

**MODELO TERMODINÁMICO PARA ANALIZAR PROCESOS DE
BIORREMEDIACIÓN EN UN ECOSISTEMA ACUÁTICO CONSTRUIDO CASO
LAGUNA FACULTATIVA PARA DEPURACIÓN DE AGUAS RESIDUALES
MUNICIPALES**

**Por
ANDRES MAURICIO ZAPATA RIVERA**

**UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE INGENIERÍA
ESCUELA DE INGENIERÍA DE RECURSOS NATURALES Y DEL AMBIENTE
EIDENAR
PROGRAMA DE POSGRADO EN INGENIERÍA
ÉNFASIS SANITARIA Y AMBIENTAL
SANTIAGO DE CALI
2017**

**MODELO TERMODINÁMICO PARA ANALIZAR PROCESOS DE
BIORREMEDIACIÓN EN UN ECOSISTEMA ACUÁTICO CONSTRUIDO CASO
LAGUNA FACULTATIVA PARA DEPURACIÓN DE AGUAS RESIDUALES
MUNICIPALES**

Por

ANDRES MAURICIO ZAPATA RIVERA

Candidato a Ph.D

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ingeniería énfasis
Ingeniería Sanitaria y Ambiental

Director

Profesor Miguel Ricardo Peña M.Sc., Ph.D.

**UNIVERSIDAD DEL VALLE
FACULTAD DE INGENIERÍA
ESCUELA DE INGENIERÍA DE RECURSOS NATURALES Y DEL AMBIENTE
EIDENAR
PROGRAMA DE POSGRADO EN INGENIERÍA
ÉNFASIS SANITARIA Y AMBIENTAL
SANTIAGO DE CALI
2017**

Notas de aceptación

Firma presidente del jurado

Firma jurado 1

Firma jurado 2

Santiago de Cali, diciembre de 2017

DEDICATORIA

A Dios y mi familia, especialmente a Mathías

AGRADECIMIENTOS

A la Universidad del Valle y Colciencias y su programa de crédito-beca condonable administrado por Colfuturo, por su apoyo económico y financiero los cuales han sido valiosos para mi formación académica y profesional.

Al profesor Miguel Peña por su participación durante mi proceso de formación doctoral.

Al profesor Joel Ducoste de la Universidad Estatal de Carolina del Norte y la profesora Margarita Portapila y su equipo de trabajo de la Universidad Nacional de Rosario-Argentina por sus valiosos aportes, tiempo y apoyo para desarrollar mis pasantías en tan prestigiosas universidades.

A los profesores Janeth Sanabria, Luis Fernando Marmolejo y Martha Páez por sus consejos en momentos decisivos.

Al personal administrativo del posgrado en ingeniería sanitaria y ambiental.

Al personal de la Estación de Investigación de Ginebra-Valle, por facilitar las condiciones para la ejecución de esta investigación. Así mismo, un agradecimiento especial a Gimer Vélez quien con su experiencia y arduo trabajo fue un valioso apoyo durante el trabajo de campo realizado.

A los compañeros del instituto Cinara por su apoyo, amistad y colaboración, especialmente al grupo de trabajo de la Estación de Investigación de Puerto Mallarino.

Finalmente, un sincero agradecimiento a mis amigos por su apoyo incondicional y por sus valiosos aportes en momentos cruciales de mi proceso de formación académica y profesional.

LISTAS ESPECIALES

Lista de tablas

TABLA 1. FUNCIÓN DE LAS ALGAS EN LAS LAGUNAS FACULTATIVAS	25
TABLA 2. CONTRIBUCIÓN DE LOS MODELOS CFD APLICADOS A LAGUNAS FACULTATIVAS	35
TABLA 3. TIPOS DE MODELOS ECOLÓGICOS, VENTAJAS Y DESVENTAJAS DE CADA UNO	39
TABLA 4. CARACTERÍSTICAS DE DISEÑO	43
TABLA 5. VARIABLES METEOROLÓGICAS MEDIDAS	44
TABLA 6. VARIABLES FÍSICO-QUÍMICAS MUESTREADAS.....	45
TABLA 7. NÚMERO MÍNIMO DE MUESTRAS	47
TABLA 8. CANTIDAD Y CALIDAD DE LOS ELEMENTOS POR EL MÉTODO DEL DETERMINANTE 3x3x3.....	54
TABLA 9. VALORES DE LAS CONDICIONES DE FRONTERA EMPLEADAS.....	55
TABLA 10. CARACTERÍSTICAS DEL MODELO PARA EL TRANSPORTE DEL BDE 99.....	65
TABLA 11. NORMALIDAD DE LAS VARIABLES EN CADA PUNTO.....	72
TABLA 12. EVALUACIÓN DEL NÚMERO OTU'S	81
TABLA 13. INDICES DE DIVERSIDAD Y RIQUEZA	82
TABLA 14. DATOS DE LOS ESTUDIOS DE TRAZADORES 1 Y 2.....	85
TABLA 15. PARÁMETROS DE LOS ESTUDIOS DE TRAZADORES 1 Y 2.....	86
TABLA 16. VALORES SIMULADOS PARA LA VELOCIDAD Y CONCENTRACIÓN DE SÓLIDOS SUSPENDIDOS EN EL EFLUENTE DEL ECOSISTEMA PARA CADA MALLA EVALUADA EN EL MODELO CFD	88
TABLA 17. CRITERIO DE CONVERGENCIA DE LOS RESIDUALES ALCANZADO CON LOS MODELOS	90
TABLA 18. VALORES DE LA CONCENTRACIÓN DE SÓLIDOS SUSPENDIDOS EN EL EFLUENTE PARA ESCALAR, UDF Y EXPERIMENTAL.....	97
TABLA 19. COMPARACIÓN DE LAS CONCENTRACIONES EXPERIMENTALES CON LAS SIMULADAS OBTENIDAS CON EL ESCALAR.....	98
TABLA 20. COMPARACIÓN DE CONCENTRACIONES EXPERIMENTALES CON LAS SIMULADAS OBTENIDAS CON LA UDF.....	99
TABLA 21. COMPARACIÓN DE LOS PARÁMETROS OBTENIDOS CON LOS MODELOS CFD Y LOS ESTUDIOS DE TRAZADORES 1 Y 2.....	105
TABLA 22. COMPARACIÓN DATOS EXPERIMENTALES Y SIMULADOS DE TEMPERATURA EN EL PUNTO P2. GEOMEMBRANA Y SUELO SIN VIENTO.	107
TABLA 23. DELTAS DE TEMPERATURA SUPERFICIE-FONDO EN LAGUNAS FACULTATIVAS.....	110
TABLA 24. DELTAS DE TEMPERATURA DEL AFLUENTE EN PERIODOS DE 24 HORAS	113
TABLA 25. RELACIÓN ENTRE CONCENTRACIÓN SÓLIDOS SUSPENDIDOS Y RADIACIÓN INCIDENTE	117
TABLA 26. COMPARACIÓN DATOS EXPERIMENTALES Y SIMULADOS DE TEMPERATURA EN EL PUNTO L/2. GEOMEMBRANA Y GEOMEMBRANA CON VIENTO.	119
TABLA 27. DELTAS DE TEMPERATURA SUPERFICIE-FONDO EN LAGUNAS FACULTATIVAS.....	122

TABLA 28. CONCENTRACIÓN DE COMPUESTOS ORGÁNICOS EN LA LAGUNA.....	124
TABLA 29. RESULTADOS EXPERIMENTALES Y SIMULADOS PARA LA CONCENTRACIÓN DE BDE 99.....	125
TABLA 30. CRITERIO DE INFORMACIÓN AIC PARA FACTORES ALEATORIOS	129
TABLA 31. CRITERIO DE INFORMACIÓN AIC PARA FACTORES FIJOS.....	130
TABLA 32. PARTICIÓN DE LA VARIANZA ENTRE EFECTOS ALEATORIOS Y FIJOS.....	137
TABLA 33. PORCENTAJES DE ERROR ENTRE VARIABLES SIMULADAS EN STELLA Y EXPERIMENTALES	139
TABLA 34. CALOR DE REACCIÓN	142
TABLA 35. ESTADÍSTICOS DESCRIPTIVOS BASE DE DATOS PUNTO L/3. P = 0,2 Y 0,5M.....	170
TABLA 36. ESTADÍSTICOS DESCRIPTIVOS BASE DE DATOS PUNTO L/2. P = 0,2, 0,5 Y 1,4M.....	171
TABLA 37. ESTADÍSTICOS DESCRIPTIVOS BASE DE DATOS PUNTO 2L/3, P = 0,2 Y 0,50M.....	172
TABLA 38. PRUEBAS U-MANN_ Y_WHITNEY Y TEST DE LEVENE PARA DETERMINAR DIFERENCIAS SIGNIFICATIVAS EN LAS PROFUNDIDADES (0,2 Y 0,5M) DEL PUNTO L/3.....	173
TABLA 39. PRUEBA KRUSKAL WALLIS PARA DETERMINAR DIFERENCIAS SIGNIFICATIVAS EN LAS PROFUNDIDADES (0,2, 0,5 Y 1,4M) DEL PUNTO L/2	174
TABLA 40. PRUEBAS U-MANN_ Y_WHITNEY Y TEST DE LEVENE PARA DETERMINAR DIFERENCIAS SIGNIFICATIVAS EN LAS PROFUNDIDADES (0,2 Y 0,5M) DEL PUNTO 2L/3.....	174
TABLA 41. PRUEBAS U-MANN_ Y_WHITNEY Y TEST DE LEVENE PARA DETERMINAR DIFERENCIAS SIGNIFICATIVAS EN LA PROFUNDIDAD 0,2M PUNTOS L/3 Y 2L/3, (LONGITUDINAL).....	175
TABLA 42. PRUEBAS U-MANN_ Y_WHITNEY Y TEST DE LEVENE PARA DETERMINAR DIFERENCIAS SIGNIFICATIVAS EN LA PROFUNDIDAD 0,5M PUNTOS L/3 Y 2L/3, (LONGITUDINAL).....	176
TABLA 43. ESTUDIO DE TRAZADORES 1	177
TABLA 44. ESTUDIO DE TRAZADORES 2	179
TABLA 45. PARÁMETROS MODELO LINEAL MIXTO OXÍGENO DISUELTO	183
TABLA 46. PARÁMETROS MODELO LINEAL MIXTO PH.....	184
TABLA 47. PARÁMETROS MODELO LINEAL MIXTO TEMPERATURA.....	185
TABLA 48. PARÁMETROS MODELO LINEAL MIXTO CLOROFILA	185
TABLA 49. PARÁMETROS MODELO LINEAL MIXTO NITRÓGENO TOTAL	186
TABLA 50. PARÁMETROS MODELO LINEAL MIXTO NITRÓGENO AMONICAL	187
TABLA 51. PARÁMETROS MODELO LINEAL MIXTO NITROGENO ORGÁNICO.....	188

Lista de figuras

FIGURA 1. LOCALIZACIÓN DEL ECOSISTEMA ACUÁTICO CONSTRUIDO TIPO LAGUNA FACULTATIVA	42
FIGURA 2. PUNTOS DE MUESTREO	45
FIGURA 3. TOMA DE MUESTRAS MICROBIOLÓGICAS	48
FIGURA 4. VISTA 3D DE LA GEOMETRÍA DEL ECOSISTEMA ACUÁTICO	52
FIGURA 5. VISTA 3D DE LAS MALLAS Y CRITERIOS DE CALIDAD, IZQUIERDA 16452, DERECHA 161890.....	53
FIGURA 6. MODELO CONCEPTUAL PARA EL NITRÓGENO. FUENTE: WARAKOMSKI, A., KEMPEN AND KOS, (2007)	67
FIGURA 7. MODELO CONCEPTUAL PARA EL CARBONO. FUENTE: KIRK, (2007)	69
FIGURA 8. DISTRIBUCIÓN DEL TIEMPO DE RESIDENCIA. ESTUDIOS DE TRAZADORES 1 Y 2	85
FIGURA 9. COMPORTAMIENTO DE LOS RESIDUALES OBTENIDOS CON LOS MODELOS REALIZABLE, ESTÁNDAR Y RNG RESPECTIVAMENTE.	90
FIGURA 10. MODELOS USADOS PARA LAS FUERZAS DE ARRASTRE Y DESLIZAMIENTO	93
FIGURA 11. MAGNITUDES DE VELOCIDADES Y LINEAS DE CORRIENTE OBTENIDAS CON FLUENT PARA LOS MODELOS MONOFÁSICO (A) Y BIFÁSICO (B)	94
FIGURA 12. SECUENCIA DE TIEMPO PARA LAS SIMULACIONES DEL MODELO BIFÁSICO. (A) DOS HORAS, (B) SEIS HORAS, (C) 2 DÍAS, (D) 5 DÍAS.	96
FIGURA 13. DISTRIBUCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE SÓLIDOS SUSPENDIDOS EN EL CUERPO DE AGUA DE LA LAGUNA, (A) VISTA FRONTAL (B) VISTA LONGITUDINAL.	98
FIGURA 14. CURVAS DE CONCENTRACIÓN DE TRAZADOR OBTENIDAS EXPERIMENTALMENTE Y GENERADAS CON LOS MODELOS CFD (MONOFÁSICO Y BIFÁSICO).	100
FIGURA 15. INYECCIÓN DE TRAZADOR EN EL MODELO CFD. (A) SALIDA DE MÁXIMA CONCENTRACIÓN Y DISTRIBUCIÓN DEL TRAZADOR EN EL VOLUMEN DE AGUA PARA EL MODELO MONOFÁSICO, (B) SALIDA DE MÁXIMA CONCENTRACIÓN Y DISTRIBUCIÓN DEL TRAZADOR EN EL VOLUMEN DE AGUA PARA EL MODELO BIFÁSICO.	101
FIGURA 16. REPRESENTACIÓN DE LAS FUERZAS DE ARRASTRE QUE ACTÚAN SOBRE UNA PARTÍCULA ESFÉRICA	104
FIGURA 17. PERFILES DE TEMPERATURA TRANSVERSAL Y LONGITUDINAL PARA LA GEOMEMBRANA.	108
FIGURA 18. VARIACIONES EN LA TEMPERATURA DEL AIRE Y EL VOLUMEN DE AGUA.....	115
FIGURA 19. FLUX DE CALOR (PÉRDIDAS) A TRAVÉS DE LAS PAREDES LATERALES, (A) GEOMEMBRANA, (B) SUELO.	116
FIGURA 20. PERFILES DE PENETRACIÓN DE RADIACIÓN SOLAR INCIDENTE. (A) SUPERFICIE, (B) 0.05 M, (C) 0.45 M, (D) 1.47 M (FONDO)	118
FIGURA 21. PERFILES DE CONCENTRACIÓN DEL RETARDANTE DE LLAMA BDE 99	126
FIGURA 23. VALORES EXPERIMENTALES VS. VALORES PREDICHOS. MODELO LINEAL OD	131
FIGURA 24. VALORES EXPERIMENTALES VS. VALORES PREDICHOS. MODELO LINEAL PH	132
FIGURA 25. VALORES EXPERIMENTALES VS. VALORES PREDICHOS.....	132

FIGURA 26. VALORES EXPERIMENTALES VS. VALORES PREDICHOS. MODELO LINEAL CLOROFILA	133
FIGURA 27. VALORES EXPERIMENTALES VS. VALORES PREDICHOS. MODELO LINEAL NITRÓGENO TOTAL .	134
FIGURA 28. VALORES EXPERIMENTALES VS VALORES PREDICHOS. MODELO LINEAL NITRÓGENO AMONIAL	
.....	135
FIGURA 29. VALORES EXPERIMENTALES VS VALORES PREDICHOS. MODELO LINEAL NITRÓGENO ORGÁNICO.	
.....	136
FIGURA 30. MODELO CONCEPTUAL EN STELLA BY ISEE SYSTEM, INC. ®	138
FIGURA 31. DIAGRAMA DE CAJAS PARA CLOROFILA, DATOS SIM Y EXP A 0.05, 0.45 Y 1.47M.....	140
FIGURA 32. DIAGRAMA DE CAJAS PARA NITRÓGENO AMONIAL SIMULADO (SIM.) Y EXPERIMENTAL (EXP.) A	
0.05, 0.45 Y 1.47M.....	140
FIGURA 33. DIAGRAMA DE CAJAS PARA NITRÓGENO ORGÁNICO SIMULADO (SIM.) Y EXPERIMENTAL (EXP.) A	
0.05, 0.45 Y 1.47M.....	141
FIGURA 34. MONITOR DEL TIPO “AREA-WEIGHTED AVERAGED CONCENTRATION” PARA LA UDF.....	183

Lista de ecuaciones

ECUACIÓN 1. CÁLCULO DEL NÚMERO MINIMO DE MUESTRAS	46
ECUACIÓN 2. RELACIÓN ENTRE K E I	57
ECUACIÓN 3. INTENSIDAD DE TURBULENCIA	57
ECUACIÓN 4. TASA DE DISIPACIÓN DE ENERGÍA.....	57
ECUACIÓN 5. CONTINUIDAD.....	59
ECUACIÓN 6. MOMENTO.....	60
ECUACIÓN 7. TENSOR DEL FLUIDO	60
ECUACIÓN 8. K	60
ECUACIÓN 9. ε	61
ECUACIÓN 10. ENERGÍA.....	61
ECUACIÓN 11. ENTALPIA PARA FLUJO INCOMPRESIBLE	62
ECUACIÓN12. RTE.....	63
ECUACIÓN 13. CINÉTICA DE TRANSPORTE EN SEDIMENTOS.....	64
ECUACIÓN 14. EXPRESIÓN DE BALANCE DE MATERIA.....	66
ECUACIÓN 15. ESTEQUIOMETRIA DE LA AMONIFICACIÓN	68
ECUACIÓN 16. ESTEQUIOMETRIA DE LA NITRIFICACIÓN	68
ECUACIÓN 17. ESTEQUIOMETRIA PARA FOTOSÍNTESIS	69
ECUACIÓN 18. ESTRUCTURA DEL MODELO LINEAL MIXTO	71
ECUACIÓN 19. CORRELACIÓN DE YÁNEZ, (1993).....	114
ECUACIÓN 20. ESTRUCTURA DEL MODELO LINEAL MIXTO	128
ECUACIÓN 21. MODELO LINEAL MIXTO PARA OD	131
ECUACIÓN 22. MODELO LINEAL MIXTO PARA PH.....	131
ECUACIÓN 23. MODELO LINEAL MIXTO TEMPERATURA DEL VOLUMEN DE AGUA	132
ECUACIÓN 24. MODELO LINEAL PARA CLOROFILA-A.....	133
ECUACIÓN 25. MODELO LINEAL MIXTO NITRÓGENO TOTAL.....	134
ECUACIÓN 26. MODELO LINEAL MIXTO NITRÓGENO AMONIAAL	134
ECUACIÓN 27. MODELO LINEAL MIXTO NITRÓGENO ORGÁNICO	135

