales y de contorno es importante no solo para el desarrollo de

soluciones matemáticas, sino también para la selección de una solución a partir de un conjunto de soluciones que se utilizarán para un caso particular.

### 2.2.1 Condiciones Iniciales

Para problemas de transporte de solutos, se supone que se conoce la distribución de la concentración en el dominio de transporte de solutos en un momento particular. Las condiciones iniciales para la concentración generalmente se especifican cuando el tiempo es cero ( $t = 0$ ). La expresión matemática para esta condición es:

$$C(z, t) = \tau(z)$$

para todos los puntos del dominio en  $t = 0$ .

Para las soluciones analíticas de transporte de solutos, la concentración inicial generalmente se toma como cero. Pero en nuestro caso de estudio tomamos como condición inicial la ecuación (2.2.1) que describe que en el instante inicial cuando el fluido empieza a filtrarse toda la concentración se encuentra en la superficie ( $C_o$ ), esto aclarado bien no debe tender a confundir puesto que puede haber una concentración determinada a una distancia  $z$  cualquiera que no va a ser numéricamente igual a  $C_o$ :

$$C(z, 0) = \begin{cases} C_o & z = 0 \\ 0 & z \neq 0 \end{cases} \quad z \geq 0 \quad (2.2.1)$$

### 2.2.2 Condiciones de contorno

La selección de las condiciones de frontera para un modelo numérico o conceptual involucra una simplificación considerable de las condiciones hidrogeológicas actuales, para evitar tales errores, las consideraciones subyacentes así como simplificaciones deben ser completamente entendidas y su efecto en la respuesta del modelo debe ser críticamente evaluada.

El flujo con frecuencia entra y sale a través de la frontera y en algunos casos se conoce las tasas de flujo en la frontera, pero en otros casos no. Por razones matemáticas necesitamos las condiciones de frontera en todo el alrededor (arriba, abajo y a los lados) del acuífero.

Las condiciones de contorno son:

$$C(0, t) = C_o e^{\gamma t}, \quad t \geq 0 \quad (2.2.2)$$

$$C(l, t) = 0, \quad t \geq 0 \quad (2.2.3)$$

Donde  $\gamma$  representa el parámetro de decaimiento para fluidos en un medio poroso que describir la disminución de la concentración de una solución con respecto al tiempo probado y validado por (Vedat, 2006) en su modelo de infiltración.

### **2.3 Consideraciones y limitaciones del modelo.**

#### **Consideraciones:**

- El movimiento del flujo ocurre por el proceso convectivo-dispersivo por lo tanto la ecuación del modelo es una ecuación de convección-difusión.
- El contaminante del caso de estudio es el nitrato el cual no sufre hidrólisis lo que le ocurre es que parte de la concentración inicial es diluida en agua.
- Se considera que toda la masa de agua se traslada por gravedad hacia el acuífero.
- Para un medio isotrópico el flujo por unidad de área desde una frontera hasta un acuífero está dada por la ley de Darcy.
- No hay fuerzas internas.
- Se supone que el suelo es no saturado.

#### **Limitaciones:**

- Al trabajar en una sola dimensión se acota el modelo, esto trae consigo que solo se podrá aplicar a condiciones geométricas y de dominio como las que están tratadas anteriormente.
- Como en la ecuación del modelo no se introducen términos de fotólisis e hidrólisis, tenemos que tener en cuenta que solamente podemos estudiar solutos que se disuelvan en agua con facilidad.

### **2.4 Modelos analíticos y numéricos aplicados a los acuíferos.**

Los modelos numéricos son capaces de hacer predicciones sobre el transporte de contaminantes en medios no homogéneos y anisótropos bajo diferentes condiciones de estrés, incluyendo pozos de extracción, pozos de inyección y otros, pero ciertos requisitos deben ser satisfechos para producir resultados convergentes y numéricamente estables. Se encuentran disponibles varios modelos numéricos sofisticados (diferencia finita, elemento finito y otros) para resolver las ecuaciones diferenciales de transporte de soluto de flujo y convectivo

dispersivo para predecir los patrones del flujo de aguas subterráneas y las variaciones espaciales y temporales en las concentraciones de contaminantes en los acuíferos. Para complicadas condiciones hidrogeológicas o contaminantes, los modelos numéricos tienen una ventaja significativa sobre los modelos analíticos porque tienen la capacidad de simular el transporte de solutos en condiciones de flujo de acuífero no uniforme con parámetros de transporte de solutos espacialmente variables, condiciones iniciales arbitrarias y condiciones de contorno relativamente complejas.

Sin embargo, los modelos numéricos son relativamente caros y en muchos casos al menos inicialmente los datos insuficientes limitan la aplicación efectiva de un modelo numérico. Para muchos proyectos, los modelos numéricos pueden no ser factibles debido a restricciones presupuestarias. Los modelos analíticos de flujo y transporte de solutos pueden ser más útiles para resolver problemas de acuíferos. Estos pueden ser herramientas útiles para estimar el destino y el transporte de diversos componentes en los acuíferos. Su aplicación generalmente se limita a situaciones con campos de flujos estables y uniformes y a problemas de condiciones iniciales y de contorno relativamente simples. En comparación con los modelos numéricos, los modelos analíticos suelen proporcionar más información sobre el comportamiento matemático conceptual del sistema sus soluciones informáticas son más fáciles de operar, más económicas de usar y contienen muchos menos parámetros que las soluciones numéricas.

Las ventajas de los modelos analíticos se pueden resumir de la siguiente manera (Van de Graaf et al., 1995):

1. Pueden formar complementos útiles para los modelos numéricos, ya sea formando parte de modelos numéricos o para su verificación.
2. A menudo proporcionan estimaciones iniciales importantes para una cantidad de casos simplificados. Por ejemplo, el transporte vertical a largo plazo de productos químicos durante el flujo no saturado-insaturado inestable se puede describir con bastante precisión con modelos analíticos apropiados. Lo mismo es cierto para el transporte bidimensional o tridimensional desde varias fuentes de área, línea y puntos superficiales.

## 2.5 Determinación experimental de cada parámetro de la ecuación 2.1.7

**2.5.1 Permeabilidad.** Se entiende por permeabilidad, la propiedad de un suelo que permite el paso del agua a través de sus vacíos, bajo la acción de una carga hidrostática.

No todos los suelos tienen la misma permeabilidad, de ahí que se los haya dividido en suelos permeables e impermeables, estos últimos son generalmente suelos arcillosos, donde la cantidad de escurrimiento del agua es pequeña y lenta.

Para el cálculo de la permeabilidad en el suelo primeramente hay que conocer el coeficiente de permeabilidad, el cual se basa en la ley propuesta por Darcy ecuación 1.4.10.

Independiente de lo anterior, existen factores que influyen en la permeabilidad de un suelo, como por ejemplo la viscosidad del fluido (varía según la temperatura), el tamaño, continuidad de poros y grietas a través de los cuales pasa el fluido o la presencia de discontinuidades.

En laboratorio, la medida del coeficiente de permeabilidad se realiza por medio de permeámetros, los que pueden ser de nivel constante o nivel variable dependiendo del tipo de suelo analizado. La importancia de este coeficiente, es vital para poder determinar por ejemplo: la capacidad de retención de aguas de presas o embalses de tierra, la capacidad de las bombas para rebajar el nivel freático en una excavación y para poder determinar la velocidad de asentamiento de una estructura al escurrir el agua, entre otros.

Tabla 1 Clase de permeabilidad de los suelos.

Clase de permeabilidad en los suelos	Índice de Permeabilidad	
	cm/hora	cm/día
Muy lenta	Menor de 0.13	Menor de 3
Lenta	0.13 – 0.3	3 – 12
Moderadamente lenta	0.3 – 2.0	12 – 48
Moderada	2.0 – 6.3	48 – 151
Moderada rápida	6.3 – 12.7	151 – 305
Rápida	12.7 – 25	305 – 600
Muy rápida	Mayor de 25	Mayor de 600

**2.5.2 Porosidad.** La porosidad de las rocas se puede determinar mediante técnicas de medición en el laboratorio o a través de perfiles de pozos en el terreno.