TABLA DE CONTENIDO

1. RESUMEN	16
2. INTRODUCCION	20
3. REVISIÓN DE LITERATURA	23
3.1. Sistemas lagunares para el tratamiento de aguas residuales	23
3.1.1 Biorremediación de aguas residuales.....	23
3.1.2 Ecología de lagunas facultativas	24
3.1.3 Procesos de biorremediación de nitrógeno en lagunas facultativas	28
3.1.4 Procesos de biorremediación de carbono en lagunas facultativas	29
3.2. Contaminantes emergentes en lagunas facultativas	30
3.3. Modelos de lagunas facultativas	32
3.3.1 Modelos usando dinámica de fluidos computacional	32
3.3.2 Dinámica de Fluidos computacional aplicada a la modelación de lagunas facultativas	32
3.4. Modelos ecológicos	36
4. OBJETIVOS	41
4.1. General	41
4.2. Específicos.....	41
5. MATERIALES Y METODOS.....	42
5.1. Localización del ecosistema acuático construido	42
5.2. Variables meteorológicas de interés.....	43
5.3. Variables Físico-químicas.....	44
5.4. Número mínimo de muestras	46
5.5. Variables microbiológicas	47
5.5.1 Composición, Estructura y diversidad de las comunidades microbianas	47
5.5.2 Análisis dependientes de cultivo: técnica de recuento en placa en medios de cultivo selectivo	48

5.5.3 Análisis independientes de cultivo: técnica de electroforesis horizontal en geles de agarosa: DGGE	49
5.6. Análisis estadístico de las bases de datos.....	50
5.7. Descripción de los estudios	50
5.7.1 Estudios de trazadores.....	50
5.7.2 Datos experimentales de temperatura.....	51
5.8. Características del modelo CFD	51
5.8.1 Dominio del modelo (geometría)	52
5.8.2 Descripción de la malla	53
5.8.1 Pruebas de independencia de malla para el modelo CFD	54
5.8.2 Condiciones de frontera	55
5.8.3 Propiedades de los materiales	57
5.8.4 Ecuaciones gobernantes.....	59
5.8.4.1 Ecuación de continuidad.....	59
5.8.4.2 Ecuación de momento	59
5.8.4.3 Modelo de turbulencia	60
5.8.4.4 Ecuación de la conservación de la energía.....	61
5.8.4.5 Modelo de radiación	63
5.9. Escenario de transporte del retardante de llama 2,2',4,4',5 – Pentabromodifenil éter (BDE 99). CASRN 60348-60-9	64
5.9.1 Propiedades del Retardante de llama BDE 99	65
5.9.2 Cuantificación del retardante de llama BDE 99	65
5.10. Modelo ecológico	66
5.10.1 Ciclo del nitrógeno	67
5.10.1.1 Amonificación	68
5.10.1.2 Nitrificación	68
5.10.2 Ciclo del carbono	69
5.10.2.1 Fotosíntesis y respiración	69
5.11. Correlaciones entre variables: modelos lineales mixtos generalizados	70
5.11.1 Validación	71

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	72
6.1. Resultados estadísticos de la base de datos	72
6.1.1 Variables físicas y variable bioquímica: pH, temperatura, OD, ORP y Clor-a.....	73
6.1.2 Variables químicas: DQO total, DBO total, SST, NO_3^- , NTK, NH_4^+ , Alcalinidad	77
6.2. Variables microbiológicas	79
6.2.1 Densidad de grupos tróficos vinculados a la dinámica de transformación de amonio.	79
6.2.2 Composición, abundancia y diversidad de comunidades microbianas en el perfil transversal de la columna de agua del ecosistema.	80
6.3. Resultados del modelo CFD	84
6.3.1 Estudio de trazadores y validación del campo hidrodinámico.....	84
6.3.2 Prueba de independencia de malla	87
6.3.3 Modelo CFD monofásico Vs modelo CFD bifásico	88
6.3.4 Ensayos de trazadores: modelos CFD Vs ensayos experimentales	99
6.3.5 Acople de la ecuación de energía y ecuaciones de transferencia de energía por radiación	106
6.3.5.1 Patrones de temperatura	106
6.3.5.2 Transferencia de calor hacia el suelo circundante	113
6.3.5.3 Perfiles de penetración de radiación solar	116
6.3.5.4 condición de viento en la superficie	118
6.3.5.5 Determinación experimental del retardante de llama BDE 99	122
6.3.5.6 Escenario CFD para transporte del Retardante de llama BDE 99.....	124
6.4. Modelo ecológico	127
6.4.1 Modelos lineales mixtos	128
6.4.1.1 Modelo lineal mixto para el oxígeno disuelto (OD)	130
6.4.1.2 Modelo lineal mixto para el pH.....	131
6.4.1.3 Modelo lineal mixto para la temperatura del agua.....	132
6.4.1.4 Modelo lineal mixto para la clorofila (fotosíntesis)	133
6.4.1.5 Modelo lineal mixto para el nitrógeno total	133

6.4.1.6 Modelo lineal mixto para el nitrógeno amoniacal (Nitrificación)	134
6.4.1.7 Modelo lineal mixto para el nitrógeno orgánico (Amonificación)....	135
6.4.2 Modelos lineales mixtos implementados en Stella.....	137
6.4.2.1 Modelo conceptual.....	137
7. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	143
7.1. Conclusiones	143
7.2. Recomendaciones para futuras investigaciones	146
8. REFERENCIAS	148
9. ANEXOS.....	170
9.1. Anexo 1. Estadísticos descriptivos de la base de datos, puntos L/3, L/2 y 2L/3.	170
9.2. Anexo 2. Estadísticos comparativos	173
9.3. Anexo 3. Ensayos de trazadores	177
9.4. Anexo 4. User Define Function (UDF) construida para la variación temporal de la concentración de sólidos en el afluente	181
9.5. Anexo 5. Parámetros de los modelos lineales mixtos	183

GLOSARIO

AIC	Criterio de información de Akaike
AR	Agua residual
CFD	Dinámica de fluidos computacional
DGGE	Electroforesis en gel con gradiente de desnaturalización
DPM	Modelo de fase discreta
GLIMMIX	Modelo lineal mixto generalizado
Índice de Shannon	Índice usado en ecología para medir la biodiversidad específica
Índice de Simpson	Índice de diversidad de Simpson, parámetro que permite medir la riqueza de organismos
LFs	Lagunas facultativas
Número de OTU's	Unidades taxonómicas operacionales
PAR	Radiación fotosintéticamente activa
PBDEs	Polibromodifenil éteres
PCBs	Bifenilos policlorados
PCR	Reacción en cadena de la polimerasa
RTD	Distribución del tiempo de residencia
RTE	Ecuaciones de transferencia de radiación
RWT	Rodamina WT
UDF	Función definida por el usuario

1. RESUMEN

Las lagunas facultativas son ecosistemas acuáticos contruidos con el propósito de descontaminar aguas residuales. Estas, son sistemas de tratamiento de bajo costo, fácil operación y mantenimiento por lo que son ampliamente utilizadas en países en desarrollo, especialmente aquellos ubicados en zonas tropicales donde hay disponibilidad de radiación solar en cualquier época del año. Su diseño debe favorecer el desarrollo de una amplia variedad de microorganismos y procesos físicos, químicos y biológicos que al interrelacionarse favorecen la depuración de las aguas contaminadas. Esto, ha cautivado la atención de los investigadores quienes han buscado entender cómo se desarrollan los procesos de biorremediación en este tipo de ecosistemas. Para ello, se han desarrollado herramientas como los modelos computacionales, especialmente aquellos que involucran técnicas de dinámica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en ingles). Los modelos CFD han sido una de las herramientas más utilizadas en los últimos 20 años y han permitido representar fenómenos como la hidrodinámica de la laguna y la transformación de algunas especies químicas asociadas a los ciclos del carbono y nitrógeno. Recientemente, se han comenzado a acoplar modelos CFD y ecológicos con el objetivo de obtener una mejor representación de este tipo de ecosistemas. Por lo anterior, en esta investigación, se construyeron dos modelos CFD en 3 dimensiones de una laguna facultativa secundaria, usada para descontaminar las aguas residuales del municipio de Ginebra-Valle del Cauca-Colombia. Los modelos se desarrollaron usando el software ANSYS Inc. Fluent® (V.16.1) en una estación de trabajo Dell Precision TX3500. Se empleó el método de volúmenes finitos dividiendo el dominio computacional en 161890 elementos hexagonales, usando el software Ansys Inc® ICEM CFD™ meshing software (V.16.0). Uno de los modelos CFD fue un modelo monofásico, el cual incluyó agua como fluido. El otro modelo, fue un modelo bifásico que incluyó además del agua los sólidos suspendidos del afluente. El campo hidrodinámico de ambos modelos fue validado con dos estudios experimentales de trazadores utilizando el trazador Rodamina WT (RWT). Con el modelo bifásico se simuló el fenómeno de transporte

de sólidos en la laguna, la penetración de la radiación solar incidente en el cuerpo de agua, el efecto del viento en la superficie, la transferencia de calor a través de las paredes circundantes, los perfiles de temperatura transversal y longitudinal y el transporte de un contaminante orgánico persistente. Este contaminante correspondió al retardante de llama BDE 99 el cual se seleccionó porque se identificó su presencia en el afluente de la laguna. El fenómeno de transporte de sólidos se validó con datos experimentales de la concentración de sólidos suspendidos. Los fenómenos de transferencia de energía con datos experimentales de temperatura y el transporte del retardante de llama con datos experimentales de la concentración del BDE 99. Estos últimos fueron medidos en el laboratorio del Grupo de Investigación en Contaminación Ambiental por Metales y Plaguicidas (GICAMP) de la Universidad del Valle.

Como complemento a los modelos CFD se construyó un módulo ecológico para representar el calor de reacción de los procesos de biorremediación de amonificación, nitrificación, fotosíntesis y respiración. Para ello, las correlaciones entre variables ecológicas se construyeron utilizando un artificio estadístico conocido como modelos lineales mixtos generalizados. Estos, fueron implementados en el software Stella® by Isee System. Los modelos lineales mixtos generalizados se construyeron siguiendo una estrategia que describe la relación entre una variable respuesta y una o varias variables explicativas. Con estos modelos y gracias a la incorporación de factores fijos y aleatorios se intentó dar cuenta de la complejidad del ecosistema estudiado, haciéndola más próxima a la realidad. En este caso, para el modelo ecológico se seleccionaron dos factores aleatorios: los puntos P1, P2 y P3 y sus respectivas profundidades en las cuales fueron tomadas las muestras. Estos dos factores se seleccionaron porque cada punto con sus respectivas profundidades jerarquizan los datos permitiendo su agrupación en niveles. Entre los factores fijos además de las variables físico-químicas se incluyó la hora del día en la que se hizo cada medición. Estas últimas se agruparon en 3 franjas (mañana, tarde y noche) de acuerdo a la radiación solar incidente en cada una.

Con el módulo ecológico, se analizó la correlación entre la radiación solar, el pH, el oxígeno disuelto y la temperatura ambiente y del cuerpo de agua, con el calor de reacción de los procesos de amonificación, nitrificación, fotosíntesis y respiración. La fijación simbiótica de nitrógeno (FSN) y el proceso ANAMMOX no se incluyeron en el módulo ecológico debido a que las tasas de nitrógeno fijado y generado resultaron muy bajas (del orden de 10^{-7} y 10^{-8} mg.s⁻¹ para la FSN y ANAMMOX respectivamente) comparadas con los procesos que se incluyeron en el modelo, cuyas tasas son del orden de entre 10^1 y 10^{-2} mg.s⁻¹ (para la amonificación y la nitrificación respectivamente).

Los resultados mostraron que el modelo CFD bifásico representa de mejor manera la hidrodinámica del fluido en el ecosistema. Con el modelo se demostró que los sólidos suspendidos afectan el campo hidrodinámico de la laguna facultativa, desfavorecen la penetración de radiación solar en el cuerpo de agua y favorecen el transporte del retardante de llama BDE 99. Se logró demostrar que una función definida por el usuario (UDF) en la condición de frontera de entrada para la concentración de sólidos, mejora en 10% el desempeño del modelo. Se demostró, que la condición de viento en la superficie no tiene un efecto significativo sobre los procesos de transferencia de energía. También, que en la laguna se generaron variaciones de temperatura inferiores a 2°C. Con esto, se pudo descartar el efecto de la temperatura sobre los patrones de flujo generados por el cambio en la densidad del fluido. Esto indicó que bajo las condiciones ambientales del municipio de Ginebra-Valle del Cauca-Colombia y factores como la profundidad del ecosistema, su área superficial y su localización geográfica no se favorece la formación del epilimnion, la termoclina y el hipolimnion en el cuerpo de agua de la laguna. Razón por la cual, sería más acertado describir este ecosistema localizado en una región tropical, en términos de la penetración de radiación solar en el cuerpo de agua. En ese orden de ideas, sería más conveniente describirlo como un ecosistema construido conformado por tres zonas: una zona fótica, una zona intermedia y una zona afótica.

Con el módulo ecológico se demostró que los modelos lineales mixtos generalizados son una herramienta valiosa para modelar este tipo de ecosistemas. Esto, debido a que permiten incluir factores de alta incertidumbre como la profundidad y el lugar de toma de las muestras. También se encontró que las variables que mayor y menor variabilidad aportan a los procesos ecológicos modelados son la radiación solar y la temperatura ambiente respectivamente. Se logró validar los resultados de los modelos CFD y lineales mixtos con datos experimentales. Se encontró una concordancia aceptable entre los datos simulados y los experimentales.

En conclusión, se logró construir y validar un modelo para representar el flujo de energía en un ecosistema acuático construido del tipo laguna facultativa secundaria. Se utilizaron técnicas de dinámica de fluidos computacional complementadas con un módulo ecológico con el que se representó el calor de reacción de los procesos de biorremediación de amonificación, nitrificación, fotosíntesis y respiración. Los resultados de la validación de los modelos muestran que las técnicas de modelación empleadas son acertadas y que se puede usar la CFD con un modelo ecológico para representar fenómenos complejos de las lagunas facultativas como la hidrodinámica, la transferencia de energía, el transporte de sólidos, el transporte de contaminantes orgánicos y procesos biológicos de descontaminación.

En términos del desarrollo tecnológico de este tipo de ecosistemas acuáticos, las herramientas de modelación desarrolladas en esta investigación pueden utilizarse para proponer innovaciones de diseño encaminadas a mejorar la eficiencia de eliminación de partículas en suspensión, reducir el transporte de compuestos orgánicos persistentes como los bifenilos policlorados o los retardantes de llama bromados y mejorar procesos dependientes de la radiación solar como la foto degradación de este tipo de compuestos orgánicos.

2. INTRODUCCION

Las Lagunas Facultativas (LFs) son una de las tecnologías más importantes para la descontaminación de aguas residuales (AR), (Butler *et al.*, 2015). Las cuales, gracias a sus bajos costos, alta eficiencia, simplicidad en su diseño y fácil operación y mantenimiento, son ampliamente utilizadas en el mundo, especialmente en países en desarrollo en los que no hay limitación de radiación solar en ninguna época del año, (Olukanni and Ducoste, 2011). Básicamente, las LFs son estanques, cuyas características de diseño deben favorecer el desarrollo de una amplia variedad de microorganismos y procesos físicos, químicos y biológicos (Pham *et al.*, 2014), que al interrelacionarse aumentan la complejidad del ecosistema y favorecen la depuración de las aguas contaminadas (Fukami, Nishijima and Ishida, 1997).

La hidrodinámica de las LFs y la transferencia de energía hacia y desde el cuerpo de agua son dos de los aspectos de diseño más importantes y que más afectan su desempeño, (Nameche and Vassel, 1998). Estos fenómenos son afectados por condiciones ambientales como la temperatura, la dirección y velocidad del viento, la radiación solar, (Song, M. A. Xenopoulos, et al. 2013), patrones de recirculación del fluido, zonas muertas, cortos circuitos, estructuras como baffles o mallas y en algunos casos por dispositivos mecánicos de aireación, (Alvarado *et al.*, 2013). También, pueden verse afectados por la presencia de fenómenos más complejos como el transporte de sólidos suspendidos, la población de algas en la laguna ó el material de las paredes circundantes. Por estas razones, el diseño y la operación de una laguna facultativa demandan un profundo conocimiento de estos fenómenos, (Persson 2000), haciendo indispensable la aplicación de nuevas herramientas para su estudio. En ese orden de ideas, una de las herramientas más valiosas e innovadoras desarrolladas en los últimos 20 años son los modelos computacionales, particularmente, aquellos que utilizan técnicas de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD, por sus siglas en inglés).

La CFD es una herramienta ampliamente utilizada en la modelación de lagunas de estabilización (Ghidossi, Veyret and Moulin, 2006; Wang, Waite and Leslie, 2013), la cual ha permitido evaluar los procesos de descontaminación y proponer mejoras de diseño, (Alvarado, et al. 2012). A pesar de ello, la mayoría de los modelos CFD han sido contruidos para simular estrictamente la hidrodinámica del fluido, (Salter *et al.*, 2000; Sah, Diederik P L Rousseau, *et al.*, 2011a; Alvarado, Vedantam, *et al.*, 2012; Aponte, 2013; Gomes Passos, Von Sperling and Bressani Ribeiro, 2014), solo el 16% ha incluido algún componente energético pero relacionado con los perfiles de temperatura del cuerpo de agua. Ninguno, ha incluido fenómenos complejos como el transporte de sólidos suspendidos o la penetración de radiación solar en el cuerpo de agua. Por tal razón, en esta investigación se desarrolló un modelo CFD para representar el fenómeno de transporte de sólidos suspendidos y el flujo de energía en una laguna facultativa secundaria, ubicada en el municipio de Ginebra-Valle del Cauca, Colombia.

El modelo se utilizó para simular la transferencia de calor a través de las paredes circundantes, la penetración de radiación solar y el perfil de temperatura del cuerpo de agua, el efecto del viento en la superficie y el transporte del retardante de llama BDE 99. Como complemento al modelo CFD, se construyó un módulo ecológico con el que se representó el calor de reacción de los procesos de amonificación, nitrificación, fotosíntesis y respiración. Este módulo se construyó utilizando modelos lineales mixtos generalizados implementados en el software Stella®.

El modelo CFD se desarrolló usando el software ANSYS Inc. Fluent® (V.16.1) en una estación de trabajo Dell Precision TX3500 procesador Intel® Xeon® X3470 (8MB Caché, 2.93GHz, Turbo, HT). Se empleó el método de volúmenes finitos dividiendo el dominio computacional en 161890 elementos hexagonales, usando el software Ansys Inc® ICEM CFD™ meshing software (V.16.0). Se resolvieron las ecuaciones de continuidad, turbulencia, cantidad de movimiento y transferencia de energía.

El modelo CFD tuvo un buen ajuste al comparar los datos experimentales con los simulados. El porcentaje de error en el efluente para la concentración de sólidos suspendidos fue del 12%, la temperatura presentó un error entre el 1% y el 8% y la concentración del BDE 99 un error de 14% en el efluente y un error promedio de 39% en el interior de la laguna.