Para el caso de la técnica de medición en el laboratorio, consisten en determinar dos de los tres parámetros básicos de la roca (volumen total, volumen poroso y volumen de los granos). Para ello se utilizan núcleos de roca, los cuales son obtenidos durante la perforación de un pozo en el lugar donde se va a realizar el estudio. Las muestras se toman en forma de tapones cortados del núcleo de las rocas con herramientas que te lo permitan con un diámetro aproximado de entre (25mm-40mm)

#### Determinación del volumen total.

El volumen total puede ser calculado por medición directa de las dimensiones de la muestra utilizando un vernier. Este procedimiento es útil cuando las muestras presentan formas regulares debido a su rapidez.

Para muestras de volúmenes irregulares el procedimiento utilizado usualmente consiste en la determinación del volumen de fluido desplazado por la muestra. Algunos de los métodos utilizados para determinar el volumen del fluido desplazado se presentan a continuación:

**Métodos gravimétricos:** el volumen total se obtiene observando la pérdida de peso de la muestra cuando es sumergida en un líquido, o por el cambio en peso de un picnómetro cuando se llena con mercurio y cuando se llena con mercurio y la muestra.

Los **métodos gravimétricos** más utilizados son:

- Recubrimiento de la muestra con parafina e inmersión en agua.
- Saturación de la muestra e inmersión en el líquido.
- Inmersión de la muestra seca en mercurio.

#### **Métodos volumétricos**

Los métodos utilizados son el del picnómetro de mercurio y la inmersión de una muestra saturada.

- El método del picnómetro de mercurio consiste en determinar el volumen de un picnómetro lleno con mercurio hasta una señal. Luego se coloca la muestra y se

inyecta mercurio hasta la señal. La diferencia entre los dos volúmenes de mercurio representa el volumen total de la muestra.

- El método de inmersión de una muestra saturada consiste en determinar el desplazamiento volumétrico que ocurre al sumergir la muestra en un recipiente que contiene el mismo líquido empleado en la saturación.
- El método de desplazamiento con mercurio es práctico para determinar el volumen total de muestras cuando se encuentran bien cementadas, de lo contrario debe emplearse el método de inmersión de una muestra saturada.

### **Determinación del volumen de los granos.**

En estos métodos se utilizan muestras consolidadas y se le extraen los fluidos con un solvente que posteriormente se evapora. Los principales métodos utilizados son:

- Método de Melcher-Nuting.
- Método del porosímetro.
- Densidad promedio de los granos.

El **método de Melcher-Nuting** consiste en determinar el volumen total de la muestra y posteriormente triturarla para eliminar el volumen de espacios vacíos y determinar el volumen de los granos.

El **método de Stevens** es un medidor del volumen efectivo de los granos. El porosímetro consta de una cámara de muestra que puede ser aislada de la presión atmosférica y cuyo volumen se conoce con precisión. El núcleo se coloca en la cámara, se hace un vacío parcial por la manipulación del recipiente de mercurio, con esto se logra que el aire salga de la muestra y es expandido en el sistema y medido a la presión atmosférica. La diferencia entre el volumen de la cámara y el aire extraído es el volumen efectivo de los granos.

Tomando la densidad del cuarzo (2.65 gr/cc) como valor promedio de la densidad del grano, el volumen de los granos puede ser determinado con el peso de la muestra como se observa en la ecuación (). Este método se utiliza en trabajos que no requieren gran exactitud.

$$V_{\text{granos}} = \frac{M_{\text{granos}}}{P_{\text{granos}}} = \frac{M_{\text{granos}}}{2.65} \quad (2.5.1)$$

donde,

$M_{granos}$  - e la masa de la muestra.

$P_{granos}$ - densidad de los granos.

Entonces para calcular la porosidad:

$$\theta = \frac{V_{granos}}{V_{muestra}} \quad (2.5.2)$$

donde

$V_{muestra}$ -volumen de la muestra.

## 2.6 Solución Analítica

Para la solución analítica del modelo se utilizó fundamentalmente el método de separación de variable. Primeramente llevamos a la ecuación (2.1.7) a una forma canónica que nos resultara más fácil el trabajo, mediante las siguientes transformaciones:

$$C = e^{\lambda z + \mu t} \quad (2.6.1)$$

$$C_z = e^{\lambda z + \mu t} (v_z + \lambda v) \quad (2.6.2)$$

$$C_t = e^{\lambda z + \mu t} (v_t + \mu v) \quad (2.6.3)$$

$$C_{zz} = e^{\lambda z + \mu t} (v_{zz} + 2\lambda v_z + \lambda^2 v) \quad (2.6.4)$$

Sustituyendo en la ecuación obtenemos:

$$e^{\lambda z + \mu t} (v_t + \mu v) + q e^{\lambda z + \mu t} (v_z + \lambda v) - R e^{\lambda z + \mu t} (v_{zz} + 2\lambda v_z + \lambda^2 v) = 0 \quad (2.6.4)$$

Donde  $q = \frac{K}{\theta} \rho g$  y  $R = \alpha \frac{K}{\theta} \rho g$

Después de trabajar algebraicamente esta ecuación obtenemos que los coeficientes  $\lambda$  y  $\mu$  son:

$$\mu = -\frac{q^2}{4R} \quad (2.6.5)$$

y

$$\lambda = \frac{q}{2R} \quad (2.6.7)$$

Teniendo estos coeficientes llegamos a tener la ecuación reducida a su forma canónica:

$$v_t - Rv_{zz} = 0 \quad \forall 0 < z < l, t > 0 \quad (2.6.8)$$

Al obtener la forma canónica de la ecuación se puede apreciar que estamos en presencia de una ecuación diferencial en derivadas parciales de tipo parabólico.

Por tanto tenemos que transformar las condiciones de frontera y de contorno a la forma canónica mediante las mismas transformaciones anteriores.

$$v(z, 0) = \varphi(z) = 0 \quad z \geq 0 \quad (2.6.9)$$

$$v(0, t) = \mu(t) = C_0 e^{-\beta t} \quad \beta = \mu - \gamma \quad t \geq 0 \quad (2.6.10)$$

$$v(l, t) = \eta(t) = 0 \quad t \geq 0 \quad (2.6.11)$$

Ahora bien, aplicando el método de separación de variables o método de Fourier el cual se refiere a un procedimiento para encontrar una solución completa particular para ciertos problemas que involucran ecuaciones en derivadas parciales. Es uno de los métodos más productivos de la física matemática para buscar soluciones a problemas físicos descritos mediante ecuaciones diferenciales de derivadas parciales.

Para ello escribimos la ecuación 2.6.8 de la siguiente forma:

$$v_t = Rv_{zz} + f(z, t) \quad (2.6.12)$$

donde

$$f(z, t) = 0 \quad (2.6.13)$$

Para aplicar el método de separación de variable, es necesario que las condiciones de frontera sean homogéneas a este procedimiento le llamamos problema I. Por consiguiente, buscamos la solución de la forma:

$$v(z, t) = U(z, t) + \Omega(z, t) \quad (2.6.14)$$

Donde escogeremos la función  $\Omega(z, t)$  sea continua y diferenciable en todo el dominio  $(0, l)$  y de tal forma que el problema que quede para  $U(z, t)$  tenga las condiciones de frontera homogéneas.

$$U_t = RU_{zz} + f(z, t) - [\Omega_t - R\Omega_{zz}] \quad \forall 0 < z < l, t > 0 \quad (2.6.15)$$

Aplicando la misma transformación a las condiciones de frontera obtenemos:

$$U(z, 0) = \varphi(z) - \Omega(z, 0) = \begin{cases} 0, & z = 0 \\ C_o \left(1 - \frac{z}{l}\right), & z \neq 0 \end{cases} \quad z \geq 0 \quad (2.6.17)$$

$$U(0, t) = \mu(t) - \Omega(0, t) = 0 \rightarrow \mu(t) = \Omega(0, t) \quad (2.6.18)$$

$$U(l, t) = \eta(t) - \Omega(l, t) = 0 \rightarrow \eta(t) = \Omega(l, t) \quad (2.6.19)$$

Por tanto

$$\Omega(z, t) = \mu(t) + \frac{z}{l}[\eta(t) - \mu(t)] = C_o e^{-\beta t} - \frac{C_o z e^{-\beta t}}{l} \quad (2.6.20)$$

$$\Omega(z, t) = \left[1 - \frac{z}{l}\right] C_o e^{-\beta t} \quad (2.6.21)$$

$$\Omega_t = -\beta C_o \left[1 - \frac{z}{l}\right] e^{-\beta t} \rightarrow \Omega_t - R\Omega_{zz} = -\beta C_o \left[1 - \frac{z}{l}\right] e^{-\beta t} \quad (2.6.21)$$

$$\Omega_{zz} = 0 \quad (2.6.21)$$

En el proceso de transformación a homogéneas las condiciones de frontera tenemos que nos surge un nuevo problema el cual llamaremos problema II; pero en este caso estamos en presencia de una ecuación no homogénea.

$$U_t - RU_{zz} = F(z, t)$$

$$U_t = RU_{zz} - \beta C_o \left[1 - \frac{z}{l}\right] e^{-\beta t}$$

Con las nuevas condiciones contorno e iniciales:

$$U(0, t) = U(l, t) = 0 \quad t \geq 0$$

$$U(z, 0) = \psi(z) = C_o \left(1 - \frac{z}{l}\right) \quad z \geq 0$$

De acuerdo al principio de superposición el anterior problema se puede resolver proponiendo su solución como la suma de dos funciones:

$$U(z, t) = U_H(z, t) + U_p(z, t) \quad (2.6.22)$$

donde

$U_H$ -es la solución de la parte homogénea del problema II con las condiciones inicial y la condiciones de frontera homogéneas.

$U_p$  —es la solución con la parte no homogénea del problema II y las condiciones inicial y las condiciones de frontera homogéneas.

Para resolver la parte homogénea  $U_H$  aplicamos aplicando el método de separación de variables o método de Fourier el cual se refiere a un procedimiento para encontrar una solución completa particular para ciertos problemas que involucran ecuaciones en derivadas parciales. Es uno de los métodos más productivos de la Física Matemática para buscar soluciones a problemas físicos descritos mediante ecuaciones diferenciales de derivadas parciales.

Le llamaremos a la parte homogénea del problema II, problema III que tiene la forma:

$$U_t - RU_{zz} = 0 \quad (2.6.23)$$

Para ello realizamos el siguiente cambio de variable:

$$U_H(z, t) = X(z)T(t) \quad (2.6.24)$$

Donde  $X(z)$  es una función de una sola variable  $z$ ,  $T(t)$  solo de  $t$ .

Sustituyendo (2.6.24) en el problema III obtenemos:

$$\frac{\partial U(z,t)}{\partial t} - R \frac{\partial^2 U(z,t)}{\partial z^2} = 0 \quad (2.6.25)$$

Realizando el cambio de variable:

$$\frac{\partial [X(z)T(t)]}{\partial t} - R \frac{\partial^2 [X(z)T(t)]}{\partial z^2} = 0 \quad (2.6.27)$$

y ahora continuando con el trabajo algebraico:

$$X(z) \frac{\partial T(t)}{\partial t} - RT(t) \frac{\partial^2 X(z)}{\partial z^2} = 0 \quad (2.6.28)$$

Divido la ecuación (2.6.28) entre  $X(z)T(t)$  para acomodar el trabajo obtenemos

$$\frac{1}{X(z)} \frac{\partial^2 X(z)}{\partial z^2} = \frac{1}{RT(t)} \frac{\partial T(t)}{\partial t} = -m \quad (2.6.29)$$

Donde  $-m$  es una constante que se toma de signo negativo para comodidad de los razonamientos siguientes, sin hacer con esto ninguna suposición sobre su signo. Tales valores

del parámetro  $m$  se llaman valores propios. El problema enunciado de este modo se llama a menudo problema de Sturm-Liouville (Tijonov & Samarsky, 1972).

De la relación (2.6.29) obtenemos las siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias para la determinación de las funciones  $X(z)$  y  $T(t)$ .

$$X''(z) + mX(z) = 0 \quad (2.6.30)$$

Y

$$T'(t) + mRT(t) = 0 \quad (2.6.31)$$

La solución (2.6.30) tiene la forma:

$$X(z) = B_1 \cos(\sqrt{m}z + \phi) + B_2 \operatorname{sen}(\sqrt{m}z + \phi) \quad (2.6.32)$$

Para calcular las constantes evaluamos en las condiciones de frontera

$$X(0) = B_1 \cos(\phi) + B_2 \operatorname{sen}(\phi) = 0 \quad B_1 = 0; \phi = 0$$

$$X(l) = B_2 \operatorname{sen}(\sqrt{m}l) = 0,$$

$$\sqrt{m}l = n\pi$$

$$\sqrt{m} = \frac{n\pi}{l}$$

$$m = \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2$$

$$m = m_n = \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2$$

donde

$$n = \{1, 2, 3, 4, \dots, j\}$$

$$X(z) = B_n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}z\right)$$

La solución de (2.6.31) tiene la forma:

$$T(t) = F_n e^{-Rm_j t} = F_n e^{-R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} \quad (2.6.33)$$

$$U_{Hn}(z, t) = G_n e^{-R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}z\right) \quad (2.6.34)$$

donde

$$G_n = F_n B_n$$

La solución para la parte homogénea es:

$$U_H(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} G_n e^{-R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l} z\right) \quad (2.6.35)$$

La función satisface las condiciones de frontera, puesto que la satisfacen todos los términos de la serie. Al pedir que se cumplan las condiciones iniciales, se obtiene:

$$\psi(z) = U_H(z, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} G_n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l} z\right) \quad (2.6.36)$$

Es decir  $G_n$  son los coeficientes de Fourier de la función  $\psi(z)$  al desarrollar en serie de senos en el intervalo  $(0, l)$ :

$$G_n = \psi_n = \frac{2}{l} \int_0^l \psi(\xi) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l} \xi\right) d\xi = \frac{2C_0}{l} \int_0^l (\xi - 1) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l} \xi\right) d\xi \quad (2.6.37)$$

Después de integrar obtenemos la solución para los coeficientes de Fourier.

$$G_n = -\frac{2C_0}{n\pi} \quad (2.6.38)$$

Entonces la solución general para la parte homogénea es:

$$U_H(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} -\frac{2C_0}{n\pi} e^{-R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l} z\right) \quad (2.6.39)$$

Lo siguiente sería buscar la solución de la parte no homogénea la cual llamaremos problema IV, el cual tendría la forma:

$$U_t - RU_{zz} = F(z, t)$$

$$U_p(0, t) = U_p(l, t) = 0$$

$$U_p(z, 0) = 0$$

Para resolver el problema IV proponemos la solución como una serie de Fourier en  $\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l} z\right)$

$$U_p(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} U_n(t) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}z\right) \quad (2.6.40)$$

Además suponemos que la inhomogeneidad de la ecuación puede ser desarrollada en una serie de las autofunciones  $\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}z\right)$

$$F(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n(t) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}z\right) \quad (2.6.41)$$

donde

$$f_n(t) = \frac{2}{l} \int_0^l F(\xi, t) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}\xi\right) d\xi \quad (2.6.42)$$

$$f_n(t) = \frac{2}{l} \int_0^l \beta C_o \left[1 - \frac{\xi}{l}\right] e^{-\beta t} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}\xi\right) d\xi = \frac{2\beta C_o}{l} e^{-\beta t} \int_{n=1}^{\infty} \left[1 - \frac{\xi}{l}\right] \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}\xi\right) d\xi$$

$$f_n(t) = \frac{2\beta C_o e^{-\beta t}}{n\pi} \quad (2.6.43)$$

Sustituyendo en 2.6.40 y 2.6.41 en IV se tiene que:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \dot{U}_n(t) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}z\right) - R \sum_{n=1}^{\infty} (-1) \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 U_n(t) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}z\right) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n(t) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}z\right)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \dot{U}_n(t) + R \left(\frac{n\pi}{l}\right) U_n(t) - f_n(t) \right\} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}z\right) = 0$$

Esta ecuación se cumple si los términos que esta entre llaves son cero:

$$\dot{U}_n(t) + R \left(\frac{n\pi}{l}\right) U_n(t) - f_n(t) = 0 \quad (2.6.42)$$

Teniendo en cuenta que en este caso (III) la solución inicial es nula.