Con el modelo se demostró que el efecto del viento en la superficie sobre los perfiles de temperatura no es significativo, que los sólidos suspendidos afectan el comportamiento hidrodinámico del fluido, limitan la penetración de la radiación solar en el cuerpo de agua y son un medio eficaz para el transporte de contaminantes orgánicos como el retardante de llama BDE 99. Adicionalmente, el modelo dejó en evidencia que el uso de una geomembrana recubriendo las paredes internas de la laguna favorece un aumento en la temperatura del cuerpo de agua. Finalmente, se demostró que los modelos lineales mixtos generalizados son una excelente alternativa para representar procesos de biorremediación como la amonificación, la nitrificación, la fotosíntesis y la respiración en este tipo de ecosistemas acuáticos construidos.

3. REVISIÓN DE LITERATURA

3.1. Sistemas lagunares para el tratamiento de aguas residuales

3.1.1 Biorremediación de aguas residuales

La explosión demográfica y la falta de planeación en los centros urbanos ha generado un aumento en la producción de aguas residuales, incrementando la presión sobre el ambiente y convirtiéndolas en una de las principales fuentes de contaminación de los ecosistemas acuáticos. Como consecuencia, han sido afectadas las especies acuáticas y se han causado graves problemas en la salud humana. Esta problemática demanda acciones inmediatas a través del desarrollo de nuevos sistemas de tratamiento o la mejora de los ya existentes para afrontar los desafíos ambientales que se presentan.

En ese orden de ideas, una de las tecnologías más importantes para el tratamiento de aguas residuales, son las lagunas facultativas, (LFs) (Butler *et al.*, 2015). Las cuales, son uno de los sistemas de tratamiento con la mejor relación costo-beneficio, gracias a la simplicidad de su diseño, su fácil operación, y bajos costos de mantenimiento, (Olukanni and Ducoste, 2011). Esto permite su uso alrededor del mundo, haciéndolas especialmente atractivas en países en desarrollo ubicados en regiones tropicales, (Mara, 2004).

Las LFs son estanques cuya profundidad oscila entre 0.8m y 1.60m las cuales a través de una serie de procesos naturales como la sedimentación, la foto oxidación, la fotosíntesis, la amonificación, la nitrificación, la denitrificación, la respiración, Anammox, metanogénesis, (Mayo and Abbas, 2014a) favorecen la biorremediación de las aguas contaminadas. A pesar de sus grandes ventajas, se ha demostrado que el crecimiento de la biomasa de algas, el transporte de sólidos desde el afluente y fallas hidráulicas como los cortos circuitos y las zonas de recirculación generan un aumento indeseado en la concentración de sólidos suspendidos en el efluente de la laguna, (Shilton and Harrison, 2003a). Esto,

desfavorece la eficiencia de procesos como la foto-oxidación de contaminantes orgánicos ó la eliminación de virus y bacterias, (Leal et al. 2013; Eriksson et al. 2004) que indudablemente desfavorecen la calidad del efluente.

3.1.2 Ecología de lagunas facultativas

Desde el punto de vista ecológico las lagunas facultativas son ecosistemas lentos, hipertróficos, gobernados por lo tanto por un exceso de nutrientes y materia orgánica. Estos ecosistemas han sido catalogados como uno de los sistemas de biorremediación de aguas residuales más complejos que existen, no solo por los procesos de descontaminación y comunidades de microorganismos y macro y micro invertebrados presentes en estas, sino, por propiedades emergentes como la resiliencia, la diversidad, la resistencia y la estabilidad (Jørgensen, Patten and Straškraba, 1999), las cuales se hacen evidentes en la laguna únicamente cuando estos factores bióticos y abióticos coexisten en el cuerpo de agua, (Harfoot *et al.*, 2014) y, que se presentan gracias a que este tipo de ecosistemas son abiertos.

Las características de diseño de una laguna facultativa deben favorecer el desarrollo de una amplia variedad de microorganismos y procesos, (Pham *et al.*, 2014), los cuales, al interrelacionarse favorecen la depuración de las aguas contaminadas, (Fukami, Nishijima and Ishida, 1997). Su diseño debe favorecer el crecimiento de una población saludable de algas, debido a que el oxígeno requerido para la eliminación bacteriana de la DBO es provisto principalmente por la fotosíntesis, (Abreu-Silvia and Carrasquero-Emir, 2002). A su vez, las algas se benefician del CO₂ producido en la respiración bacteriana, junto con la liberación de nutrientes para obtener energía y realizar la fijación de carbono a través de la actividad fotosintética, (Lima *et al.*, 2004). Esta situación ha llevado a varios autores a afirmar que las algas son los organismos piedrangules del funcionamiento de este tipo de ecosistemas, las que controlan la rapidez del tratamiento y la calidad del efluente, (Azov and Goldman, 1982; González, Bécares and Luis, 2001; Larsdotter, 2006; Kotteswari, Murugesan and R, 2012).

Esta afirmación ha centrado la atención de la mayoría de los investigadores en este tipo de organismos, razón por la cual se han realizado vastas investigaciones sobre estos, (Kayombo *et al.*, 2003; Muñoz and Guieysse, 2006b; Pham *et al.*, 2014). La

Tabla 1, muestra algunas de las funciones que desempeñan las algas en las lagunas facultativas.

Tabla 1. Función de las algas en las lagunas facultativas

Aplicación	Comentario
Eliminación de DBO	Las algas liberan $1.5 - 1.92 \text{ kgO}_2.\text{kg}^{-1}$ de biomasa algal producida durante el crecimiento foto autotrófico y tasas de oxigenación de $0.48 - 1.85 \text{ kgO}_2.\text{m}^{-3}\text{d}^{-1}$ reportados en lagunas a escala piloto o tanques a escala de laboratorio.
Eliminación de nutrientes	Las algas asimilan una cantidad significativa de nutrientes debido a sus altos requerimientos de nitrógeno (N) y fósforo (P) para proteínas (45 – 60% dw), ácidos nucleicos y síntesis de fosfolípidos. También, ayudan a la precipitación de P, debido al incremento del pH asociado al proceso de fotosíntesis.
Eliminación de metales pesados	Los organismos fotosintéticos pueden acumular metales pesados por adsorción, intercambio de iones y quimiosorción, precipitación en la superficie, reacciones redox o cristalización en la superficie celular. La absorción activa que a menudo implica el transporte de los metales al interior de la célula es frecuentemente una herramienta de defensa que sirve para evitar la intoxicación o para acumular elementos traza esenciales. Las algas también puede liberar metabolitos extracelulares, que son capaces de quelar iones de metales. Por último, el aumento en el pH asociado con el crecimiento de las algas puede mejorar la precipitación de metales pesados.

Aplicación	Comentario
Eliminación de patógenos	Las algas mejoran la eliminación de patógenos debido a que favorecen el incremento pH, la temperatura y la concentración del oxígeno disuelto en el efluente tratado.
Eliminación de contaminantes heterotróficos	Se ha comprobado que las algas verdes y las cianobacterias son capaces de usar componentes como carbono, nitrógeno, sulfuro o fuentes de fósforo.
Monitoreo de la toxicidad	Las algas son usadas en test de toxicidad o en estudios de ecología microbiana puesto que son indicadores sensibles de los cambios ecológicos.

Adaptada de (Muñoz and Guieysse, 2006b)

El intercambio gaseoso (O_2/CO_2) no es la única interacción entre algas y bacterias. Las algas pueden tener un efecto negativo sobre la actividad bacteriana por el incremento del pH, la concentración de oxígeno disuelto, la temperatura del cuerpo de agua o por la excreción de metabolitos inhibidores ó, por el contrario, pueden liberar compuestos extracelulares que mejoran la actividad bacteriana, (Hofkirchner and Schafranek, 2011). También, se ha demostrado que el crecimiento bacteriano puede mejorar el metabolismo de las algas mediante la liberación de promotores del crecimiento o por la reducción de la concentración de oxígeno en el medio (Mouget, 1995; Fukami, Nishijima and Ishida, 1997; Gonzalez and Bashan, 2000). Factores abióticos como la intensidad de la luz solar, el pH, la temperatura ambiente, la dirección y velocidad del viento y la concentración de CO_2 tienen influencia directa sobre la concentración de oxígeno disuelto y la fotosíntesis, (Kayombo, *et al.*, 2000), mientras que factores operacionales y de diseño como la profundidad, la turbulencia, y el tiempo de retención hidráulico están estrechamente relacionados con el mejoramiento de los procesos algales y por ende de los procesos de descontaminación, (González, Bécares and Luis, 2001; Larsdotter, 2006).

Además de las interacciones entre algas y bacterias y los factores operacionales, existen procesos físicos y bioquímicos como la sedimentación y la digestión anaerobia, que son los principales mecanismos por los cuales se estabiliza el carbono orgánico en este tipo de ecosistemas (El Halouani *et al.*, 1993; García *et al.*, 2006). Los procesos de digestión anaerobia son complejos y consisten en una serie de transformaciones microbianas de los compuestos orgánicos a metano y ácidos grasos volátiles como acetato, propionato, butirato, isobutirato, valerato e isovalerato. (Pescod, 1996; Ghanam *et al.*, 2013). Este proceso se da en los sedimentos del fondo de la laguna ó bentos, (Rajbhandari and Annachhatre, 2004) y está conformado principalmente por sólidos, biomasa de algas y células muertas de microorganismos de la columna de agua (Mashauri and Kayombo, 2002).

En definitiva, desde el punto de vista ecológico, las lagunas facultativas son uno de los sistemas de tratamiento de aguas residuales más complejos, no solo por la presencia de poblaciones o comunidades de microorganismos, micro y macro invertebrados ó por la intrincada red de procesos físicos, químicos y biológicos presentes en estas, sino, por sus propiedades emergentes, (Jørgensen, Patten and Straškraba, 1999), que se presentan cuando todos estos factores coexisten en el cuerpo de agua, (Harfoot *et al.*, 2014). En este trabajo de investigación el ecosistema acuático construido fue del tipo laguna facultativa secundaria, la cual recibe el efluente de una laguna anaerobia. Esto implica que pueda biorremediar cargas superficiales aplicadas relativamente bajas: entre 100 – 400 kg DBO.Ha⁻¹.día⁻¹. Esta carga, sumada a la temperatura ambiente promedio de 24°C predominante en el municipio de Ginebra-Valle del Cauca-Colombia, debe favorecer el crecimiento de una población saludable de algas, la presencia de una zona fótica en el volumen de agua y las condiciones adecuadas para que se desarrolle el proceso fotosintético. Este, es el proceso principal mediante el cual se genera el oxígeno requerido para la eliminación de la DBO. Como resultado de las variaciones nictemerales de la radiación solar y de la actividad fotosintética este tipo de lagunas presentan variaciones en el oxígeno disuelto y el pH. De esta manera, el modelado de este tipo ecosistemas acuáticos construidos debe incluir

no solo un análisis de los componentes de tipo hidráulico u operacionales, sino también ecológicos, manteniendo un equilibrio entre la complejidad del ecosistema y la sencillez del modelo con que se quiere representar.

3.1.3 Procesos de biorremediación de nitrógeno en lagunas facultativas

La presencia de concentraciones elevadas de nitrógeno en los efluentes de aguas residuales, ocasiona un desequilibrio ecológico importante en los ecosistemas y genera un deterioro en la salud ambiental, (Mayo and Abbas, 2014b). Entre los impactos más importantes se pueden incluir la eutrofización, la cual ocasiona la muerte de especies acuáticas y enfermedades en los seres humanos, como la meta-hemoglobinemia, esta es una enfermedad caracterizada por niveles altos de metahemoglobina en la sangre (Met-Hb) que reduce la capacidad de los glóbulos rojos para transportar oxígeno hacia los tejidos. También, estas concentraciones elevadas producen diarrea, vómitos, y en casos extremos la muerte, (Kelter *et al.*, 1997). Así mismo, genera la alteración de los hábitats y cambios en la estructura trófica de los ecosistemas. (Anderson, Glibert and Burkholder, 2002). Ante esta problemática, en las lagunas facultativas ocurren diversos mecanismos de eliminación de nitrógeno, (Mayo and Abbas, 2014b) entre los que se destacan la sedimentación, la mineralización, la asimilación, la descomposición, la amonificación, la nitrificación, la denitrificación y el proceso Anammox, (Senzia *et al.*, 2002; Sánchez and Sanabria, 2009; Babu *et al.*, 2011). La eficiencia de eliminación de cada proceso puede variar desde un 0,1% para la volatilización (Peng *et al.*, 2007) hasta un 91% para el proceso de nitrificación-denitrificación (Babu *et al.*, 2011). En todo caso, la eficiencia de cada uno dependerá de factores como el tiempo de retención hidráulico, la concentración de oxígeno disuelto, (Mayo and Mutamba 2005), la geometría de la laguna, (Yi, Hur and Kim, 2009), la temperatura ambiente y del cuerpo de agua, (Peng *et al.*, 2007), la época del año (en países con estaciones), (Houweling *et al.*, 2008b) y la ecología de la laguna, (Mayo and Abbas, 2014b). Se ha demostrado la relación entre procesos de eliminación nitrógeno como la asimilación, la nitrificación y la denitrificación con variables como el pH y la temperatura, (Senzia *et al.*, 2002; Mayo and Abbas,

2014a). A pesar de que los procesos de eliminación de nitrógeno en lagunas facultativas son unos de los más estudiados, estos aún no se encuentran completamente descritos y hace falta profundizar en las interacciones entre microorganismos asociados a la biorremediación del nitrógeno y los factores ecológicos de la laguna, (Sah, Rousseau and Hooijmans, 2012), lo que representa un importante nicho de investigación en términos de modelación ecológica.

3.1.4 Procesos de biorremediación de carbono en lagunas facultativas

Los procesos de biorremediación asociados al ciclo del carbono en este tipo de ecosistemas han cobrado relevancia en los últimos años, (Kirrolia, Bishnoi and Singh, 2013). Esto se debe a que además de favorecer la descontaminación de las aguas residuales, permiten la recuperación o ciclaje de nutrientes como el nitrógeno y el fósforo, que posteriormente pueden ser utilizados en la agricultura, (Cai, Park and Li, 2013). También se ha encontrado interés en la obtención de subproductos como la biomasa de algas (Chisti, 2007), la cual en algunos casos es usada como materia prima para la producción de biocombustibles, (Cai, Park and Li, 2013) ó la alimentación humana y animal, (Suganya *et al.*, 2016). En las lagunas facultativas, el ciclo del carbono está conformado por procesos físicos y bioquímicos como la fotosíntesis aerobia y anaerobia, la respiración aerobia, la respiración anaerobia y la sedimentación. (Mukherjee, Mukherjee and Nivedita, 2008a). Procesos como la fotosíntesis, favorecen la fijación de CO₂ (Cai, Park and Li, 2013), haciendo que cobren relevancia factores ambientales como la radiación solar y la temperatura y, características de diseño como la profundidad y geometría de la laguna y la carga orgánica (Glaz *et al.*, 2016). En el metabolismo de las algas el dióxido de carbono es fijado como nuevo material celular, generando una composición de la biomasa de algas con 53.4% de C, 7.60% de H, 28.44% de O, 9.30% de N y 1,30% de P, (Muñoz and Guieysse, 2006a). Esto hace que en la fijación de carbono llevada a cabo por los procesos fotosintéticos sean importantes factores abióticos y operacionales del ecosistema como las tasas de aplicación del sustrato, las cargas orgánicas, la radiación solar, y la temperatura ambiente. Cargas por encima de las especificadas en el diseño desfavorecen la

penetración de la radiación en la columna de agua produciendo cambios en el ensamblaje ecológico de la laguna y generando condiciones para llevar a cabo procesos de transformación anaerobia del carbono, (Ragush *et al.*, 2017). También se estima que cerca del 80% del oxígeno disuelto en las lagunas facultativas proviene de la actividad fotosintética, (Mara and Horan, 2003).

Las algas no son los únicos organismos que intervienen en los procesos de transformación de carbono. También es posible encontrar las bacterias purpuras del azufre (BPA) las cuales emplean la radiación solar como fuente de energía y compuestos orgánicos como fuente de carbono y nitrógeno. La presencia de las BPA favorece unas condiciones óptimas de funcionamiento de las lagunas facultativas y son un indicador del buen funcionamiento de este tipo de ecosistemas, (Mara and Horan, 2003). En las lagunas facultativas también es posible encontrar un amplio rango de microorganismos heterotróficos aeróbicos como *Pseudomonas*, *Achromobacter*, *Flavobacterias* y *Bacilos* las cuales aumentan las interacciones entre poblaciones de microorganismos y por ende la complejidad del ecosistema.

3.2. Contaminantes emergentes en lagunas facultativas

Las lagunas facultativas tienen muchas ventajas frente a otro tipo de sistemas de tratamiento de aguas residuales. Esto se debe, a que los procesos de oxidación de la materia orgánica son procesos naturales, llevados a cabo por microorganismos como las bacterias, las algas y los hongos lo que hace que sea un método de tratamiento costo-efectivo muy eficiente en términos de construcción, mantenimiento y requerimiento de energía, (Butler *et al.*, 2015). Las lagunas facultativas también son productivas, ya que generan efluentes que pueden utilizarse para el ciclaje de nutrientes mediante su uso en la agricultura (Cai, Park and Li, 2013). En algunos casos se ha estudiado la posibilidad de generar subproductos como el gas metano y la biomasa de algas, (Chisti, 2007). A pesar de estas ventajas, se ha encontrado que una de las deficiencias más

importantes de estos sistemas de tratamiento, son las elevadas concentraciones de sólidos en el efluente, (Mara, 2004), como consecuencia de la alta producción de biomasa de algas, el transporte de sólidos desde el afluente y fallas hidráulicas como cortos circuitos. Esto, puede incrementar la DBO entre un 160% y un 240%, (Mayo, 1996; Kaya, Dilek and Gökçay, 2007; Passos, Von Sperling and Ribeiro, 2014). Adicionalmente, este fenómeno, se convierte en un medio de transporte eficaz para cierto tipo de contaminantes. Especialmente aquellos con características hidrofóbicas como los bifenilos policlorados (PCBs) y los retardantes de llama bromados (PBDEs), (Deng and Tam, 2016a). Así mismo, un crecimiento inapropiado de algas, sumado a altas cargas orgánicas puede reducir la efectividad de los procesos de foto-oxidación de las lagunas. Esto sucede al disminuir la penetración de la radiación solar de onda corta y la concentración de oxígeno disuelto, (Leal, Esteves and Santos, 2013). Investigaciones recientes en Canadá, mostraron altas concentraciones de PBDEs en los efluentes de lagunas facultativas, asociadas principalmente a altas concentraciones de sólidos suspendidos, incrementos de la temperatura, la estación del año y factores operacionales y de mantenimiento, (Kim *et al.*, 2013).

Es importante mencionar que los estudios reportados hasta el momento, relacionados con la biorremediación de contaminantes emergentes como los PBDEs, catalogados como persistentes, bioacumulativos y tóxicos, (Waaijers and Parsons, 2016), involucran la biorremediación con algas, pero han sido desarrollados principalmente en ensayos de laboratorio y en monocultivos, que no tienen en cuenta las fluctuaciones ambientales de temperatura, oxígeno disuelto, pH, radiación solar y en general el complejo ensamblaje ecológico de este tipo de ecosistemas, (Norvill, Shilton and Guieysse, 2016). Así mismo, no incluyen aspectos de diseño como la hidrodinámica del cuerpo de agua, la geometría de la laguna ó el fenómeno de transporte de sólidos los cuales harán parte del modelo que se desarrollará en la presente investigación.