$$U_p(z, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} U_n(0) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{l}z\right) = 0 \rightarrow U_n(0) = 0 \quad (2.6.43)$$

Aquí se nos presenta otra situación la cual llamamos problema V el consiste en hallar la solución de la siguiente ecuación diferencial 2.6.42 la cual es lineal y de primer orden. El factor de integración de esta ecuación sería:

$$I(t) = e^{R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t}$$

Multiplicando V por  $I(t)$  tenemos:

$$e^{\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} \dot{U}_n(t) + R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 U_n(t) e^{R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} = f_n(t) e^{R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} \quad (2.6.44)$$

Simplificando un poco esta ecuación:

$$\frac{d}{dt} \left( e^{R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} U_n(t) \right) = f_n(t) e^{R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t}$$

Por tanto

$$e^{R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} U_n(t) = \int f_n(t) e^{R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} dt + c$$

$$e^{R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} U_n(t) = \frac{2\beta C_0}{n\pi} \int e^{[R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 - \beta]t} dt + c = \frac{2\beta C_0 e^{[R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 - \beta]t}}{n\pi e^{R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 - \beta}} + c$$

Por tanto

$$\frac{2\beta C_0 e^{-\beta t}}{n\pi R \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 - \beta} + c e^{-R\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t}$$

Para calcular a  $c$  evaluamos en  $U_n(0)$

$$U_n(0) = \frac{2\beta C_0}{n\pi R \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 - \beta} + c = 0$$

Lo que nos indica que:

$$c = -\frac{2\beta C_0}{n\pi R \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 - \beta} \quad (2.6.45)$$

$$U_n(t) = \frac{2\beta C_0 [e^{-\beta t} - e^{-R(\frac{n\pi}{l})^2 t}]}{n\pi R (\frac{n\pi}{l})^2 - \beta} = \frac{2\beta C_0 l^2 [e^{-\beta t} - e^{-R(\frac{n\pi}{l})^2 t}]}{n\pi R (n\pi)^2 - \beta l^2}$$

Lo que nos lleva a plantear la solución de V

$$U_p(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\beta C_0 l^2 [e^{-\beta t} - e^{-R(\frac{n\pi}{l})^2 t}]}{n\pi R (n\pi)^2 - \beta l^2} \text{sen} \left( \frac{n\pi}{l} z \right) \quad (2.6.46)$$

Ya tenemos lo necesario para construir la solución del problema IV

Como habíamos dicho anteriormente estábamos buscando una solución de forma:

$$U(z, t) = U_H(z, t) + U_p(z, t)$$

entonces

$$U(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ -\frac{2C_0}{n\pi} e^{-R(\frac{n\pi}{l})^2 t} + \frac{2\beta C_0 l^2 [e^{-\beta t} - e^{-R(\frac{n\pi}{l})^2 t}]}{n\pi R (n\pi)^2 - \beta l^2} \right\} \text{sen} \left( \frac{n\pi}{l} z \right) \quad (2.6.47)$$

Aquí tenemos la solución del problema II; si a este término le sumamos  $\Omega(z, t)$  obtendríamos la solución del problema I que tendría la forma:

$$v(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \left\{ -\frac{2C_0}{n\pi} e^{-R(\frac{n\pi}{l})^2 t} + \frac{2\beta C_0 l^2 [e^{-\beta t} - e^{-R(\frac{n\pi}{l})^2 t}]}{n\pi R (n\pi)^2 - \beta l^2} \right\} \text{sen} \left( \frac{n\pi}{l} z \right) \right] + \left[ 1 - \frac{z}{l} \right] e^{-\beta t} \quad (2.6.48)$$

Finalmente la solución del problema general sería:

$$C(z, t) = e^{\lambda z + \mu t} * \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \left\{ -\frac{2C_0}{n\pi} e^{-R(\frac{n\pi}{l})^2 t} + \frac{2\beta C_0 l^2 [e^{-\beta t} - e^{-R(\frac{n\pi}{l})^2 t}]}{n\pi R (n\pi)^2 - \beta l^2} \right\} \text{sen} \left( \frac{n\pi}{l} z \right) \right] + C_0 \left[ 1 - \frac{z}{l} \right] e^{-\beta t} \quad (2.6.49)$$

$$\begin{aligned}
C(z, t) = & e^{\frac{1}{2\alpha}z - \frac{K\rho g}{4\alpha\theta}t} \\
& * \left( \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \left\{ = -\frac{2C_o}{n\pi} e^{-\alpha \frac{K}{\theta} \rho g \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. + \frac{2 \left( -\frac{K\rho g}{4\alpha\theta} - \gamma \right) C_o l^2 \left[ e^{-\left(-\frac{K\rho g}{4\alpha\theta} - \gamma\right)t} - e^{-\alpha \frac{K}{\theta} \rho g \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} \right]}{n\pi \alpha \frac{K}{\theta} \rho g (n\pi)^2 - \left(-\frac{K\rho g}{4\alpha\theta} - \gamma\right) l^2} \right\} \text{sen} \left( \frac{n\pi}{l} z \right) \right] \right) \\
& + C_o \left[ 1 - \frac{z}{l} \right] e^{-\left(-\frac{K\rho g}{4\alpha\theta} - \gamma\right)t} \quad (2.6.50)
\end{aligned}$$

## 2.7 Conclusiones Parciales.

Para el desarrollo de este capítulo se modeló el proceso de infiltración de contaminantes en medios porosos al manto freático mediante procesos de advección y difusión por una ecuación diferencial a la cual se le aplicó una transformación canónica para reducirla a una forma más sencilla de trabajar; se le aplicó el método de separación de variables para hallar la solución del problema matemático.

## CAPÍTULO III ANÁLISIS Y RESULTADOS.

Se pretende en el siguiente capítulo analizar la solución del modelo, analizar la convergencia de la serie y calcular el error de truncamiento para ver la confiabilidad del mismo. Además se proponen 3 casos de estudio para ver el comportamiento de las soluciones y 2 casos reales donde podremos calcular la cantidad de nitrato que llega al manto freático al cabo de un tiempo provocado por el vertido de fertilizantes no orgánicos hallados en la bibliografía. Luego podremos evaluar la actividad relativa del anammox como un indicador de productividad primaria.

### 3.1 Análisis de la solución.

La solución del modelo propuesta ecuación 2.1.7 para las condiciones iniciales y de frontera 2.2.1, 2.2.2, 2.2.3 dada tiene la forma

$$C(z, t) = e^{\frac{1}{2\alpha}z - \frac{K\rho g}{4\alpha\theta}t} * \left( \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \left\{ -\frac{2C_o}{n\pi} e^{-\alpha \frac{K}{\theta} \rho g \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} + \frac{2 \left(-\frac{K\rho g}{4\alpha\theta} - \gamma\right) C_o l^2 \left[ e^{-\left(-\frac{K\rho g}{4\alpha\theta} - \gamma\right)t} - e^{-\alpha \frac{K}{\theta} \rho g \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 t} \right]}{n\pi \alpha \frac{K}{\theta} \rho g (n\pi)^2 - \left(-\frac{K\rho g}{4\alpha\theta} - \gamma\right) l^2} \right\} \text{sen} \left( \frac{n\pi}{l} z \right) \right] + C_o \left[ 1 - \frac{z}{l} \right] e^{-\left(-\frac{K\rho g}{4\alpha\theta} - \gamma\right)t} \right)$$

A esta solución debemos hacerle un análisis puesto que tenemos un término que tiene la forma de una serie de senos que debemos examinar con el objetivo de determinar su convergencia y posteriormente calcular el error de truncamiento que sea lo suficientemente pequeño como para no afectar la solución de nuestro problema.

Para la convergencia utilizamos el criterio de Leibniz el cual se demostró que converge uniformemente ver anexo 1. Determinamos que para un valor de  $n = 5$  tenemos que el error de truncamiento 0.2363% lo cual nos da un 99% de confiabilidad.