3.3. Modelos de lagunas facultativas

3.3.1 Modelos usando dinámica de fluidos computacional

La Dinámica de Fluidos Computacional, CFD, por sus siglas en inglés, es una herramienta ampliamente utilizada en la modelación de fenómenos complejos como la transferencia de calor, (Li, Rong and Zhang, 2016), masa, dirección de flujos ambientales, (Yuan et al 2007; Rameshwaran et al. 2013; Baskaran and Kashef 1996), seguimiento de la trayectoria de partículas, (Huggins, Piedrahita and Rumsey, 2004), reacciones químicas ó el comportamiento hidráulico del fluido en sistemas de tratamiento de aguas residuales, como los filtros de membrana o las lagunas de estabilización (Ghidossi, Veyret and Moulin, 2006; Wang, Waite and Leslie, 2013).

Elaborar un modelo usando las técnicas de CFD involucra pasos como la construcción de la geometría del elemento a modelar. En este caso la geometría será el dominio computacional del modelo. La generación de la malla, la cual consiste en la sub-división del dominio en un número determinado de pequeños elementos o volúmenes de control, en los que se resolverán las ecuaciones seleccionadas. La selección de los fenómenos físicos o químicos que serán modelados, las propiedades del fluido y la especificación apropiada de las condiciones de frontera. Finalmente, se deberá seleccionar el método numérico apropiado para la solución del problema, (diferencias finitas, elementos finitos ó métodos espectrales). Generalmente, los modelos CFD son validados mediante la comparación estadística o cualitativa con datos experimentales, (Versteeg, 1995).

3.3.2 Dinámica de Fluidos computacional aplicada a la modelación de lagunas facultativas

Los ecosistemas acuáticos contruidos para la biorremediación de aguas residuales han sido un área activa de investigación durante las últimas tres

décadas. A pesar de la simplicidad de su diseño, operación y mantenimiento, muchos de los procesos que tienen lugar en estos ecosistemas aún no han sido enteramente cuantificados y estudiados, (Sah, Rousseau and Hooijmans, 2012). Una de las razones para esta situación, son las limitadas técnicas de tipo cualitativo y cuantitativo disponibles para caracterizar los procesos de biorremediación, mezcla, transporte de sólidos y transferencia de energía típicos de estos ecosistemas, (Pougatch *et al.*, 2007). Las técnicas existentes se pueden agrupar en estudios de trazadores y más recientemente en técnicas de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD), aplicadas a los sistemas lagunares para el tratamiento de aguas residuales. Los estudios de trazadores son ampliamente descritos en la literatura y, son uno de los métodos experimentales más usados para evaluar el comportamiento hidrodinámico de las lagunas, a pesar de su alta demanda de trabajo de campo. El procedimiento comúnmente utilizado en este tipo de estudios es la técnica de estímulo-respuesta. En esta, mediante una inyección de pulso, se aplica una cantidad conocida de trazador en el afluente. Posteriormente, midiendo la concentración del trazador en el efluente, se representa la curva de distribución del tiempo de residencia (RTD) (Ramesh and Nilesh, 2015). A pesar de su amplio uso los estudios de trazadores son esencialmente técnicas de “caja negra”, las cuales brindan información muy limitada acerca de los patrones de flujo al interior de la laguna, (Broughton and Shilton, 2012). Por el contrario, los modelos que usan dinámica de fluidos computacional (CFD), se han convertido en una potente e innovadora herramienta para estudiar de manera detallada, la hidrodinámica de los sistemas lagunares para el tratamiento de aguas residuales (Zhang, Tejada-Martínez and Zhang, 2014). Esto, ha convertido a la ingeniería del tratamiento de aguas residuales en uno de los campos donde más han sido aplicadas las técnicas de modelación CFD durante los 20 últimos años, (Alvarado *et al.* 2012a). Al respecto, los modelos CFD de sistemas lagunares para el tratamiento de aguas residuales, incluyen una amplia variedad de fenómenos como la hidrodinámica del fluido, (Alvarado *et al.* 2012a; Aponte 2013; Sah, *et al.* 2011a; Gomes Passos *et al.* 2014; Salter *et al.* 2000), el efecto de los sólidos sedimentados sobre la geometría de la laguna,

(Huggins, Piedrahita and Rumsey, 2004; Alvarado *et al.*, 2012b; Passos, Von Sperling and Ribeiro, 2014; Ouedraogo *et al.*, 2016) y procesos de transformación de nitrógeno, (Houweling *et al.*, 2008a) y carbono, (Sah, Diederik and Rousseau, 2011a). En otros casos, se han desarrollado modelos para mejorar el diseño, evaluando la geometría a través de la incorporación de baffles o mallas, (Shilton, 2000; Abbas, Nasr and Seif, 2006; Olukanni and Ducoste, 2011) ó variando la ubicación de las estructuras de entrada y salida.

A pesar de los grandes avances, un análisis detallado de los modelos CFD de ecosistemas acuáticos construidos, permitió identificar ciertas debilidades que pueden ser exploradas en esta o futuras investigaciones. Algunas, están relacionadas con la validación y calibración del modelo, de un total de 44 modelos evaluados desde el año 1992, solo el 16% cuenta con algún análisis de sensibilidad y el 61% con algún tipo de validación, (Sah, Rousseau and Hooijmans, 2012). En cuanto al componente energético y de transferencia de energía, el cual es uno de los más importantes en este tipo de ecosistemas, solo se ha incluido en el 16% de los modelos. Este componente ha sido estrictamente relacionado con los perfiles de temperatura y la estratificación de parámetros físicos como el oxígeno disuelto en la columna de agua, (Gu and Stefan, 1995), la eficiencia del tratamiento, (Sah, Diederik, Rousseau, 2011b) y la temperatura ambiente, (Escalas-Cañellas *et al.*, 2008). Ninguno tiene en cuenta parámetros como la penetración de la radiación solar y su relación con los procesos de foto degradación de contaminantes ambientales, el crecimiento de biomasa o la dinámica ecológica de la laguna. Así mismo, en el trabajo de Sah, Rousseau, & Hooijmans, (2012), se pudo observar que no se han reportado en la literatura investigaciones que representen el fenómeno de transporte de sólidos suspendidos en el interior de la laguna. Escasamente, se han reportado estudios en los que se analiza el efecto de los sólidos sedimentados sobre la geometría y tiempos de retención de la laguna, (Alvarado, Sánchez, et al., 2012; Ouedraogo et al., 2016). Estos estudios se han realizado modificando el dominio computacional de los modelos. En ambas investigaciones los modelos fueron validados con

estudios de trazadores y se logró demostrar que la CFD posee el potencial suficiente para explorar con detalle la hidrodinámica de las LFs y su relación con el transporte de sólidos y fenómenos de transferencia de energía. Respecto a los modelos CFD aplicados a lagunas facultativas, se ha encontrado que los modelos de turbulencia del tipo K- ϵ son los más utilizados y los que mejor se ajustan a la representación del componente hidrodinámico de estos ecosistemas. (Alvarado *et al.*, 2013). A pesar de esto, no se dan pautas para la selección adecuada de los modelos de turbulencia K- ϵ existentes. Todo indica que la selección obedece a un procedimiento de ensayo y error. En conclusión, a pesar de los avances significativos alcanzados con el uso de modelos CFD aplicados a lagunas facultativas, esta, aún es un área en la que hay mucho por explorar. Principalmente, la inclusión de fenómenos diferentes al hidrodinámico tales como: fenómenos de transferencia de energía, de transporte de sólidos, transporte de contaminantes y la transformación de especies químicas. La Tabla 2 muestra los factores clave desarrollados en el campo de los modelos CFD aplicados a ecosistemas acuáticos construidos del tipo laguna facultativa en los últimos 10 años.

Tabla 2. Contribución de los modelos CFD aplicados a lagunas facultativas

Referencia	Contribución
(Banda, 2007)	Evaluó la eficiencia del tratamiento y el comportamiento hidráulico bajo los efectos de cortos circuitos hidráulicos, adición de baffles, la velocidad del viento en la superficie y la estratificación térmica
(Sah <i>et al.</i> , 2011b)	Combinó un modelo hidrodinámico 3D con un modelo mecanístico de calidad de agua. El modelo fue desarrollado con la herramienta Delft3D.
(Olukanni and Ducoste, 2011)	Utilizaron CFD acoplada con un programa de optimización para optimizar la selección de la mejor configuración de una LF basada en el costo y la eficiencia del tratamiento

Referencia	Contribución
(Alvarado <i>et al.</i> , 2011)	Comparó la curva de distribución del tiempo de residencia (RTD) de un estudio de trazadores experimental con la RTD de un trazador inyectado en un modelo CFD en tres dimensiones. Utilizó el modelo de turbulencia k- ϵ estándar.
(Alvarado <i>et al.</i> , 2012)	Presenta un método en el que se utiliza un modelo CFD como plataforma para el desarrollo de un modelo compartimental.
(Alvarado <i>et al.</i> , 2013)	Estudió el consumo energético de los aireadores de una laguna facultativa aireada con el uso de modelos CFD en 3 dimensiones.
(Gomes Passos, Von Sperling and Bressani Ribeiro, 2014)	Validaron un modelo CFD de una laguna facultativa con perfiles de velocidad experimentales.
(Ouedraogo <i>et al.</i> , 2016)	Utilizó un modelo CFD para evaluar el impacto de la capa de lodos del fondo de una laguna facultativa sobre su comportamiento hidrodinámico.

3.4. Modelos ecológicos

Los modelos ecológicos de ecosistemas acuáticos tuvieron su inicio en los años 70. Han tenido un gran avance durante la última década, siendo los modelos de ecosistemas lenticos los de mayor desarrollo, (Jørgensen, 2010). En varios de estos modelos se han acoplado procesos hidrodinámicos y ecológicos, (Zhao *et al.*, 2008), muchos de los cuales se han desarrollado con datos obtenidos en microcosmos y a escala real, los cuales han permitido modelar las interacciones entre las algas y otros microorganismos presentes en este tipo de ecosistemas, (Biber, Harwell and Cropper, 2004).

Las aplicaciones de los modelos ecológicos son muy amplias, con ellos ha sido posible modelar ciclos biogeoquímicos como el del fósforo, (Zhang *et al.*, 2003), el carbono, el nitrógeno, (Mukherjee, Mukherjee and Nivedita, 2008a), ó múltiples ciclos a la vez, (carbono, nitrógeno, fosforo, silicio y oxígeno), (Zhao *et al.*, 2008). Procesos de transferencia de energía (Zhao *et al.*, 2008) y, las relaciones entre las propiedades de los ecosistemas acuáticos y los cambios en las estructuras de sus comunidades debidas a factores bióticos y abióticos, (Zhang, Gurkan and Jørgensen, 2010). La modelación ecológica también se ha usado para evaluar la salud de los ecosistemas y su desarrollo estructural, (Jørgensen, 2010; Marchi *et al.*, 2011). Según Jørgensen (2008), es posible clasificar 11 tipos de modelos ecológicos, los cuales se presentan en la Tabla 3. La selección de un tipo específico de modelo dependerá de los objetivos propuestos en la etapa conceptual.

En el campo específico de las lagunas facultativas, la modelación ecológica es muy diversa. En cuanto a contaminantes, se ha empleado principalmente para evaluar los procesos de biorremediación asociados a los ciclos del nitrógeno, (M. A. Senzia *et al.*, 2002; Dochain *et al.*, 2003; Mayo and Abbas, 2014b), del carbono, (Mukherjee, Mukherjee and Nivedita, 2008b; Aponte-Reyes, 2014) y en menor proporción el fosforo, (Mesplé *et al.*, 1996) y algunos contaminantes orgánicos como los antibióticos (Møller *et al.*, 2016). Estos procesos han sido asociados a factores bióticos y abióticos de la laguna como los gradientes de temperatura, oxígeno disuelto y pH, (Kayombo, *et al.*, 2000; Kayombo *et al.*, 2002). También, se ha evaluado cómo la concentración del sustrato afecta el crecimiento de algas y bacterias, (Kayombo, *et al.*, 2003) y más recientemente en la simulación del transporte de antibióticos como trimetoprin, metronidazol, sulfamethoxazol y ciprofloxacina en un sistema de lagunas en la ciudad de Morogoro-Tanzania, (Møller *et al.*, 2016). Esta última área, la de los contaminantes emergentes, es relativamente nueva y representa todo un desafío en el campo de la modelación ecológica de lagunas facultativas debido a la complejidad y novedad de los

procesos. Generalmente los modelos ecológicos utilizados para representar ecosistemas acuáticos contruidos del tipo laguna facultativa secundaria han sido contruidos dividiendo el ecosistema en compartimentos, (Peng *et al.*, 2007b; Mukherjee, Mukherjee and Nivedita, 2008a) ó utilizando ecuaciones de balance de materia, correlaciones lineales y ecuaciones diferenciales (Moreno-Grau *et al.*, 1996; Peng *et al.*, 2007; Mukherjee, Mukherjee and Nivedita, 2008a; Babu *et al.*, 2011; Aponte-Reyes, 2014). Aunque estos artificios han brindado resultados aceptables acerca de la cuantificación de los procesos, en lo ecológico dejan mucho que desear debido a la fragmentación del ecosistema en los modelos, la exclusión de variables ambientales como la radiación solar y en general la visión reduccionista y primordialmente ingenieril con que se aborda el ecosistema. Parafraseando a Jørgensen, Patten and Straškraba, (1992), el estudio de los ecosistemas incluidos los modelos con que estos se representan, deberían abordarse entendiendo a estos como una unidad inseparable en sus componentes e interrelacionado con su entorno.

Tabla 3. Tipos de modelos ecológicos, ventajas y desventajas de cada uno

Tipo de modelo	Ventajas	Desventajas
Modelos dinámicos bio-geoquímicos o energéticos	Basados en causalidad, en los principios de conservación de energía y masa. Son fáciles de entender, interpretar y desarrollar, se pueden usar en predicciones.	Requieren datos homogéneos y de buena calidad, son difíciles de calibrar cuando son complejos o tienen muchos parámetros.
Modelos estáticos	Requieren bases de datos más pequeñas que otros modelos, son excelentes para decidir entre casos “peores o medios”, sus resultados son fácilmente validables.	Son poco usados y muy limitados, no dan información acerca de la dinámica ni cambios con el tiempo, no permiten hacer predicciones.
Modelos de dinámica poblacional	Muestran el desarrollo de una población, realizan predicciones, son fáciles de entender, interpretar y desarrollar.	Algunas veces no se aplican los principios de conservación, limitado a dinámica de poblaciones, en algunos casos son difíciles de calibrar y requieren una buena base de datos.
Modelos estructuralmente dinámicos	Pueden modelar la biodiversidad y los nichos ecológicos, simulan cambios en la composición de especies, no necesita ser calibrado, son relativamente fáciles de desarrollar e interpretar.	Se debe seleccionar una función objetivo, requieren un alto gasto de tiempo de cómputo. Generalmente requieren programación.
Modelos fuzzy	Se pueden usar bases de datos difusas e información semi-cuantitativa.	No se puede usar fácilmente en modelos complejos ni cuando se necesitan resultados numéricos. Se basan en modelos de caja negra
Redes neuronales	Fácil de aplicar, se pueden usar bases de datos heterogéneas.	No reemplaza a los modelos biogeoquímicos basados en los principios de conservación, algunas veces es limitado en la precisión de las predicciones.

Tipo de modelo	Ventajas	Desventajas
Modelos basados en individuos o células autómatas	Brinda información de los elementos y propiedades individuales del ecosistema. Hay software disponible para su desarrollo.	Brindan un enfoque reduccionista, son complejos cuando se consideran muchas propiedades. No tienen en cuenta los principios de conservación de la masa y la energía y requieren muchos datos para su calibración y validación.
Modelos espaciales	Brindan un espectro espacial del ecosistema	Requieren una gran base de datos, son difíciles de calibrar y validar y requieren gran gasto computacional. Son complejos.
Modelos eco toxicológicos	Es específico para problemas de eco toxicología, son sencillos de utilizar.	El número de parámetros requeridos es muy amplio, por lo que la incertidumbre es alta.
Modelos estocásticos	Puede considerar aleatoriedad en las funciones, es fácil obtener la incertidumbre haciendo muchas corridas del modelo.	Es necesario conocer el patrón de aleatoriedad de las funciones, es un modelo muy complejo y requiere un gran gasto computacional.
Modelos híbridos	Permiten la combinación de uno o varios modelos de los vistos anteriormente.	Al combinar varios modelos se corre el riesgo de propagar el error inherente a cada uno de ellos

4. OBJETIVOS

4.1. General

Proponer un modelo termodinámico para analizar los procesos de descontaminación en un ecosistema acuático construido tipo laguna facultativa secundaria para biorremediar aguas residuales municipales.

4.2. Específicos

- Implementar un modelo CFD para los procesos físicos de transferencia de energía en un sistema abierto tipo laguna facultativa con superficie libre de agua.
- Llevar a cabo un modelo ecológico para representar el calor de reacción de los procesos de biorremediación de amonificación, nitrificación, fotosíntesis y respiración en el ecosistema acuático construido.
- Validar los modelos CFD y ecológico con datos experimentales tomados en campo.

5. MATERIALES Y METODOS

5.1. Localización del ecosistema acuático construido

La investigación se llevo a cabo en un ecosistema acuático construido tipo laguna facultativa secundaria a escala piloto ubicado en la Estación de Investigación de Aguas Residuales y Reuso del municipio de Ginebra-Valle del Cauca-Colombia. La estación es administrada por la empresa Acuavalle S.A E.S.P. Se encuentra localizada a 3° 43' 50" latitud Norte y 76° 16' 20" longitud Oeste, sobre los 1040 m.s.n.m. La temperatura promedio en el municipio es de 24°C y la precipitación anual promedio es 1280 mm. El caudal promedio de entrada de agua residual al ecosistema es 23.76 m³.día⁻¹. La entrada consta de una cámara de distribución de caudal que lleva el flujo de agua residual hasta una tubería sumergida de 0,0546 m de diámetro. Esta tubería cuenta con una válvula de globo para regular el caudal de entrada al ecosistema. La salida también consiste en un tubo sumergido de PVC de 0,0546 m de diámetro. Ambas tuberías se ubican de forma paralela al lado más largo de la laguna. El área superficial del ecosistema es 83,22 m², la profundidad del agua 1,48 m y el tiempo de retención hidráulico teórico es 3,99 días. La Figura 1, muestra la localización del proyecto.

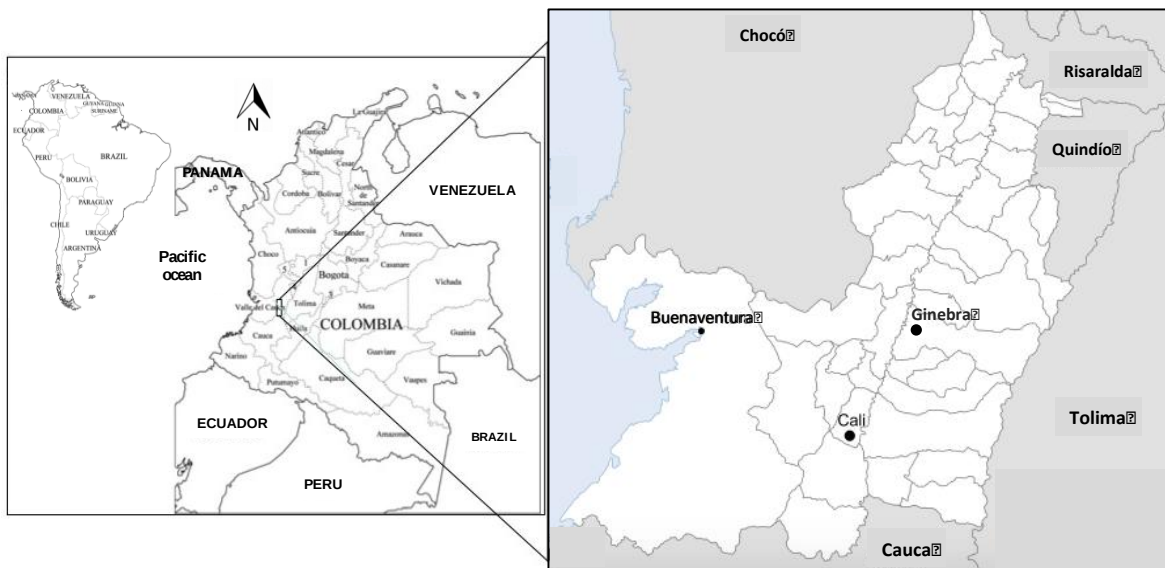


Figura 1. Localización del ecosistema acuático construido tipo laguna facultativa

La Tabla 4 muestra las características de diseño del ecosistema acuático construido tipo laguna facultativa secundaria en configuración convencional usada en esta investigación.

Tabla 4. Características de diseño

Característica	Valor
Flujo ($\text{m}^3.\text{día}^{-1}$)	23.76
Diámetro tubería de entrada (m)	0.0546
Velocidad de entrada ($\text{m}.\text{s}^{-1}$)	0.144
Temperatura promedio ($^{\circ}\text{C}$)	24
Profundidad del agua (m)	1.48
Borde libre (m)	0.15
Ancho del espejo de agua (m)	5.70
Longitud del espejo de agua (m)	14.60
Pendiente l:z v:h	1:1
Volumen (m^3)	93.36
Tiempo de retención hidráulico teórico (días)	3.99
Área del espejo de agua (m^2)	83.22
Concentración DBO entrada ($\text{mg}.\text{l}^{-1}$)*	115.80
Carga aplicada ($\text{kg DBO}.\text{Ha}^{-1}.\text{d}^{-1}$)	279

*Afluente que proviene de una laguna anaerobia

Las caras internas de la laguna fueron impermeabilizadas recubriéndolas con una geomembrana de polietileno de baja densidad. El tratamiento primario consistió en una laguna anaerobia, la cual recibe un caudal de $19 \text{ l}.\text{s}^{-1}$. Una parte del efluente de esta laguna es utilizado para alimentar el sistema experimental.

5.2. Variables meteorológicas de interés

Las variables meteorológicas se midieron utilizando una estación Precision Weather Station Davis Vantage Pro2 Plus, fabricada por Davis Instruments Corporation, California-USA. La estación fue instalada a 1.5m de distancia del

ecosistema a una elevación de 4m. Las variables meteorológicas medidas in situ se relacionan en la Tabla 5.

Tabla 5. Variables meteorológicas medidas

Variable	Unidades
Temperatura	°C
Radiación Solar	W.m ⁻²
Energía Solar	W.m ⁻²
Humedad Relativa	%
Velocidad y dirección del viento	m.s ⁻¹

5.3. Variables Físico-químicas

Se realizó un muestreo dirigido. Un total de 12 variables fisicoquímicas fueron medidas en el afluente, el efluente y tres puntos al interior de la laguna. Los tres puntos se localizaron en la diagonal de flujo entrada-salida a $L/3$ (P1); $L/2$ (P2) y $2L/3$ (P3), donde L es la longitud del lado más largo del ecosistema. En los puntos $L/3$ y $2L/3$ las muestras fueron tomadas a dos profundidades, (0.05 y 0.45m) y se complementaron con la base de datos del proyecto “Innovación Mediante Modelación Hidrodinámica y Ecológica de Lagunas Facultativas Secundarias para la Reducción de la Contaminación Hídrica por Aguas Residuales Municipales en Zonas Tropicales”. Por su parte, en el punto $L/2$, se tomaron a tres profundidades (0.05, 0.45 y 1.40m). Las muestras fueron colectadas a las 6:30 am, 1:00 pm y 9:00 pm. El caudal de entrada se midió volumétricamente cada hora durante los muestreos y con el uso de la válvula de globo se mantuvo constante a 0.27 L.s⁻¹. La Figura 2 muestra los puntos de muestreo.

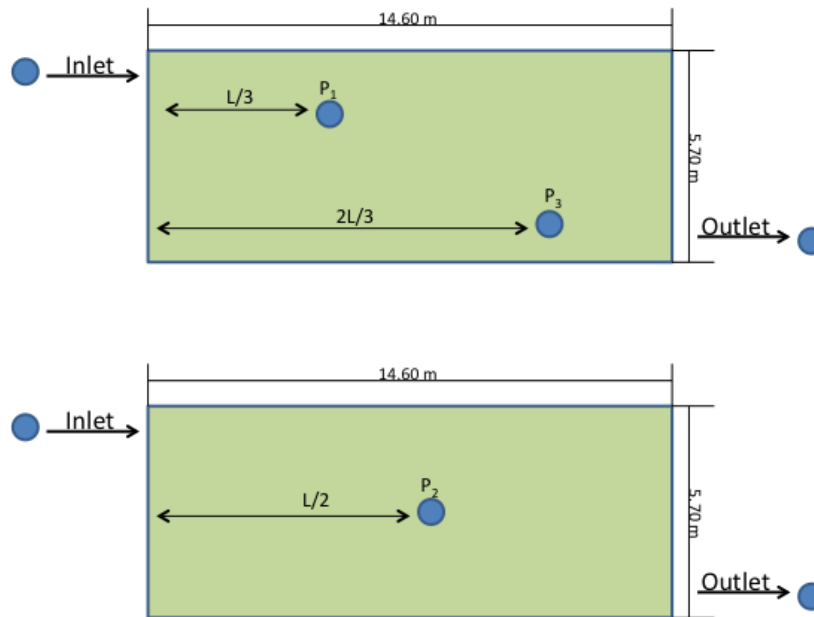


Figura 2. Puntos de muestreo

Las variables pH, oxígeno disuelto (OD) y Temperatura (T) fueron medidas cada hora *in situ* usando un equipo portátil de medición de calidad de agua WTW 3401, manufacturado por Xylem Analytics Germany GmbH & Co. Weilheim Alemania. Las concentraciones de Nitritos, (NO_2^-), Nitratos (NO_3^-), Nitrógeno amoniacal (NH_4^+), Nitrógeno Total (NTK), Demanda Bioquímica de Oxígeno (DBO_5), Demanda Química de Oxígeno (DQO), Sólidos Suspendidos Totales (SST), Clorofila-a y Alcalinidad fueron determinadas en el laboratorio de aguas del Instituto Cinara, siguiendo las metodologías del “Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater, 23rd Edition, (2017)” Ver Tabla 6.

Tabla 6. Variables físico-químicas muestreadas

Variable	Unidades	Método Usado	Referencia del Método Estándar
Flujo	L.s^{-1}	Volumétrico	No Aplica
pH	Unidades	Potenciométrico	SM 4500H
Temperatura	$^{\circ}\text{C}$	Térmico	SM 2550
OD	mg.L^{-1}	Potenciométrico	SM 4500G

Variable	Unidades	Método Usado	Referencia del Método Estándar
ORP	(mV)	Potenciométrico	SM 2580B
DBO total	mg.L ⁻¹	Winkler	SM 5210D
DQO total	mg.L ⁻¹	Digestión	SM5220D
SST	mg.L ⁻¹	Gravimétrico	SM 2540D
NO ₃ ⁻	mg.L ⁻¹	Potenciométrico	SM 4500-NO ₃ D
NTK	mg.L ⁻¹	Kjeldahl	SM 4500-orgB
NH ₄ ⁺	mg.L ⁻¹	Potenciométrico	SM 4500-NH ₃ A
Clorofila a	μg.L ⁻¹	Fluorométrico	SM 10200H
Alcalinidad	(mg CaCO ₃ .L ⁻¹)	Volumétrico	SM 2320B

5.4. Número mínimo de muestras

El número mínimo de muestras fue calculado siguiendo las recomendaciones de Mejías and Jerez (2006). La metodología usada fue “la metodología *t* de student”, con un nivel de confianza del 95% y un error aceptable de $\pm 3\%$. La desviación estándar de cada variable fue calculada con datos de una investigación preliminar realizada por Aponte (2013). El muestreo correspondió a un muestreo dirigido, se tomaron muestras simples dentro de la laguna y compuestas en periodos de tiempo de 3 horas en el afluente y efluente. Cada jornada de muestreo cubrió un periodo de tiempo de 24 horas. Se realizaron 2 jornadas durante un periodo de lluvias y 2 jornadas durante un periodo de intenso verano en el año 2015. El modelo de cálculo de la metodología empleada es:

$$n = \left(\frac{t \cdot s}{e} \right)^2 \quad \text{Ecuación 1. Cálculo del número mínimo de muestras}$$

Donde

n = número mínimo de muestras a tomar

t = valor de *t* de student para un determinado nivel de confianza

s = desviación estándar de cada variable

e = nivel de error aceptable, en este caso $\pm 3\%$

“La metodología t de student” es una de las metodologías más recomendadas y utilizadas para calcular el número mínimo de muestras, esto se debe a que permite un número razonable y representatividad de las muestras con un nivel de error aceptable el cual es seleccionado por el investigador. La Tabla 7 muestra el número de muestras calculadas y tomadas en cada campaña de muestreo.

Tabla 7. Número mínimo de muestras

Parámetro	Desviación estándar usada	Número mínimo de muestras calculada	Número de muestras tomadas
Flujo	N.A	Medición in situ	Medición in situ
pH	0,41	Medición in situ	Medición in situ
Temperatura	2,84	Medición in situ	Medición in situ
OD	0,79	Medición in situ	Medición in situ
ORP	N.A	Medición in situ	Medición in situ
DBO total	4,00	8	13
DQO total	4,00	8	13
SST	5,00	12	13
NO ₃ ⁻	4,30	9	13
NTK	3,30	6	13
NH ₄ ⁺	5,20	13	13
Clorofila a	4,00	8	13
Alcalinidad	3,25	6	13

5.5. Variables microbiológicas

5.5.1 Composición, Estructura y diversidad de las comunidades microbianas

La toma de las muestras microbiológicas para evaluar la composición, estructura y diversidad de las comunidades microbianas presentes en la LF, correspondió a un

muestreo dirigido. Se tomaron 8 muestras simples en el punto $L/2$, a las mismas profundidades, horarios y jornadas de las variables fisicoquímicas. Se usó un recipiente de acero inoxidable (bala de muestreo) y botellas de vidrio esterilizadas. Las muestras fueron rotuladas y trasladadas a temperatura ambiente al Laboratorio de Microbiología y Biotecnología Ambiental de la Universidad del Valle. Ver Figura 3.

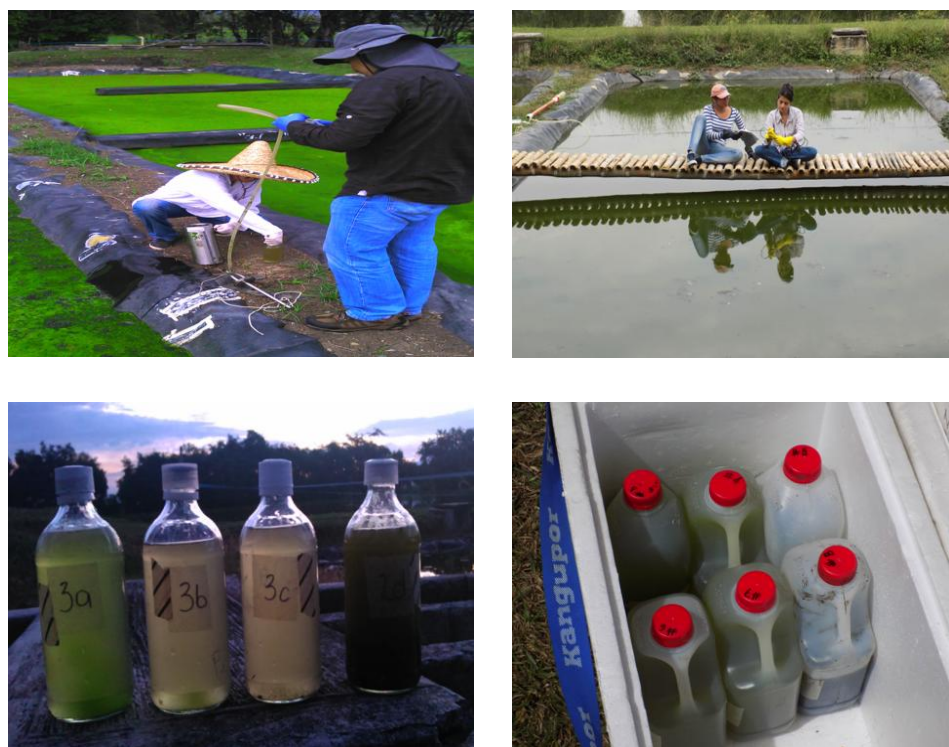


Figura 3. Toma de muestras microbiológicas

5.5.2 Análisis dependientes de cultivo: técnica de recuento en placa en medios de cultivo selectivo

Este punto de la investigación se desarrolló con el apoyo de la estudiante de Maestría en Ingeniería énfasis Sanitaria y Ambiental, Sara Victoria Morales en el marco de su tesis de maestría *“Evaluación de la transformación ecológica de amonio en una laguna facultativa para el tratamiento de agua residual doméstica”*. Se determinó la densidad de cuatro grupos funcionales de microorganismos vinculados a los procesos de transformación del nitrógeno. Estos incluyeron

microorganismos fijadores de nitrógeno, nitrificantes autotróficos, nitrificantes mixotróficos y heterótrofos. Estos grupos se determinaron implementando la técnica de recuento en placa en medios de cultivo selectivo. Las muestras fueron sembradas por duplicado en cada medio a partir de la siembra de las diluciones 10^{-3} , 10^{-4} , y 10^{-6} . Los recuentos de cada grupo fueron realizados de acuerdo a los tiempos de incubación propuestos por (Pérez-Peláez, Peña, and Sanabria 2011).

5.5.3 Análisis independientes de cultivo: técnica de electroforesis horizontal en geles de agarosa: DGGE

De las muestras microbiológicas simples tomadas en el punto $L/2$, se conformaron muestras compuestas. El criterio para componer las muestras fue la profundidad en la que fueron tomadas haciendo la composición con alícuotas de 300 ml. A partir de las muestras compuestas se realizaron extracciones de ADN utilizando el paquete de reactivos Power Water DNA Isolation Kit (MO BIO Laboratories, Inc.), California-USA. La visualización de ADN se realizó mediante la técnica de electroforesis horizontal en geles de agarosa de 1.6% en regulador TAE 1X y tinción con bromuro de etilo. Adicionalmente, se realizó la cuantificación del ADN usando un equipo Nanodrop 2000, fabricado por Thermo Fisher Scientific, Massachusetts, USA. Al ADN extraído se le aplicó la técnica de Electroforesis en Gel con Gradiente de Desnaturalización (DGGE) para bacterias generales. Se realizó una PCR anidada a partir de los productos de la PCR convencional con el objetivo de unir la cadena de GC a los productos. Se implementó la combinación de cebadores PolF-GC/PolR. Las reacciones se llevaron a cabo en un termociclador Multigene fabricado por Labnet International inc, New York, USA. Posteriormente, se seleccionaron 4 muestras de ADN las cuales fueron enviadas a secuenciar a la empresa Mr DNA Lab, Texas, USA. Donde se realizó la secuenciación del gen 16S utilizando la técnica Illumina®.

5.6. Análisis estadístico de las bases de datos.

Se realizó un análisis descriptivo de las bases de datos de las variables fisicoquímicas. Se calcularon medidas de tendencia central, media, (Prom.), máximos (Max.), mínimos (Mín.) y cuartiles. así mismo, medidas de dispersión como la desviación estándar (Desv. Est.) y el coeficiente de variación (Coef. Var). Luego, se aplicó la prueba de Shapiro-Wilks ($n < 30$) para determinar si existía o no normalidad en las variables. Posteriormente, las mediciones de cada variable se agruparon por sus respectivas longitudes y profundidades a las que fueron tomadas. Se comparó si existían o no diferencias significativas transversal (profundidad) y longitudinalmente (dirección entrada-salida). Para esto se evaluaron las diferencias entre medias usando las pruebas Kruskal-Wallis ($n > 5$) y U de Mann-Whitney ($n < 20$) y de desviaciones estándar con el test de Levene. (Ver anexos 1 y 2). Todas las pruebas estadísticas fueron implementadas a un nivel de significancia de 0.05. Los análisis se realizaron utilizando el software estadístico R.

5.7. Descripción de los estudios

5.7.1 Estudios de trazadores

Varios estudios en los que se caracteriza el comportamiento hidrodinámico del fluido en LFs, han sido validados con estudios de trazadores, (Aponte, 2013; Alvarado, Vedantan et al., 2012; A. Shilton, 2001). Por tal razón, para la validación del comportamiento hidrodinámico del fluido, se utilizaron dos estudios de trazadores. Estos estudios fueron obtenidos de una investigación previa realizada en esta laguna facultativa, fueron utilizados gracias a que durante el desarrollo de esta investigación se replicó el valor del caudal de entrada usado en los ensayos de trazadores. Se usó Rodamina WT, (RTW) como trazador y la metodología fue desarrollada por Aponte (2013). En esta metodología se utilizó la técnica de estímulo respuesta. Para ello, 3.8 g de trazador fueron mezclados en un litro de agua provenientes de la laguna. Esto se hizo para asegurar que la solución de trazador y el agua de laguna estuvieran a la misma temperatura, (Broughton &

Shilton 2012). La solución fue adicionada a la entrada en forma de pulso. Se utilizó la fluorescencia como técnica de detección con un fluorómetro Turner M 8000 – 010, fabricado por Turner Desings, California-USA. El fluorómetro tuvo un rango de detección lineal entre $0.4 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ and $300 \mu\text{g}\cdot\text{kg}^{-1}$ a longitudes de onda de 550 nm y 570 nm, respectivamente. Los datos de estos estudios se presentan en el anexo 3. Los estudios de trazadores fueron utilizados para validar el campo hidrodinámico de los modelos CFD, comparándolos con la inyección del trazador en los modelos, un modelo monofásico que solo incluyo agua residual y otro bifásico el cual incluyo el transporte de sólidos suspendidos desde la entrada del ecosistema.