La serie para  $n = 5$  tiene la forma:

$$\begin{aligned}
H = & \left( \frac{2ce^{\frac{l}{2\alpha} - \frac{\alpha g k \pi^2 \rho}{l^2 s}}}{\pi} + \frac{2c \left( e^{(-\gamma - \frac{g k \rho}{4\alpha \theta})t} - e^{-\alpha} \right) l^2 \left( -\gamma - \frac{g k \rho}{4\alpha \theta} \right)}{l^2 \left( \gamma + \frac{g k \rho}{4\alpha \theta} \right) + \frac{\alpha g k \pi^3 \rho}{s}} \right) \text{Sen} \left[ \frac{\pi z}{l} \right] \\
& + \left( \frac{ce^{\frac{l}{2\alpha} - \frac{4\alpha g k \pi^2 \rho}{l^2 s}}}{\pi} \right. \\
& \left. + \frac{2c \left( e^{(-\gamma - \frac{g k \rho}{4\alpha \theta})t} - e^{-\frac{4\alpha g k \pi^2 \rho t}{l^2 s}} \right) l^2 \left( -\gamma - \frac{g k \rho}{4\alpha \theta} \right)}{l^2 \left( \gamma + \frac{g k \rho}{4\alpha \theta} \right) + \frac{8\alpha g k \pi^3 \rho}{\theta}} \right) \text{Sen} \left[ \frac{2\pi z}{l} \right] \\
& + \left( \frac{2ce^{\frac{l}{2\alpha} - \frac{9\alpha g k \pi^2 \rho}{l^2 s}}}{3\pi} \right. \\
& \left. + \frac{2c \left( e^{(-\gamma - \frac{g k \rho}{4\alpha \theta})t} - e^{-\frac{9\alpha g k \pi^2 \rho t}{l^2 \theta}} \right) l^2 \left( -\gamma - \frac{g k \rho}{4\alpha \theta} \right)}{l^2 \left( \gamma + \frac{g k \rho}{4\alpha \theta} \right) + \frac{27\alpha g k \pi^3 \rho}{\theta}} \right) \text{Sen} \left[ \frac{3\pi z}{l} \right] \\
& + \left( \frac{ce^{\frac{l}{2\alpha} - \frac{16\alpha g k \pi^2 \rho}{l^2 \theta}}}{2\pi} \right. \\
& \left. + \frac{2c \left( e^{(-\gamma - \frac{g k \rho}{4\alpha \theta})t} - e^{-\frac{16\alpha g k \pi^2 \rho t}{l^2 s}} \right) l^2 \left( -\gamma - \frac{g k \rho}{4\alpha \theta} \right)}{l^2 \left( \gamma + \frac{g k \rho}{4\alpha \theta} \right) + \frac{64\alpha g k \pi^3 \rho}{\theta}} \right) \text{Sen} \left[ \frac{4\pi z}{l} \right] \\
& + \left( \frac{2ce^{\frac{l}{2\alpha} - \frac{25\alpha g k \pi^2 \rho}{l^2 \theta}}}{5\pi} \right. \\
& \left. + \frac{2c \left( e^{(-\gamma - \frac{g k \rho}{4\alpha \theta})t} - e^{-\frac{25\alpha g k \pi^2 \rho t}{l^2 \theta}} \right) l^2 \left( -\gamma - \frac{g k \rho}{4\alpha \theta} \right)}{l^2 \left( \gamma + \frac{g k \rho}{4\alpha \theta} \right) + \frac{125\alpha g k \pi^3 \rho}{\theta}} \right) \text{Sen} \left[ \frac{5\pi z}{l} \right] \pm 0.2363\%
\end{aligned}$$

La solución final para la concentración en cualquier instante de tiempo en una profundidad  $z$  sería:

$$C(z, t) = e^{\frac{1}{2\alpha}z - \frac{K\rho g}{4\alpha\theta}t} * \left( H + C_o \left[ 1 - \frac{z}{l} \right] e^{-\left(\frac{K\rho g}{4\alpha\theta} - \gamma\right)t} \right) \quad (3.1.1)$$

### 3.2 Criterios de estabilidad.

La estabilidad numérica es una propiedad de los algoritmos numéricos que describe cómo se propagan los errores en los datos de entrada a través de dichos algoritmos. Un problema es estable cuando pequeños cambios en los datos de entrada originan pequeños cambios en los resultados. Dicha estabilidad garantiza que el problema a resolver no pierda el sentido lógico y físico (Jimenez Jaramillo, 2008), permitiendo así una aplicación práctica efectiva y cercana a la realidad del fenómeno que se quiere representar.

Los problemas de estabilidad están estrechamente relacionados con la discretización espacial y temporal ( $\Delta x$  y  $\Delta t$ , respectivamente) del esquema numérico que se emplee y, aunque son muchas las resoluciones que pueden darse al dominio del problema, existen expresiones que permiten establecer relaciones entre las diferentes variables (físicas y numéricas) haciendo de la discretización un problema fácil de resolver en términos de estabilidad. Los números adimensionales asociados al problema de transporte, son los que permiten determinar la discretización espacio – temporal del problema que garantiza la estabilidad de la solución de éste (Jimenez Jaramillo, 2008), Entre estos se encuentran el número de Courant y el número Difusivo.

Para los criterios de estabilidad es muy aplicada la condición de Courant-Friedrichs-Lewy (Condición CFL), la cual es una condición necesaria de convergencia fundamental que sitúa límites para el paso temporal, garantizando así la positividad del problema de transporte de advección-difusión-reacción y que la velocidad de la información numérica no sobrepase a la velocidad de la información física. Entonces, la condición CFL, para este tipo de transporte queda expresada de la siguiente forma:

$$\frac{\Delta x^2}{k\Delta x^2 + U\Delta x + 2E} \geq \Delta t \quad (3.2.1)$$

Desde el punto de vista físico, la interpretación de esta condición determina el comportamiento espacial del viaje de la solución en un paso  $\Delta t$ . También, la solución en el

siguiente paso temporal, debe incluir toda la información física proveniente del paso anterior que influye en la solución. La condición CFL asegura que el dominio de dependencia de las ecuaciones gobernantes sea contenido enteramente en el dominio de dependencia del esquema numérico.

La expresión (3.2.1) cambia según el problema de transporte a tratar. Si el transporte que predomina es el advectivo,  $E=0$ , si es el difusivo,  $U=0$ , y si la sustancia es conservativa, es decir, que no reacciona con el medio,  $k=0$ . Todo esto permite obtener en cualquier caso (definido  $\Delta x$ ) la resolución temporal que garantice la estabilidad de la solución numérica. Basta entonces establecer la resolución espacial del sistema para determinar la resolución temporal del mismo. Si se combinan el número difusivo y el número advectivo puede demostrarse, según W.L. Wood, 1993 que (Jimenez Jaramillo, 2008):

$$\Delta x < \frac{E}{0.5 U}$$

Otro tipo de manifestación de inestabilidad numérica es la dispersión numérica, que es la degeneración de la solución, producto de la discretización del problema a través del parámetro dispersivo  $E$ . Pero al tomar  $E$  como un valor constante en la aplicación del modelo este problema queda descartado. Entonces, si la dispersión numérica ( $E_{num}$ ) es nula, aparece una vez más el número de Courant  $U\Delta t/\Delta x = 1$ .

### **3.3 Casos de prueba.**

Para correr el modelo utilizamos los datos usados por (Yu & Singh, 1995) con el objetivo de poder validar el modelo en próximos trabajos.

*Porosidad* –  $\theta = 0.3$

*Permeabilidad* –  $k = 0.040$

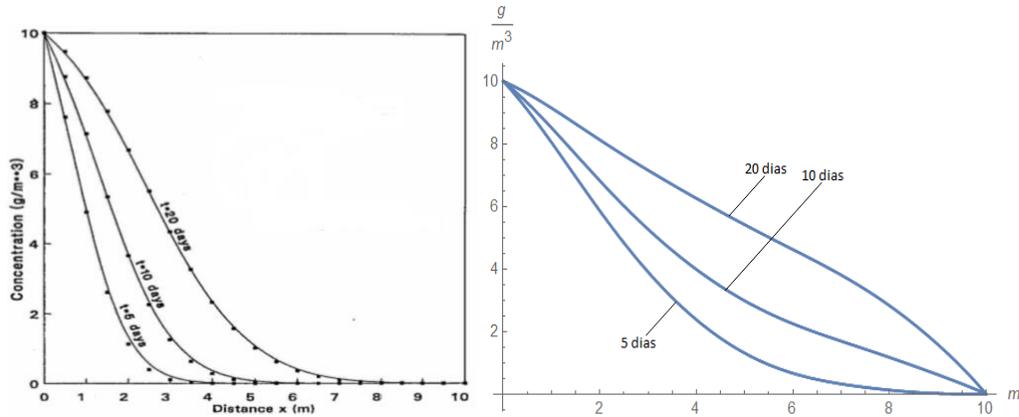
*Densidad* –  $\rho = 5.21 \text{ g/cm}^3$

*coeficiente de difusión* –  $\alpha = 3.2 \text{ m}$

*Longitud* –  $l = 10\text{m}$

*Concentración de Yu* –  $10\text{g/m}^3$

En las siguientes gráficas se muestra a la izquierda la solución de (Yu & Singh, 1995) y a la derecha la solución del modelo propuesto.