5.7.2 Datos experimentales de temperatura

El perfil de temperaturas para la validación del componente de energía se determino experimentalmente según lo recomendado por Tay, Bruno and Belusko, (2012). Para ello, se colocaron 7 sensores en el interior de la laguna y uno en el efluente. Los 7 sensores fueron ubicados en los puntos P1, P2 y P3 y sus respectivas profundidades (0.05m, 0.45m y 1.40m). La captura de los datos se realizó en intervalos de tiempo de 3 minutos durante cada jornada de muestreo de 24 horas. Los sensores fueron de la referencia DS1722 con SPI/3-Wire Interface, fabricados por Dallas Semiconductor, Texas-USA, con capacidad para medir temperaturas en el rango de -55°C a 120°C , con una precisión de $\pm 0.10^{\circ}\text{C}$ y una resolución de 0.0625°C .

5.8. Características del modelo CFD

Se desarrollaron dos modelos CFD tridimensionales usando el software ANSYS Inc. Fluent® (V.16.1) en una estación de trabajo Dell Precision TX3500 procesador Intel® Xeon® X3470 (8MB Caché, 2.93GHz,Turbo, HT), para analizar la transferencia de energía y el fenómeno de transporte de sólidos, en una laguna facultativa secundaria usada para biorremediar aguas residuales municipales. Se empleo el método de volúmenes finitos dividiendo el dominio computacional en

161890 elementos hexagonales, usando el software Ansys Inc® ICEM CFD™ meshing software (V.16.0).

5.8.1 Dominio del modelo (geometría)

Para cada modelo CFD se desarrolló una geometría 3D, la cual fue diseñada de acuerdo a las dimensiones del ecosistema acuático construido a escala real. Inicialmente, fueron construidas dos geometrías, la primera estuvo conformada por 5 cuerpos (entrada, salida y tres cuerpos internos con dos interfaces), esta geometría presento errores en la malla con elementos penetrantes en cada interface. Los elementos penetrantes son elementos de la malla que penetran desde un cuerpo a otro de la geometría afectando los resultados finales de la simulación. Por esta razón, se construyó una segunda geometría (Figura 4) con un solo cuerpo en la que los bloques fueron divididos hasta conformar la geometría requerida. Esta segunda geometría representa el dominio computacional del modelo, con la cual se obtuvo una malla sin la presencia de elementos penetrantes. Por tal razón, fue usada en las pruebas de malla y en las simulaciones posteriores. La geometría presentó 16 caras, 20 lados y 8 vértices. Un volumen de 93.36 m^3 y un área total de 199.13 m^2 , fue construida usando el software ANSYS Desing Modeller® by Ansys Inc versión 16.1.

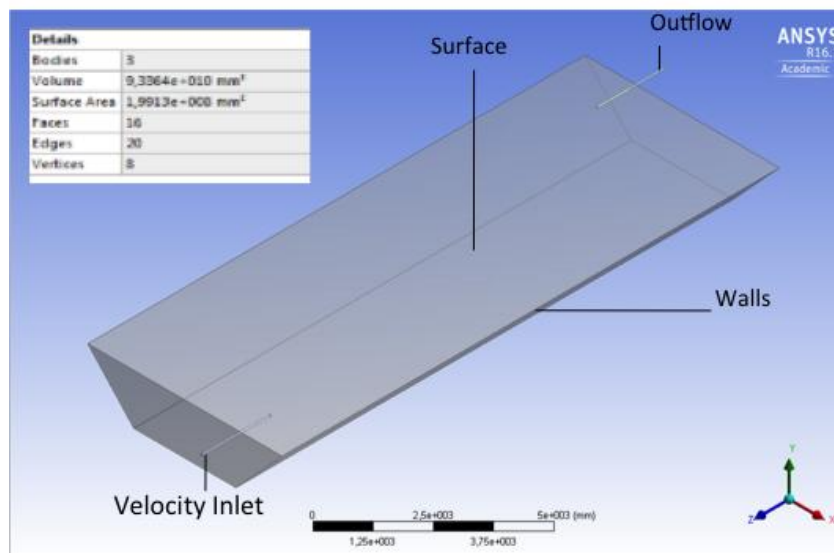


Figura 4. Vista 3D de la geometría del ecosistema acuático

5.8.2 Descripción de la malla

Se construyeron tres mallas no estructuradas utilizando el método de volúmenes finitos. Para esto, se dividió el dominio computacional (geometría) en 16452 elementos para la malla gruesa (malla 1), 161890 para la malla mediana (malla 2) y 276470 para la malla fina (malla 3). Se generaron elementos hexaédricos, usando el software ICEM CFD™ meshing software by Ansys Inc® version 16.1. El tamaño de los elementos de cada malla fue 0.5, 0.05 y 0.025 m respectivamente. Se emplearon dos criterios para definir la calidad de los elementos que conformaron las mallas. El método por determinantes ($3 \times 3 \times 3$) y del ángulo interno. El método del determinante, computa la deformación de los elementos calculando el Jacobiano de cada hexaedro y, normalizando el determinante de la matriz. Un valor de 1 representa un cubo hexaédrico perfecto, mientras un valor de 0 es un cubo totalmente invertido con un volumen negativo. En general, un valor de 0.3 para el determinante, es aceptable. El método del ángulo interno verifica el máximo ángulo interno de los hexaedros y lo compara con el ángulo de 90° , (hexaedro perfecto). Entre más pequeños sean los ángulos internos menor será la precisión de la solución. En general, ángulos internos superiores a 9° son aceptables. La Figura 5 muestra las mallas y la calidad asociada a los elementos que las componen.

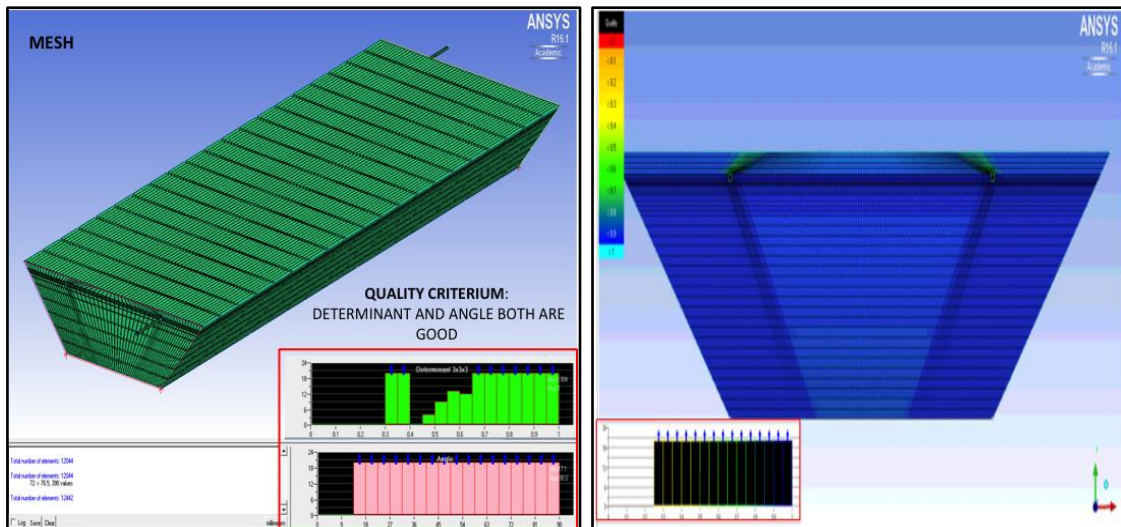


Figura 5. Vista 3D de las mallas y criterios de calidad, izquierda 16452, derecha 161890

La Tabla 8, muestra el número de elementos de la malla y la calidad asociada a cada uno de ellos. La calidad fue calculada con el método del determinante.

5.8.1 Pruebas de independencia de malla para el modelo CFD

Para la prueba de independencia de mallas se calcularon tres soluciones. En cada una se emplearon mallas de diferentes tamaños con el propósito de verificar que la solución de las ecuaciones del modelo no depende del tamaño y número de elementos de la malla. Así mismo, para encontrar la malla óptima en términos de tiempo y recursos computacionales. El número de elementos de cada malla se muestra en la Tabla 8.

Tabla 8. Cantidad y calidad de los elementos por el método del determinante 3x3x3.

Calidad	Malla 1		Malla 2		Malla 3	
	0.5m		0.05m		0.025	
	Cantidad	Porcentaje	Cantidad	Porcentaje	Cantidad	Porcentaje
0.95-1.00	4332	26.40	76036	44.15	181089	65.50
0.90-0.95	1032	6.10	14481	8.88	43682	15.80
0.85-0.90	1285	7.83	11414	7.00	27647	10.00
0.80-0.85	4693	28.58	30228	18.53	14515	5.25
0.75-0.80	2787	16.97	18554	11.37	4147	1.50
0.70-0.75	1741	10.60	12327	7.56	4147	1.50
0.65-0.70	74	0.45	654	0.40	415	0.15
0.60-0.65	83	0.51	500	0.31	276	0.10
0.55-0.60	32	0.20	385	0.24	276	0.10
0.50-0.55	42	0.25	396	0.24	276	0.10
0.45-0.50	46	0.27	665	0.41	0	0
0.40-0.45	42	0.26	485	0.30	0	0
0.35-0.40	106	0.62	475	0.29	0	0
0.30-0.35	129	0.78	462	0.28	0	0
0.25-0.30	28	0.17	90	0.10	0	0
Total	16452	100	161890	100	276470	100

5.8.2 Condiciones de frontera

Para la entrada se utilizó la condición de frontera **“Velocity Inlet”** que establece velocidades vectoriales y propiedades escalares del fluido en la entrada de flujo al ecosistema. Es utilizada cuando se conocen los perfiles de velocidad del fluido. En la salida, inicialmente se utilizó la frontera **“Outflow”**, que se usa cuando se tienen fluidos incompresibles con velocidades y campos de presión desconocidos. Esta condición de frontera proporciona una solución temporal para el campo de flujo intermedio, se asume la difusividad del fluido como cero y el balance de masa total es correcto. Posteriormente, cuando se acopló el modelo Euleriano para simular los sólidos suspendidos, esta condición se cambio a **“Pressure Outlet”**, debido a que el acople del modelo Euleriano con la condición de frontera **“Outflow”** no es compatible. **“Pressure Outlet”** simula los campos de presión, por lo que permite calcular el flux de masa si se conoce la caída de presión estática en la salida. Para las paredes se utilizó la frontera **“Wall-Temperature”** que simula condiciones de frontera sólidas en fluidos viscosos, permite calcular el flux de calor y velocidades tangenciales y adopta velocidades normales igual a cero. Favorece simular una condición de fuerza cortante sobre la superficie de las paredes. En la superficie, se utilizó la condición de frontera **“Mixed”** la cual permite simular el efecto del viento en la superficie y la penetración de radiación solar incidente. La Tabla 9, muestra los valores de las condiciones de frontera utilizados.

Tabla 9. Valores de las condiciones de frontera empleadas

Zona	Tipo de frontera	Valor	Unidades	Observaciones
Entrada	Velocity inlet	0.115	m.s ⁻¹	Intensidad de Turbulencia = 5.29% Dh = 0.0546 m Re = 5822 I = 0.054 k = 5.78 e-5 ε = 8.00 e-6 Conc.: (escalar) 0,041% P/V, UDF

Zona	Tipo de frontera	Valor	Unidades	Observaciones
Salida	Outflow	1.0 Fracción	N.A	Posteriormente se cambio a “pressure outlet” Intensidad de turbulencia = 7.29% Re = 506 I = 0.073 k = 8.00 e-7 ε = 1.00 e-8
Zona	Tipo de frontera	Valor	Unidades	Observaciones
Pared superior	Mixed (Temperature)	---	N.A	Corresponde a la superficie de la laguna. Transparente. Velocidad media del viento: 0.81 m.s ⁻¹
Paredes laterales	Wall (Temperature)	---	N.A	Suelo – Polietileno de baja densidad
Paredes entrada	Wall (Temperature)	---	N.A	Policloruro de vinilo
Paredes salida	Wall (Temperature)	---	N.A	Policloruro de vinilo

* Dh: diámetro hidráulico ; Re: número de Reynolds; I: intensidad de turbulencia; k y ε : parámetros del modelo de turbulencia; Conc.: concentración de sólidos suspendidos

Para los sólidos suspendidos, se utilizaron dos concentraciones. El valor promedio de los datos experimentales medidos en un periodo de 2 años y la distribución de probabilidad de esta serie de datos. Para ello, se programó en lenguaje C++ una Función Definida por el Usuario (UDF), (ver anexo 4). La distribución de probabilidad fue una distribución rectangular con valores máximos y mínimos de 0.00181 y 0.0783 %P/V, respectivamente.

Los parámetros de turbulencia para la entrada y la salida fueron calculados con la relación entre la energía cinética (K) y la intensidad de turbulencia (I), tal como se muestra en la siguiente relación:

$$k = \frac{3}{2} (\mu_{avg} I)^2$$

Ecuación 2. Relación entre k e I

Donde

μ_{avg} es la velocidad media del fluido (m.s⁻¹)

La intensidad de turbulencia (I) se definió con la relación definida a continuación:

$$I = 0.16 (Re_{DH})^{-1/8}$$

Ecuación 3. Intensidad de turbulencia

Donde

Re corresponde al número de Reynolds (adimensional)

En este caso, intensidades de turbulencia iguales a 1% o menores, son consideradas bajas, mientras intensidades de turbulencia mayores a 10% se consideran altas, (ANSYS, 2013). Finalmente, la tasa de disipación de energía se determinó con la relación que se muestra a continuación:

$$\varepsilon = \frac{k^{3/2}}{I}$$

Ecuación 4. Tasa de disipación de energía

5.8.3 Propiedades de los materiales

En este punto se determinaron las propiedades físicas del fluido (agua residual), de la fase discreta (sólidos suspendidos), las paredes de la laguna (suelo y geomembrana) y las paredes de las tuberías (PVC) de acuerdo a los modelos usados. Los siguientes valores fueron asignados al fluido:

Densidad del agua residual (δ) 1020 kg.m⁻³, capacidad calorífica (Cp) 4094 J.kg⁻¹.K⁻¹, (Stafford, Hawkes, and Horton 1981). Los valores para la conductividad

térmica (λ) y la viscosidad del fluido (ν) fueron $0.44 \text{ W.m}^{-1}\text{K}^{-1}$ (Peterson, Harris and Wadhwa, 2000) and $0.0011 \text{ kg.m}^{-1}\text{s}^{-1}$ (Environmental Protection Agency USEPA, 1995), respectivamente. Coeficiente de absorción 0.00886 m^{-1} y coeficiente de dispersión 1.33 m^{-1} , (Kirk, 2007; Leal, Esteves and Santos, 2013; Pandey *et al.*, 2015). La temperatura y presión de referencia para las propiedades del fluido fueron 25°C y 1atm .

Las propiedades de las paredes (suelo circundante) fueron las siguientes: Densidad (δ) 2650 kg.m^{-3} , capacidad calorífica (C_p) $1585 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$, (Evet *et al.*, 2012; Colaizzi *et al.*, 2016) y conductividad térmica (λ) $1.02 \text{ W.m}^{-1}\text{K}^{-1}$ (García-Ocampo, 2003; Rojas, Madero and Ramirez, 2009).

Las propiedades de la fase discreta (sólidos suspendidos) fueron: densidad (δ) 1150 kg.m^{-3} , (Huggins, Piedrahita and Rumsey, 2004), calor específico $12.4 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$, (Shizas and Bagley, 2004), mientras que la distribución del diámetro de las partículas estuvo caracterizado por: mínimo $1\text{e-}5 \text{ m}$, promedio $5\text{e-}5 \text{ m}$ y máximo $8\text{e-}5\text{m}$, (Pevere *et al.*, 2006). Las propiedades de la fase discreta correspondieron a caracterizaciones realizadas en agua residual doméstica.

Las tuberías de entrada y salida al ecosistema consistieron en dos tramos de 2m cada uno de policloruro de vinilo (PVC), por lo que las propiedades de las paredes de estas fueron: densidad (δ) 1420 kg.m^{-3} , capacidad calorífica (C_p) $1250 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$, y la conductividad térmica (λ) $0.19 \text{ W.m}^{-1}\text{K}^{-1}$. Los datos fueron tomados de la página web del fabricante, (Plasticbages 2017).

Finalmente, el área interna de la laguna se recubrió con una geomembrana de polietileno de baja densidad cuyas propiedades físicas fueron: densidad (δ) 925 kg.m^{-3} , capacidad calorífica (C_p) $2300 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$, y la conductividad térmica (λ) $0.33 \text{ W.m}^{-1}\text{K}^{-1}$. Los datos fueron tomados de la página web de la Universidad de Barcelona-España, (Universitat de Barcelona, 2017).

5.8.4 Ecuaciones gobernantes

La construcción del modelo CFD se basó en las ecuaciones de Navier-Stokes resueltas en estado transitorio para el fluido y la fase dispersa. Se utilizaron las ecuaciones de continuidad, momento, turbulencia, energía y radiación (Radiative Transfer Equation, RTE) desarrolladas en tres dimensiones. El modelo y sus ecuaciones tuvieron un enfoque multifásico Euleriano debido a que ofrecía resultados aceptables al compararlos con datos experimentales y un menor gasto (45%) de recursos computacionales que el enfoque Lagrangiano.

5.8.4.1 Ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \delta_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \delta_q \vec{V}_q) = \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) + S_q \quad \text{Ecuación 5. Continuidad}$$

Donde:

$\vec{V}_q$ = Representa la velocidad de la fase q [m.s⁻¹]

$\dot{m}_{pq}$ = Caracteriza la transferencia de masa desde la fase p^{th} a q^{th} [kg.s⁻¹]

$\dot{m}_{qp}$ = Representa la transferencia de masa desde la fase q^{th} a p^{th} [kg.s⁻¹]

S_q = Representa un término fuente que por defecto es igual a cero, pero de acuerdo a las características del modelo puede ser especificado como una constante (fuente de masa) para cada una de las fases.

δ_q = Densidad de la fase q [kg.m⁻³]

$\dot{m}$ = Flujo másico entre fases [kg.s⁻¹]

5.8.4.2 Ecuación de momento

La ecuación de momento en tres dimensiones es derivada de la segunda ley de Newton que establece que el cambio de momento de una partícula en un fluido es

igual a la suma de las fuerzas que actúan sobre la partícula. Estas pueden ser fuerzas de superficie (presión, viscosidad, gravedad) y fuerzas de cuerpo.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F}$$

Ecuación 6. Momento

Donde:

p = Es la presión estática [Pa]

$\bar{\tau}$ = Es el tensor de tensiones [Pa]

$\vec{v}$ = Es la velocidad [m.s^{-1}]

$\vec{g}$ = Es la fuerza gravitacional [m.s^{-2}]

ρ = Es la densidad [kg.m^{-3}]

$\vec{F}$ = Fuerzas externas aplicadas [N]

Finalmente el tensor de tensiones en el fluido viene dado por

$$\bar{\tau} = \mu \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right]$$

Ecuación 7. Tensor del fluido

En la cual,

μ = Es la viscosidad molecular [Pa.s^{-1}]

I = Es la unidad de tensión, mientras el segundo término del lado derecho es el efecto de la dilatación en el volumen (m^3)

5.8.4.3 Modelo de turbulencia

Las ecuaciones del modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ *Realizable* para k y ε son:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k$$

Ecuación 8. k

y,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \varepsilon u_j) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S \varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b \\ + S_\varepsilon \end{aligned} \quad \text{Ecuación 9. } \varepsilon$$

Donde:

$$C_1 = \max \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right], \eta = S \frac{k}{\varepsilon}, S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}}$$

k = Es la energía cinética [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$]

ε = Es la tasa de disipación de la turbulencia [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-3}$]

G_k = Representa la generación de energía cinética turbulenta debida a los gradientes de velocidad [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$]

G_b = Es la generación de energía cinética turbulenta por flotabilidad [$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$]

Y_m = Es la contribución de la dilatación en fluidos compresibles

$C_{1\varepsilon}, C_2$ = Son constantes

$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$ = Son los números de prandtl turbulentos para k y ε respectivamente.

S_k, S_ε = Son terminos fuente para k y ε respectivamente.

5.8.4.4 Ecuación de la conservación de la energía

La conservación de la energía se describió utilizando la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v} (\rho E + p)) = \nabla \cdot \left(k_{eff} \nabla T - \sum_j^n h_j \vec{J}_j + (\vec{\tau}_{eff} \cdot \vec{v}) \right) + S_h \quad \text{Ecuación 10. Energía}$$

Donde:

k_{eff} = Es la conductividad efectiva ($k+k_t$, donde k_t es la conductividad térmica debida a la turbulencia del fluido, la cual se define de acuerdo al modelo de turbulencia usado, $k-\varepsilon$ *Realizable*) [$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$]

$\vec{J}_j$ = Es el flux de diffusion de calor de la especie j [W.m^{-2}]

p = Es la presión [Pa]

ρ = Es la densidad [kg.m^{-3}]

h_j = Es la entalpia de la especie j [J]

En general, los tres primeros términos del lado derecho representan la transferencia de energía debida a la conducción, difusión de especies y disipación viscosa. S_h incluye el calor de reacción y cualquier otra fuente de calor en el volumen de control que haya sido definida previamente.

En la ecuación de energía,

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2}$$

En la cual la entalpía (h) para un flujo incompresible se define como:

$$h = \sum_j Y_j h_j + \frac{p}{\rho} \quad \textbf{Ecuación 11. Entalpia para flujo incompresible}$$

Donde:

Y_j Es la fracción másica de la especie j y,

$$h_j = \int_{T_{ref}}^T C_{pj} dT$$

El valor usado para T_{ref} en el calculo del calor sensible depende del modelo y “solver” utilizado, en este caso para el “pressure-based solver” T_{ref} fue 298.15 K.

5.8.4.5 Modelo de radiación

La RTE acoplada con el “solar load model” fue la ecuación utilizada para describir la transferencia de calor por radiación solar en la laguna facultativa. Esta incluye los fenómenos de dispersión, absorción y emisión del medio, que en este caso está conformado por el agua residual y los sólidos suspendidos. La RTE se puede escribir como se muestra en la ecuación 9.

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + (k + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = kn^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega \quad \text{Ecuación 12. RTE}$$

Donde:

$\vec{r}$ = Es el vector de posición [m]

$\vec{s}$ = Es el vector de dirección

σ_s = Es el coeficiente de dispersión

T = Es la temperatura del medio [K]

σ = Es la constante de Stefan-Boltzmann (5,669e-8 [W.m⁻².K⁻⁴])

n = Es el índice de refracción

La función de fase $\Phi(\vec{s}, \vec{s}')$ contabiliza la dispersión en la dirección $\vec{s}'$, y la fracción de radiación que es dispersada. La RTE indica que la intensidad depende de la posición en el espacio y la dirección angular. La suma de los coeficientes de absorción y dispersión es frecuentemente llamado coeficiente de extinción.

La ecuación de radiación se acopló con el modelo Solar Load. El cual se caracterizó con los parámetros de la ubicación geográfica de la estación de investigación en Ginebra - Valle del Cauca – Colombia. La zona horaria

correspondió a -5 GMT. La geometría se orientó de acuerdo a las coordenadas geográficas reales de la siguiente manera:

Eje Z = Norte

Eje X = Este

5.9. Escenario de transporte del retardante de llama 2,2',4,4',5 - Pentabromodifenil éter (BDE 99). CASRN 60348-60-9

Se utilizó el modelo CFD bifásico para simular el transporte del retardante de llama BDE 99. Se seleccionó este contaminante debido a que un muestreo exploratorio adicional realizado en la laguna y el posterior ensayo de laboratorio mostró la presencia de este contaminante en el afluente, efluente y el cuerpo de agua y sedimentos de la laguna. En este escenario se incluyó el agua residual, los sólidos suspendidos y el retardante de llama BDE 99. Para el transporte de sólidos en este escenario se usó el enfoque multifásico Euleriano a través del modelo “mixture”. Para el retardante se utilizó el modelo de especies químicas “Species” teniendo como fase principal de la reacción el agua residual. Ambos escenarios fueron acoplados con el fenómeno de difusión desde la entrada de la laguna con una concentración para el retardante de llama de 0.1 %P/V. El transporte en los sedimentos se representó con cinética de pseudo-segundo orden tal como lo proponen Deng and Tam, (2016), ver Ecuación 13:

$$\frac{dq}{dt} = k_2(q_e - q)^2 \quad \textbf{Ecuación 13. Cinética de transporte en sedimentos}$$

Con las condiciones iniciales $q = 0$ a $t = 0$ y $q = q_e$ a $t = t$, se obtiene:

$$\frac{t}{q} = \frac{1}{K_2 q_e^2} + \frac{1}{q_e} t$$

Donde:

K_2 = Es la constante de adsorción [$1.58 \times 10^{-4} \text{ min}^{-1}$]

t = Es el tiempo [min]

q_e = Es la masa inicial de retardante [kg]

q = Es la masa remanente de retardante [kg]

La Tabla 10 presenta las características del escenario simulado para el retardante de llama:

Tabla 10. Características del modelo para el transporte del BDE 99

Escenario	Características			
	Modelo	Condiciones de frontera	Valor	Métodos de solución
ww + SS + BDE 99	“Realizable k-ε” “Mixture” “Species”	Entrada: Velocity Inlet Salida: Pressure outlet	Fracción volumétrica BDE 209: 0.1%P/V	Coupled

ww: agua residual, BDE 99: retardante de llama 209, SS: sólidos suspendidos

5.9.1 Propiedades del Retardante de llama BDE 99

Las propiedades del retardante de llama BDE 99 fueron: densidad 3200 kg.m^{-3} , peso molecular $564.69 \text{ kg.kmol}^{-1}$, (Environmental Protection Agency USEPA, 2010), diámetro de partícula $2.00 \times 10^{-5} \text{ m}$, (Su *et al.*, 2016).

5.9.2 Cuantificación del retardante de llama BDE 99

Para cuantificar la concentración del retardante de llama BDE 99 en la laguna se realizó un estudio exploratorio. Para ello, se tomaron muestras de sólidos suspendidos en el afluente, el efluente y el punto P2. El ensayo de laboratorio se realizó siguiendo la metodología del “método QuEChERS Original modificado”

implementado y validado por la estudiante de maestría Nataly Castro del Grupo de Investigación en Contaminación Ambiental por Metales y Plaguicidas, dirigido por la profesora Martha Isabel Páez, Departamento de Química - Facultad de Ciencias Naturales y Exactas. La cuantificación se realizó en un equipo de cromatografía de gases acoplado con un detector de masas. El equipo correspondió a la referencia TSQ™ 8000 Evo Triple Quadrupole GC-MS/MS, construido por la compañía ThermoFisher Scientific, 168 Third Avenue Waltham, MA, USA. Los límites de detección (LDD) y cuantificación (LDC) fueron 5 y 10 ppb respectivamente.

5.10. Modelo ecológico

Como complemento al modelo CFD, se desarrolló un modelo ecológico del calor de reacción asociado a cuatro procesos de biorremediación. Dos procesos del ciclo del nitrógeno y dos del carbono. Estos fueron: amonificación, nitrificación, fotosíntesis y respiración, respectivamente. Para esto se usó el software Structural Thinking Experimental Learning Laboratory with Animation, Stella by ISEE Systems, Inc.® en una estación de trabajo Dell Precision TX3500 procesador Intel® Xeon® X3470 (8MB Caché, 2.93GHz, Turbo, HT).

Se realizó el balance de materia a una especie química representativa de cada proceso. Para la amonificación se seleccionó el nitrógeno orgánico, para la nitrificación el nitrógeno amoniacal, para la fotosíntesis la biomasa de algas. La respiración se asumió como la relación fotosíntesis/respiración que oscila entre 1.1 y 1.68. La expresión matemática del balance de materia se presenta a continuación:

$$\frac{dM}{dt} = Q_i * [C_i] - Q_e * [C_e] + / - R_c \quad \textbf{Ecuación 14. Expresión de balance de materia}$$

Donde:

$R_c = r_M * V$, donde r_M = es la tasa de transformación de la especie química i, (generación o consumo) $[\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}]$

V = Volumen de la laguna $[\text{m}^3]$

Q = Caudal $[\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}]$

$[C_i]$ = Concentración de la especie i a la entrada $[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$

$[C_e]$ = Concentración de la especie i a la salida $[\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}]$

La selección de cada especie química se realizó basado en la estequiometria de cada proceso. La descripción de los procesos seleccionados se presenta a continuación:

5.10.1 Ciclo del nitrógeno

El modelo conceptual para los procesos del ciclo nitrógeno se muestran en la Figura 6.

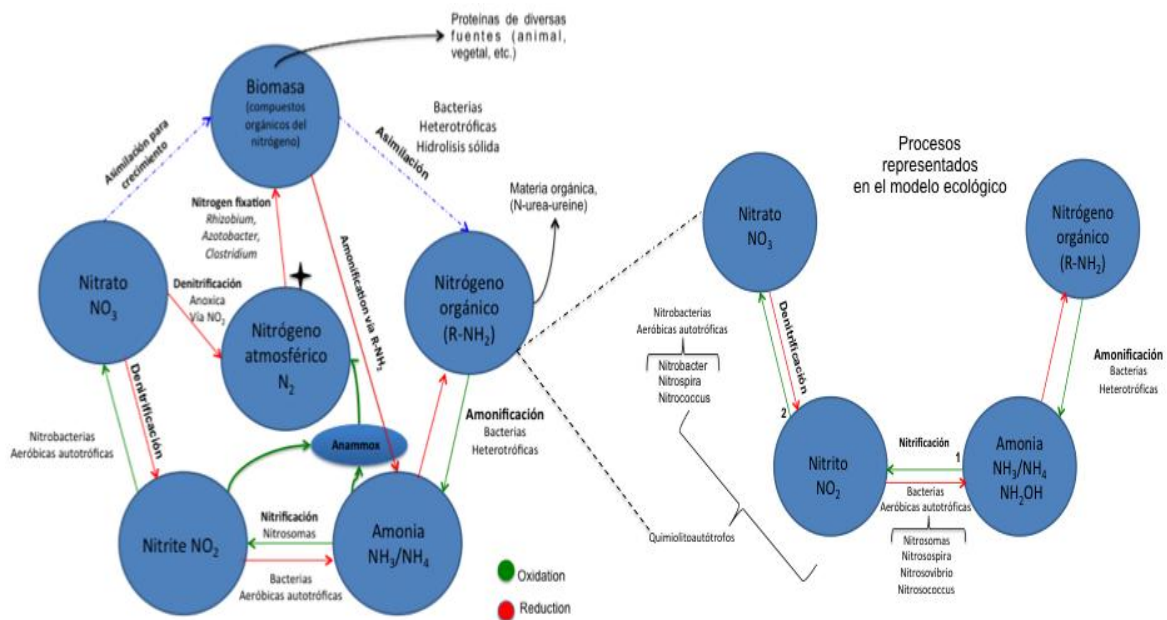
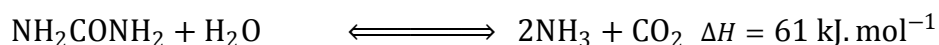


Figura 6. Modelo conceptual para el nitrógeno. Fuente: Warakomski, A., Kempen and Kos, (2007)

5.10.1.1 Amonificación

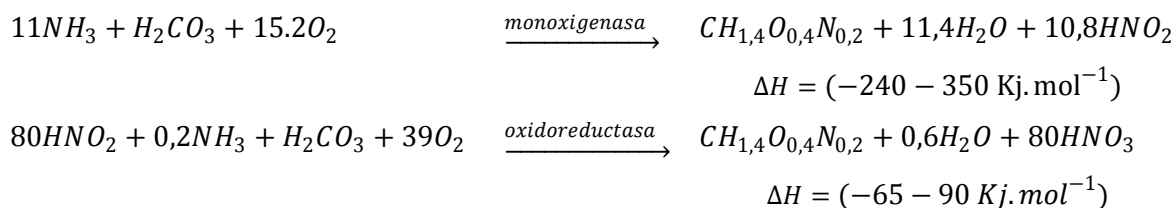
Para efecto de los cálculos estequiométricos, se seleccionó la urea como compuesto para representar el nitrógeno orgánico del proceso de amonificación. De acuerdo con Rahimpour, Mottaghi and Barmaki, (2010), la urea es un compuesto orgánico importante en la composición de las aguas residuales domésticas. La reacción principal de hidrólisis de la urea se presenta a continuación:



Ecuación 15. Estequiometria de la amonificación

5.10.1.2 Nitrificación

Es una conversión aeróbica realizada por los quimiolitóautótrofos que oxidan amonio a nitrato en dos etapas. En la primera el amonio NH_4^+ es oxidado a nitrito (NO_2^-) catalizada con las enzimas monooxigenasa ó hidroxilamina oxidoreductasa vía hidroxilamina. La segunda etapa (nitratación) es catalizada por la enzima nitrato deshidrogenasa y aquí el nitrito es oxidado a nitrato. La estequiometria global para la nitrificación suponiendo la composición de una bacteria promedio como $\text{CH}_{1,4}\text{O}_{0,4}\text{N}_{0,2}$ con el amonio como única fuente de nitrógeno celular (Warakomski, A., Kempen and Kos, 2007), está dada por:



Ecuación 16. Estequiometria de la nitrificación

5.10.2 Ciclo del carbono

El modelo conceptual para los procesos de biorremediación del ciclo del carbono se muestran en la Figura 7.

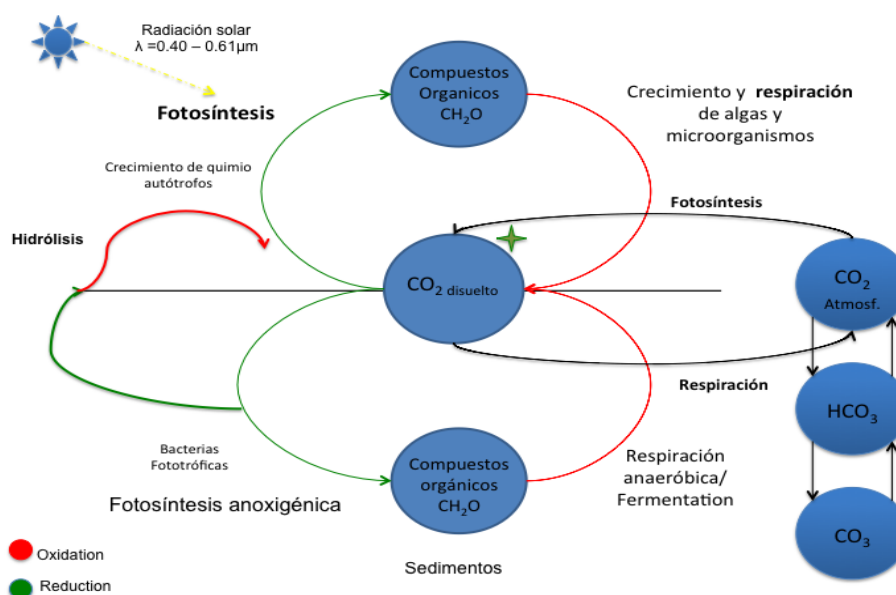
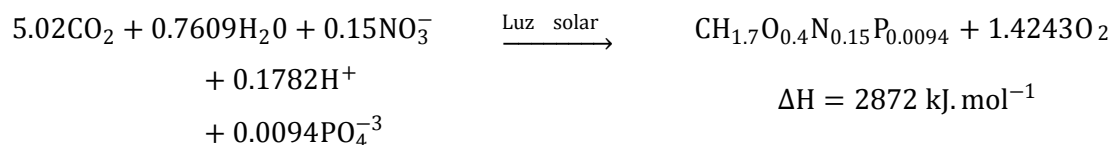


Figura 7. Modelo conceptual para el carbono. Fuente: Kirk, (2007)

5.10.2.1 Fotosíntesis y respiración

Los procesos fotosintéticos se dividen en dos, las reacciones que ocurren durante el día y las reacciones que ocurren en la noche. En general la siguiente ecuación representa la estequiometría del proceso fotosintético, incluyendo la representación de la biomasa de algas, (Muñoz and Guieysse, 2006a):



Ecuación 17. Estequiometria para fotosíntesis

La relación fotosíntesis/respiración oscila entre 1.1 y 1.68 (Wang and Veizer, 2000; Kirk, 2007). En este caso, el proceso fotosintético representado da cuenta de la

producción primaria bruta debido a que se está cuantificando la energía total fijada en la fotosíntesis. De acuerdo a los resultados estadísticos, el modelo conceptual se construyó de forma estratificada respecto a las variables T, OD y pH. Para esto se utilizaron modelos lineales mixtos generalizados.