En estas gráficas podemos observar el comportamiento de ambos modelos, donde podemos concluir que ambos tienen un comportamiento exponencial decreciente, pero en el caso de la solución de Yu el flujo decrece con una mayor rapidez con respecto al modelo propuesto.

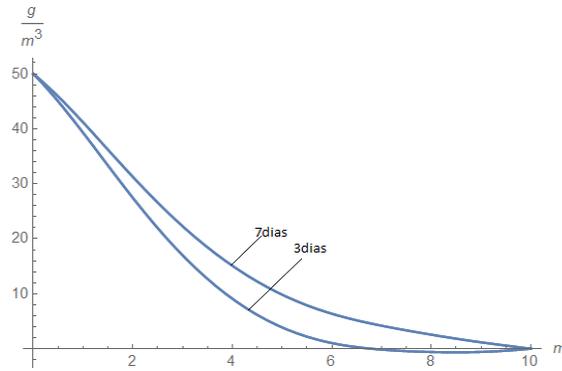
Para demostrar el alcance de la solución proponemos tres casos de estudios donde las concentraciones van a tomar los valores de 50, 100 y 1000  $g/m^3$ .

**3.3.1 Caso 1:** Concentración es de 50  $g/m^3$  con las condiciones de Yu para un tiempo de 7 días.

Para esta concentración los resultados fueron los siguientes.

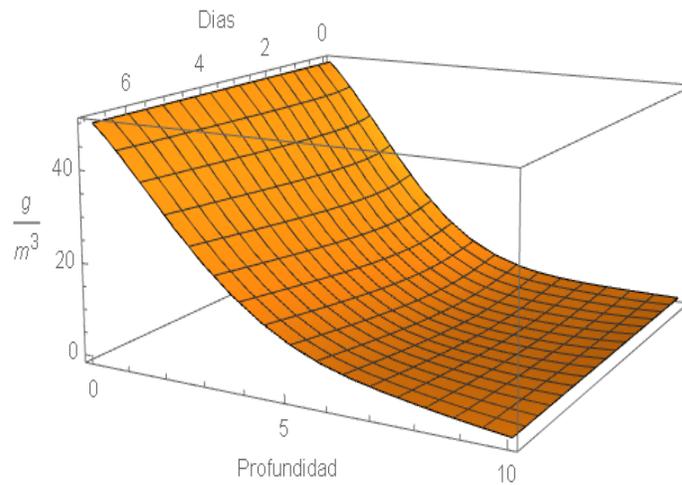
Tabla 2. Resultados numéricos del Caso 1

	t=0	t=1	t=2	t=3	t=4	t=5	t=6	t=7
z=0	50	50	50	50	50	50	50	50
z=1	0	39,68	38,84	39,95	39,29	39,73	40,53	40,69
z=2	0	26,59	26,78	27,45	28,30	29,26	30,26	31,25
z=3	0	15,98	16,16	16,99	18,15	19,47	20,86	22,27
z=4	0	8,20	8,27	9,10	10,35	11,84	10,45	15,10
z=5	0	3,31	3,22	3,88	5,04	6,50	8,13	9,83
z=6	0	0,85	0,60	1,03	1,98	3,28	4,77	6,37
z=7	0	0	0	0	0,53	1,57	2,82	4,19
z=8	0	0	0	0	0	0,55	1,52	2,56
z=9	0	0	0	0	0	0,056	0,58	1,17



Gráfica 1. Comportamiento en 1D de la solución del caso 1 para 3 y 7 días.

El gráfico nos muestra el comportamiento de la solución para las condiciones iniciales y de frontera propuestas con una concentración de  $50 \text{ g/m}^3$ , la cual resulta ser exponencial decreciente al igual que el comportamiento de la gráfica anterior



Gráfica 2. Comportamiento en 3D de la solución del caso 1 hasta 7 días.

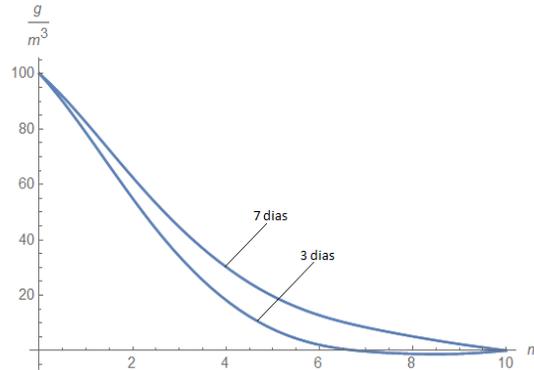
La figura anterior nos muestra un gráfico en 3D del comportamiento del flujo en el espacio-tiempo para las condiciones de frontera e inicial propuesta donde podemos observar que cumple con la condición inicial continua para todo  $t$ .

**3.3.2 Caso 2:** Concentración es de  $100 \text{ g/m}^3$  con las condiciones de Yu para un tiempo de 7 días.

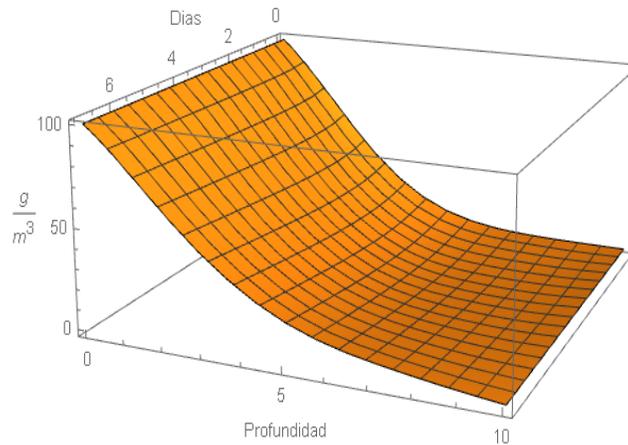
Tabla 3. Resultados numéricos del caso 2.

	t=0	t=1	t=2	t=3	t=4	t=5	t=6	t=7
z=0	100	100	100	100	100	100	100	100
z=1	0	77,68	77,91	78,59	79,46	80,41	81,38	82,36
z=2	0	53,19	53,57	54,89	56,61	58,53	60,52	62,51

z=3	0	31,96	32,32	33,99	36,30	38,95	41,73	44,55
z=4	0	16,40	16,55	18,20	20,71	23,69	26,90	30,20
z=5	0	6,62	6,44	7,76	10,08	13,01	16,27	19,67
z=6	0	1,70	1,21	2,07	3,97	6,56	9,54	7,74
z=7	0	0	0	0	1,07	3,14	5,65	8,38
z=8	0	0	0	0	0	1,19	3,05	5,12
z=9	0	0	0	0	0	0,11	1,16	2,34



Gráfica 3. Comportamiento en 1D de la solución del caso 2 para 3 y 7 días.



Gráfica 4. Comportamiento en 3D de la solución del caso 2 hasta 7 días.

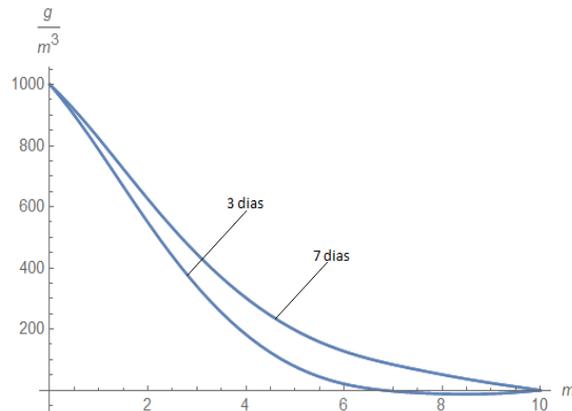
Estas gráficas tienen el mismo comportamiento que las del caso 1 con la diferencia que en este caso las concentraciones van a ser el doble que en el caso 1.

**3.3.3 Caso 3:** Concentración es de  $1000g/m^3$  con las condiciones de Yu para un tiempo de 7 días.

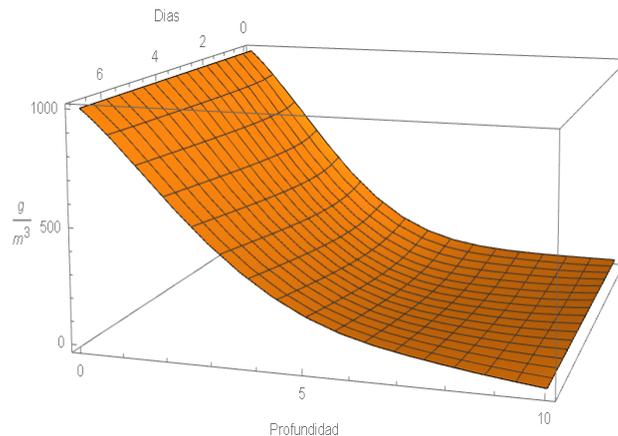
Tabla 4. Resultados numéricos del caso 3.

	t=0	t=1	t=2	t=3	t=4	t=5	t=6	t=7
z=0	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000	1000
z=1	0	776,8	779,1	785,9	794,6	804,1	813,8	823,6
z=2	0	531,9	535,7	548,9	566,1	585,3	605,2	625,1
z=3	0	319,6	323,2	339,9	363,0	389,5	417,3	445,5
z=4	0	164,0	165,5	182,0	207,1	236,9	269,0	302,0

$z=5$	0	66,2	64,4	77,6	100,8	130,1	162,7	196,7
$z=6$	0	17,0	12,1	20,7	39,7	65,6	95,4	77,4
$z=7$	0	0	0	0	10,7	31,4	56,5	83,8
$z=8$	0	0	0	0	0	11,9	30,5	51,2
$z=9$	0	0	0	0	0	1,13	11,60	23,4



Gráfica 5. Comportamiento en 1D de la solución del caso 3 para 3 y 7 días.



Gráfica 6. Comportamiento en 3D de la solución del caso 3 hasta 7 días.

Aquí podemos observar que comportamiento es el mismo que los casos anteriores, pero en este caso las concentraciones en los puntos de 0 a 10m es 10 veces mayor que en caso 2.

También se realizó un estudio variando el tiempo en un rango mayor de 7 días, un mes y 3 meses. Ver anexo 2.

### 3.4 Caso real Aplicado.

Con el objetivo de acercarnos un poco más a la realidad se realizó una búsqueda de la cantidad de nitrato que se encuentra en las cantidades de fertilizantes utilizados en la

agricultura. Según (INTAGRI., 2017) la composición de los fertilizantes que más se usan tiene una composición de 73.5 g/L a 107,45 g/L de nitrato.

Una vez conseguido los datos anteriores para un acuífero situado a 10 metros de profundidad pretendemos utilizar estos datos más otros parámetros obtenidos de (Ortiz Garces, 2016) para analizar un caso lo más cerca posible a la realidad. Para esto vamos a tomar las concentraciones antes descritas para tres tiempos distintos con incremento de 5 días.

Parámetros utilizados según (Ortiz Garces, 2016) para suelos cubanos.

*Porosidad* –  $\theta = 0,63$

*Permeabilidad* –  $k = 0,15$

*Densidad* –  $\rho = 1,072 \text{ g/cm}^3$

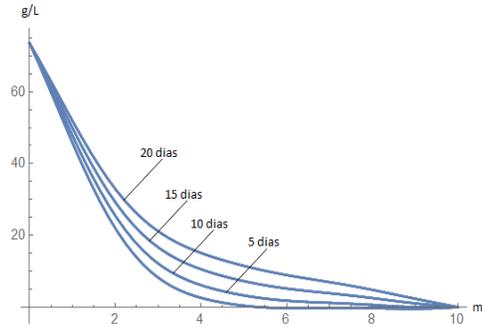
*coeficiente de difusion* –  $\alpha = 4 \text{ m}$

*Longitud* –  $l = 10\text{m}$

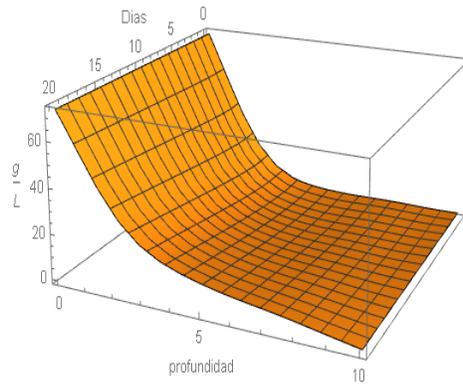
### 3.4.1 Caso real 1.

Tabla 5. Resultados numéricos del caso real 1.

	t=0	t=5	t=10	t=15	t=20
z=0	73,5	73,5	73,5	73,5	73,5
z=1	0	45,79	47,80	49,91	51,93
z=2	0	21,98	25,47	29,26	32,93
z=3	0	8,26	12,18	16,68	21,15
z=4	0	2,61	6,14	10,57	15,12
z=5	0	0,43	3,27	7,26	11,52
z=6	0	0	1,81	5,19	8,95
z=7	0	0	1,21	3,89	6,99
z=8	0	0	0,63	2,55	4,83
z=9	0	0	0.01	1,07	2,37



Gráfica 7. Comportamiento en 1D de la solución del caso real 1 para 5, 10, 15 y 20 días.



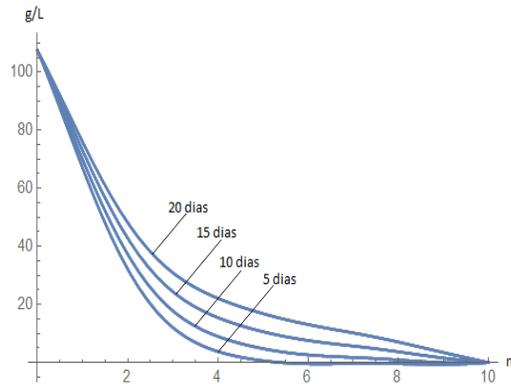
Gráfica 8. Comportamiento en 3D de la solución del caso real 1 hasta 20 días.

Los resultados nos muestra el comportamiento numérico del contaminante con respecto a la profundidad que como podemos apreciar a medida que aumenta la coordenada  $z$  disminuye la concentración, lo cual es contrario con el tiempo puesto que a medida que aumenta el tiempo la concentración aumenta en el mismo punto.

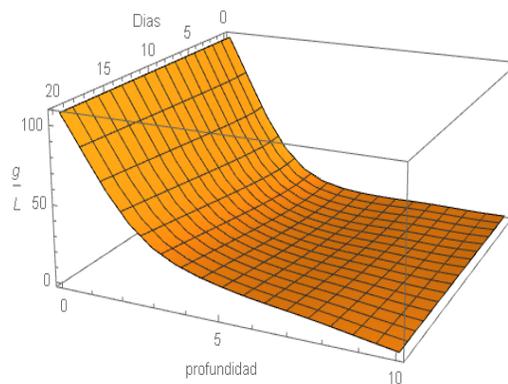
### 3.4.2 Caso real 2.

Tabla 6. Resultados numéricos del caso real 2.

	t=0	t=5	t=10	t=15	t=20
z=0	107,45	107,45	107,45	107,45	107,45
z=1		66,94	69,88	72,96	75,93
z=2	0	32,13	37,24	42,77	48,15
z=3	0	12,08	17,81	24,39	30,92
z=4	0	3,81	8,98	16,79	22,10
z=5	0	0,63	4,79	10,62	16,84
z=6	0	0	2,64	7,59	13,09
z=7	0	0	1,77	5,69	10,22
z=8	0	0	0,92	3,72	7,07
z=9	0	0	0,05	1,57	3,45



Gráfica 9. Comportamiento en 1D de la solución del caso real 2 para 5, 10, 15 y 20 días.



Gráfica 10. Comportamiento en 3D de la solución del caso real 2 hasta 20 días.

El comportamiento de del flujo contaminante es exponencial decreciente como pudimos apreciar en las gráficas anteriores. Para el caso real 1 después de 20 días se acumuló una cantidad de  $2,37 \text{ g/L}$  a una profundidad de 9 metros bajo la superficie. De igual forma para el caso real 2 en 20 días se acumuló  $3,45 \text{ g/L}$  a igual profundidad.

Como pudimos apreciar anteriormente las curvas de las gráficas tienen un carácter exponencial decreciente, esto nos da una medida de la validez de la solución la cual se muestra como en la realidad del fenómeno.

### 3.5 Influencia del nitrato sobre la actividad del anammox y la calidad del agua.

En el rango de concentraciones que hemos analizado se aprecia que no existe efecto inhibitorio para las bacterias anammox en el caso 1 mientras que para el segundo si se observa inhibición.

Según la norma cubana la concentración de nitratos máxima permisible para el agua potable es de 45 mg/L y según nuestro modelo para ambas concentraciones iniciales al cabo de 20 días a una profundidad de 9 metros la concentración de nitrato sería mucho mayor que la estipulada en la norma, y por consiguiente el acuífero no podría ser utilizado para consumo humano y animal.

### **3.6 Conclusiones parciales.**

En el anterior capítulo calculamos diferentes concentraciones a una distancia  $z$  de superficie terrestre para tres casos de prueba y dos casos reales en ambos analizamos el comportamiento de sus soluciones gráficas y numéricas. Además con los datos arrojados luego de evaluar el modelo se pudo analizar la actividad relativa del anammox como un indicador de su actividad primaria.

## CONCLUSIONES

Se realizó una exhaustiva revisión bibliográfica donde se pudo apreciar la variabilidad de los distintos modelos físico-matemáticos de transporte de soluto en acuíferos además se realizó un estudio de todos los parámetros físicos a tener en cuenta en el modelo preliminar; enfatizándose en la porosidad, permeabilidad y el coeficiente de difusión para medios porosos. Una vez estudiado todos estos parámetros se propuso un modelo preliminar físico-matemático de transporte de nitrato en medios porosos al manto freático; teniendo en cuenta que este es un contaminante común que aparece con frecuencia por el uso de fertilizantes químicos. Se utilizó el modelo para cuantificar la cantidad de nitrato que llega a un acuífero que se encuentra a una profundidad de 9 metros y se observó el comportamiento del mismo con respecto a la profundidad y al tiempo. Se evaluó el modelo de transporte para diferentes cargas en la superficie, observándose que a la profundidad analizada se producía inhibición para la carga de 107.4 g/L mientras que para 74.5 g/L no se aprecia este efecto inhibitorio.

## **RECOMENDACIONES**

- Validar el modelo
- Extender el modelo a 3 dimensiones.
- Incluir los procesos biológicos y químicos que permitan una descripción más real del problema tratado.
- Incluir en el modelo otras especies químicas así como reacciones químicas.
- Valorar la calidad del agua de los acuíferos a partir de los resultados de los modelos extendidos.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Bear, J. (1972). Dynamics of Fluids In Porous Media. *American Elsevier Publishing Company*, 1.
- Boran Kartal , M. M. (2006). Anammox bacteria disguised as denitrifiers nitrate reduction to dinitrogen gas via nitrite and ammonium *Environmental Microbiology*.
- Broda, E. (1977). Two kinds of lithotrophs missing in nature *Z. Allg. Mikrobiol.* 17 (pp. 491-493).
- Carvajal-Arroyo, J. M. (2013). Inhibition of anaerobic ammonium oxidizing enrichment culture by substrate , metabolites and common wastewater constituents.
- Castagnino, W., A. (1975). *Polución de agua y modelos de control* Serie Tecnica, C. Division de Salud Ambiental (Ed.) (pp. 244).
- Egli, K., Fanger, U., Alvarez, P. J. J., Siegrist, H., .Van der Meer, J. R., & .Zehnder, A. J. B. (2001). Enrichment and characterization of an anammox bacterium from a rotating biological contactor treating ammonium-rich leachate. *Archives of Microbiology*, 175, 198-207.
- Fried, J. J. (1975). Dispersion in porous media, in *Advances in Hydroscience*,. 1.
- Fuentes, Y. J. L. (2002). *Aguas Subterráneas*.
- INTAGRI. (2017). Guía de Fertilizantes Nitrogenados para Cultivos. *Nutrición Vegetal*, 106, 8.
- Jetten, M. S. M., , S., M., , V. d. P.-S., K.T., , S., J., , V. D., L.,, Van de Graaf, A. A., . . . Kuenen, J. G. (1999). The anaerobic oxidation of ammonia. *FEMS Microbiol. Reviews*, 5, 421-437.
- Jimenez Jaramillo, M. A. (2008). *MUTC-un modelo de transporte en ríos: Aplicación al río Sinú*. (Magíster en Ingeniería -Recursos Hidráulicos), Universidad Nacional de Colombia, Colombia.
- Kohn, J., Kruse, E. E., & Santo, J. E. (2000). Modelacion geofisica aplicada al transporte de nitrato en aguas subterráneas.
- Kref, A., & A, Z. (1986). *Water Resources*.
- Lopez Castillo , H. (2008). Desarrollo del proceso anammox para el tratamiento de Lixivados, Puesta en marcha y aplicacion.
- Martín - Monerris, M., & Marzal - Doménech, P. (2010). *Modelación de la calidad del agua*. España: Universidad politécnica de Valencia.
- Mulder, A., Van de Graaf, A., Robertson, L.A. and Kuenen, J.G. . (1995). Anaerobic ammonium oxidation discovered in a denitrifying fluidized bed reactor. *FEMS Microbiol. Ecol.* 16, 177-184.
- Ortiz Garces, C. (2016). La medición del impacto de la agroecología. *Leisa*, 32(3).
- Palmer, M., D. (2001). *Water quality modeling: a guide to effective practice* T. W. Bank (Ed.) (pp. 178).
- PARKER, J. C., VAN GENUCHTEN, M,TH. (1986). Boundary Conditions for Displacement Experiments through Short Laboratory Soiln Columns.
- Rodriguez , I. F. (2010). Towards the improvement of start-up operations of anammox reactors. *Dialnet*.
- Sanchez San Ramon, J. (2009). Lay de Darcy. Flujo en medios porosos.

- Sobrino Serran, A. (2007). Importancia Ambiental del Proceso Anammox.
- Strous, M., Heijnen, J. J., Kuenen, J. G., & Jetten, M. S. M. (1998). The sequencing batch reactor as a powerful tool for the study of slowly growing anaerobic ammonium-oxidizing microorganisms. *Appl. Microbiol. Biotech.*
- Strous, M., Kuenen, J. G., & Jetten, M. S. M. (1999). Key Physiology of Anaerobic Ammonium Oxidation. *Environ. Microbiol.*, 7.
- Tijonov, A. N., & Samarsky, A. A. (Eds.). (1972). *Equations of Mathematical Physics*. Moscú: MIR.
- Van de Graaf, A. A., M., A., De Bruijn, P., J., M.S.M., R., L.A., & Kuenen, J. G. (1995). Anaerobic oxidation of ammonium is a biologically mediated process. *Appl Environ Microbiol.*, 61, 1246-1251.
- Vedat, B. (2006). *APPLIED FLOW and SOLUTE TRANSPORT MODELING in AQUIFERS*.
- Yu, F. X., & Singh, V. P. (1995). Improved finite element method for solute transport. *J. of Hydraulic Engineering*, 121(2).
- Zhen - Gang, J. (2008). *Hydrodynamics and water quality: modeling rivers, lakes and estuaries*. New Jersey, Estados Unidos: John Wiley & Sons, Inc.
- Rodríguez, R Gestión y tratamiento de aguas subterráneas Editorial de la Universidad Tecnológica Nacional – U.T.N. – Argentina, Maestría en ingeniería Ambiental Edutec Año 2008.