5.11. Correlaciones entre variables: modelos lineales mixtos generalizados

Para correlacionar las variables del modelo ecológico se utilizaron modelos lineales mixtos generalizados (GLIMMIX). Estos, fueron contruidos siguiendo las recomendaciones de Seoane (2014). Se utilizó una estrategia que describe la relación entre una variable respuesta y una o varias variables explicativas. Los modelos lineales mixtos generalizados (GLIMMIX) son modelos multifactoriales que se utilizan cuando los datos se agrupan en niveles de uno o más factores que los jerarquizan ó los distribuyen en el tiempo o el espacio. Estos permiten tener unos factores o coeficientes fijos y otros aleatorios. En los GLIMMIX, los valores de los factores fijos se conocen de antemano y son definidos de acuerdo al interés del investigador. Por su parte, los aleatorios corresponden a realizaciones de todos los posibles niveles que pueda tener el factor, (Cayuela, 2010). El uso de los modelos lineales mixtos se ha extendido en los últimos años a diversas disciplinas de la biología entre las que se encuentra la ecología. Con estos modelos y gracias a la incorporación de los factores aleatorios se ha intentado dar cuenta de una complejidad de los ecosistemas estudiados más cercana a la realidad. En este caso, para el modelo ecológico se seleccionaron dos factores aleatorios: los puntos P1, P2 y P3 y las profundidades de la laguna en las que se midieron las variables. Estos dos factores fueron seleccionados porque cada punto con sus respectivas profundidades permitieron jerarquizar los datos agrupándolos en niveles y por qué se desconoce el efecto que puedan tener sobre la variable respuesta o variable objetivo del modelo. Entre los factores fijos de los modelos lineales además de las variables físico-químicas se incluyó la hora del día en que se hizo cada medición. Estas, fueron agrupadas en 3 franjas ó categorías

(mañana, tarde y noche) de acuerdo a la radiación solar incidente en cada franja. Los modelos mixtos se construyeron de acuerdo con la siguiente estructura:

$$y_i = X_i\beta + Z_i b_i + \varepsilon_i$$

Ecuación 18. Estructura del modelo lineal mixto

Donde:

y_i : es el vector $n \times 1$ de las observaciones

X_i : es el vector de co-variables explicativas del modelo

β : es el vector de parámetros fijos del modelo, con dimensión $p \times 1$

Z_i : es la matriz de $n_i \times q$ donde la j -ésima fila representa los valores de las variables explicativas asociada a los parámetros aleatorios.

b_i : es el vector $q \times 1$ de parámetros aleatorios específicos de la unidad i

ε_i : es el error aleatorio debido a la i -ésima observación.

Los factores aleatorios y fijos de cada modelo fueron ajustados en distintas versiones del modelo y fueron comparados por medio del criterio de información de Akaike, (AIC), el cual se implementó en el software estadístico R, siguiendo las recomendaciones de Bozdogan (1987). El procedimiento para la selección del modelo con la mejor estructura aleatoria se realizó para la variable de respuesta “oxígeno disuelto”, (OD), luego, este se replicó para las variables restantes: temperatura, pH, clorofila, nitrógeno orgánico, nitrógeno amoniacal, nitrógeno total.

5.11.1 Validación

El modelo ecológico se validó comparando los resultados simulados con los datos experimentales. Para ello se utilizaron diagramas de cajas. Los diagramas incluyeron la media de los datos, los máximos y mínimos y los percentiles al 25% y 75%. Se realizaron simulaciones variando el tiempo de simulación entre 1 y 60 días, el método de integración y el paso temporal entre 0.1 y 2.0 Δt . Al finalizar las simulaciones se encontró que los valores óptimos para la configuración del modelo en Stella® fueron los siguientes: tiempo de simulación: 15 a 30 días, método de integración: Runge-Kutta 4 y el paso temporal 0.5 h.

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

6.1. Resultados estadísticos de la base de datos

Los resultados estadísticos descriptivos se resumen en el anexo 1, (Tabla 35, Tabla 36, Tabla 37). En este anexo se muestran los estadísticos descriptivos de cada parámetro para cada punto y profundidad. Estos incluyen: valor (Min), promedio (Prom), valor máximo (Max), desviación estándar (Desv. Est), coeficiente de variación (Coef. Var) y los resultados de normalidad de la prueba de Shapiro-Wilks. La Tabla 11 muestra las variables que presentaron normalidad en cada punto de la laguna muestreado. El color gris indica normalidad de la variable.

Tabla 11. Normalidad de las variables en cada punto

Variable	Punto		
	P1	P2	P3
Temperatura			
Clor-A			
DQO			
NO ₃ ⁻			
NTK			
NH ₄ ⁺			
Alcalinidad			
SST			

Una vez determinada la normalidad de las variables se aplicaron pruebas no paramétricas para evaluar si existían o no diferencias estadísticamente significativas en las variables en cada punto y profundidad muestreadas. Se aplicaron las pruebas no paramétricas U-Mann-y-Whitney y Test de Levene para comparar rangos y varianzas (homocedasticidad) respectivamente. Estas fueron aplicadas a las mediciones de los puntos P1 y P3. La prueba Kruskal Wallis se aplicó a los datos del punto P2.

En el anexo 2, (Tabla 38, Tabla 39, Tabla 40, Tabla 41 y Tabla 42) se presentan los resultados de la estadística comparativa.

6.1.1 Variables físicas y variable bioquímica: pH, temperatura, OD, ORP y Clor-a

Las variables pH, temperatura, oxígeno disuelto, ORP y Clor-a presentaron sus valores más altos en la profundidad 1 (0,05m) de cada punto evaluado. Estos resultados son los esperados para este tipo de ecosistemas acuáticos debido a que en la capa superficial (zona fótica del ecosistema), que en este caso osciló entre los 0.10 y 0.15m de profundidad, se encuentra la mayor población de algas en actividad durante el día. Se ha demostrado que la fijación de CO₂ a través de los procesos fotosintéticos incrementa y produce variaciones en parámetros como el pH, el ORP, el oxígeno disuelto y la clorofila-a en la columna de agua, (Sukias *et al.*, 2001). En la fotosíntesis, las algas desempeñan su rol como productores primarios lo que las convierte en los organismos que sustentan la red trófica en las lagunas facultativas secundarias, (Arauzo *et al.*, 2000). En lo que se conoce como reacciones de la fase luminosa, las algas y en algunos casos microorganismos como las bacterias fotosintéticas verdes y las bacterias fotosintéticas purpuras, absorben luz a 670-685 nm, 735-755nm y 850-1000 nm respectivamente para obtener energía química en forma de moléculas de adenosín trifosfato (ATP) y nicotinamida adenina dinucleótico fosfato (NADPH). Estas se obtienen a partir de la disociación de moléculas de agua liberando oxígeno e hidrógeno y, gracias a la eutrofización típica de estos ecosistemas acuáticos, la disponibilidad de nutrientes como el fósforo y el nitrógeno no es una limitante para este proceso. Además, fenómenos físicos como el intercambio gaseoso en la interface aire-agua favorecen el incremento de la concentración de gases disueltos como el oxígeno y coadyuvan al incremento y las variaciones de este importante parámetro (Beran and Kargi, 2005).

Durante las reacciones de la fase oscura, es decir, en ausencia de luz solar, las algas respiran produciendo dióxido de carbono y agua. En este periodo utilizan las moléculas de ATP y NADPH como fuente de energía para transformar CO_2 en moléculas más complejas como la glucosa, (S. Kayombo *et al.*, 2002; Kirk, 2007). Durante la fotosíntesis, las algas utilizan el dióxido de carbono producido en la oxidación de la materia orgánica, la cual es llevada a cabo por microorganismos como las bacterias y los hongos, a una velocidad mayor a la que estos lo producen. En este caso, las algas toman el CO_2 de la reversión de carbonatos a bicarbonatos y CO_2 generando variaciones en el pH, (Willford and Middlebrooks, 1997).

Por otra parte, se ha demostrado que el proceso de fotosíntesis no absorbe toda la energía solar incidente sobre el cuerpo de agua. Se estima que la eficiencia de conversión de la luz solar en la fotosíntesis varía entre el 2% y el 9%, (Madigan, Martinko and Parker, 2010). Una parte de la energía restante es absorbida por el cuerpo de agua y otra reflejada. En el cuerpo de agua de la laguna, la radiación solar es absorbida por las moléculas de agua y por la materia orgánica disuelta, también llamada materia amarilla o sustancias húmicas, (Curtis *et al.*, 1994). En las moléculas de agua la radiación absorbida produce cambios en la energía rotacional, vibracional y electrónica. Posteriormente, esta energía es disipada en forma de calor, lo que se traduce en un incremento de la temperatura del cuerpo agua, principalmente en la zona fótica, que es la región de mayor penetración de la radiación solar, (Kirk, 2007). Por su parte, la materia orgánica disuelta produce un fenómeno de atenuación de la radiación que aumenta con la concentración y la profundidad en la columna de agua, (Curtis *et al.*, 1994) esto favorece una disminución de la temperatura al aumentar la profundidad, (Sah, *et al.*, 2011). Algunos autores han argumentado que estos cambios en el perfil transversal de la temperatura dan origen a una estratificación térmica que favorece la formación de tres zonas que coexisten en el cuerpo de agua de este tipo de ecosistemas acuáticos construidos: el epilimnion, que corresponde a la capa superficial del cuerpo de agua (zona más caliente), el hipolimnion, que corresponde a la capa

inferior con temperaturas más bajas y mayores densidades del fluido y la termoclina, que corresponde a la capa intermedia donde los gradientes de temperatura son más pronunciados, (Gu and Stefan, 1995; Shilton, 2001; Sukias *et al.*, 2001; Sah, *et al.*, 2011). Este paradigma se generalizó entre la comunidad científica y se extendió a todo tipo de lagunas facultativas sin importar la influencia que puede tener su diseño, su localización geográfica (altitud, longitud y latitud) y la profundidad. Estudios más recientes dan cuenta de la dependencia de la formación de estas tres zonas con las condiciones ambientales donde se localiza la laguna facultativa, el diseño y la profundidad de la misma, (Song, *et al.*, 2013). Más adelante, en el desarrollo de esta investigación se profundizará sobre este asunto y se analizará la influencia de la localización y el diseño de la laguna facultativa sobre la formación de las tres zonas mencionadas. En conclusión, la radiación solar directa y difusa que incide sobre el cuerpo de agua de este ecosistema, además de favorecer el proceso de fotosíntesis, influye en las variaciones de los parámetros de OD, pH, temperatura, potencial de oxido reducción y clorofila-a. Esto, convierte el ciclo luz-oscuridad (fotoperiodo) en un factor importante que además de producir variaciones en los parámetros físico-químicos afecta la eficiencia de biodegradación de los procesos y favorece el ensamblaje ecológico de las comunidades presentes en estas lagunas, (García *et al.*, 2006).

Para el pH, la temperatura, el OD y la Clorofila-a la prueba U de Mann-Whitney y el Test de Levene en los puntos L/3 y 2L/3 y Kruskal Wallis en el L/2, mostraron diferencias estadísticamente significativas entre las series de datos de cada profundidad, lo cual coincide con lo propuesto por Gu and Stefan, (1995). Estas diferencias, son favorecidas por un mayor calentamiento de la superficie del cuerpo de agua, la penetración de la radiación solar en la zona fótica de la laguna (entre 0.10m y 0.15m) y la existencia de gradientes ecológicos ligados a tres zonas presentes en la laguna: la zona fótica, la zona afótica y el bentos. En términos de la concentración de oxígeno disuelto la zona fótica posee las mayores concentraciones, el bentos las concentraciones más bajas o ausencia de este y la

zona afótica se caracteriza por ser una zona facultativa que posee microorganismos que pueden subsistir en nichos microaerófilos, esto es, concentraciones muy bajas y transientes del OD, (Mara and Horan, 2003). Estos gradientes ecológicos son de suma importancia debido a que “organizan” las comunidades y los procesos de interés para favorecer la descontaminación del agua residual, (González, J.M.; Bécares, E. y Luis, E. 2001).

Para el ORP la prueba U de Mann-Whitney y el Test de Levene, indicaron que la hipótesis nula de diferencias de medianas y varianzas no se rechaza, por lo que no existen suficientes evidencias estadísticas para afirmar que las series de datos del ORP en las profundidades 1 y 2 son significativamente diferentes, (Sukias *et al.*, 2001). En los seres vivos, el uso de la energía derivada de las reacciones químicas implica reacciones de oxidación-reducción, es decir procesos de ganancia o pérdida de electrones ó incluso la transferencia de átomos de hidrógeno, (Madigan, Martinko and Parker, 2010). En los procesos biológicos, incluidos los que tienen lugar en las lagunas facultativas secundarias, la mayoría de las moléculas que intervienen en procesos como la fotosíntesis, la respiración aerobia y anaerobia, la fermentación, la metanogénesis, la nitrificación ó la amonificación, pueden ser donadoras o receptoras de electrones dependiendo de qué sustancias reaccionen con ellas, (Frioni, 1999). Por lo tanto, el potencial de oxido-reducción se convierte en un parámetro que mide la capacidad de una sustancia o proceso de donar o aceptar electrones, incluso se ha utilizado para medir el desarrollo de los procesos de transformación del nitrógeno en procesos de biorremediación, (Maldonado, Agüera and Pérez-Vicente, 2008). Un análisis estadístico de correlaciones mostró de acuerdo a los valores del coeficiente de correlación de Spearman que existe una correlación entre la variable ORP y las variables pH (0.32), Clor-a (0.88), DQO (0.57), SST (-0.81), NO_3^- (-0.37) y NH_4^+ (-0.64). Estos resultados son lógicos y han sido usados por algunos autores como un indicador del desarrollo de los procesos de biodegradación que tienen lugar en este tipo de ecosistemas acuáticos, (Sukias *et al.*, 2001).

6.1.2 Variables químicas: DQO total, DBO total, SST, NO_3^- , NTK, NH_4^+ , Alcalinidad

Los resultados estadísticos de las pruebas U-Mann-y-Whitney y Test de Levene mostraron que las series de datos de las variables DQO total, DBO total, SST, NO_3^- , NTK y NH_4^+ en los puntos P1 y P3 no presentaron diferencias estadísticamente significativas en cada una de las profundidades muestreadas. Lo contrario ocurrió en el punto P2. En este, la prueba Kruskal Wallis mostró que las series de datos de estas variables en sus tres profundidades presentan diferencias estadísticamente significativas. La alcalinidad no presentó diferencias en ningún punto y profundidad. Estos resultados indican que no hay gradientes ecológicos transversales asociados a estas variables en los puntos P1 y P3, mientras en el punto P2 si se presentan los gradientes. Este comportamiento se puede explicar gracias a la hidrodinámica de la laguna. En las lagunas facultativas se pueden encontrar diferentes regímenes de flujo, el de mezcla completa y el de flujo pistón, uno totalmente opuesto al otro. Entre estos dos es posible encontrar el régimen de flujo disperso o arbitrario. El régimen de mezcla completa se caracteriza por que las cualidades físico-químicas del agua residual son las mismas en cualquier punto dentro de la laguna, (Dochain *et al.*, 2003). En el régimen de flujo pistón la masa de agua que entra a la laguna y pasa a través de esta, se descarga en el efluente en el mismo orden en el que entró. Por su parte, el régimen de flujo disperso o arbitrario es un tipo de flujo intermedio que por sus características, es más apropiado para representar el comportamiento hidrodinámico real en este tipo de ecosistemas acuáticos, (Cruz, Alayón and Monsegny, 2000). El flujo disperso o arbitrario está definido por factores como la geometría de la laguna, su relación largo x ancho, la ubicación de las estructuras de entrada y salida, la existencia de baffles, su profundidad, condiciones ambientales como el viento y la temperatura, la existencia de cortos circuitos, zonas de recirculación del fluido o de estancamiento, dispersión causada por turbulencia y mezcla local. Al interactuar, estos factores proporcionan un número de dispersión (d) característico para el flujo (Levenspiel, 1986; Cruz, Alayón and Monsegny, 2000). Investigaciones realizadas

en los últimos 5 años han representado la hidrodinámica de las lagunas como ecosistemas compuestos por un número determinado de reactores en serie, cuyo régimen de flujo individual depende de la zona de la laguna donde estén ubicados, (Vedantam, *et al.*, 2012). Aunque esta representación puede resultar reduccionista desde la ecología, en la ingeniería ha sido bastante útil para caracterizar de forma detallada el comportamiento hidrodinámico de las lagunas. En ese orden de ideas, se puede afirmar que la laguna facultativa secundaria en la que se hizo esta investigación, posee características de reactor completamente mezclado en los puntos P1 y P3 y comportamiento no ideal, es decir de reactor de flujo disperso en el punto P2. La Figura 11 muestra las líneas de corriente del fluido en la laguna obtenidas con el modelo CFD. En la figura se puede observar que el punto P2 corresponde a una zona con características de flujo arbitrario. Este factor es determinante para que en el punto P2 que se corresponde con el punto 2 de la figura, las series de datos muestreados presenten diferencias estadísticamente significativas en cada profundidad.

Por otra parte, las pruebas estadísticas mostraron que, al comparar las series de datos de las profundidades en el sentido longitudinal de la laguna (dirección entrada-salida) no existen diferencias estadísticamente significativas entre ellas. Es decir, en la laguna no se presentan gradientes ecológicos longitudinales asociados a las variables muestreadas. Esto difiere de lo afirmado por, Shilton and Harrison, (2003a), quienes argumentan que a medida que progresa la depuración, se va produciendo una eliminación de nutrientes que puede dar lugar a que uno o varios alcancen un diferencial de concentraciones que generan gradientes longitudinales en este tipo de ecosistemas de descontaminación. La ausencia de estos gradientes puede deberse a la configuración propia de la laguna (laguna convencional), cuya relación largo-ancho ($L \times A$) es de 2.56 con ausencia de baffles. Autores como Abbas, Nasr, and Seif (2006), argumentan que las mejores eficiencias de tratamiento se presentan en aquellas lagunas con una relación $L \times A$ igual a 4 con presencia de dos o cuatro baffles a $L/3$ (dos baffles) o $L/5$ (cuatro baffles). Por otro lado, existe la influencia del comportamiento hidrodinámico del

fluido sobre las características físico-químicas de la laguna, (Shilton, 2001), siendo los cortos circuitos, las zonas muertas y las zonas de recirculación unos de los principales obstáculos para obtener las mejores eficiencias en el tratamiento, (Persson, 2000). La Figura 11, muestra la simulación CFD del campo hidrodinámico de la laguna facultativa. En la figura se puede observar la presencia de un corto circuito que reduce los tiempos de retención en la laguna, una zona de recirculación en el centro y tres zonas de estancamiento o zonas muertas que desfavorecen el comportamiento de mezcla completa que se busca en este tipo de ecosistemas contruidos para la descontaminación de aguas residuales.

6.2. Variables microbiológicas

6.2.1 Densidad de grupos tróficos vinculados a la dinámica de transformación de amonio.

Los recuentos de microorganismos fijadores de nitrógeno, nitrificantes autotróficos, nitrificantes mixotróficos y heterótrofos estuvieron entre 4.02 y 8.43 Log 10 UFC gr⁻¹. Para los microorganismos fijadores de nitrógeno y heterótrofos se encontró que en la profundidad 1 (0 - 0.20m), los recuentos fueron superiores a los reportados por N. Pérez-Peláez et al. (2011) y Montilla & Sanabria (2009). En el caso de los organismos fijadores de nitrógeno esto se puede explicar por la alta presencia de cianobacterias filamentosas y bacterias diazótrofes unicelulares fotosintéticas, las cuales se establecen en las capas más superficiales de este tipo de ecosistemas eutróficos gracias a la disponibilidad de la luz solar (Van Den Hende *et al.*, 2014). El comportamiento de los organismos heterótrofos se puede relacionar con la concentración de OD en la superficie, el cual presenta concentraciones de saturación en esta zona de la laguna gracias a la presencia de organismos fotosintéticos que promueven el crecimiento de este grupo de microorganismos, (Zhao *et al.*, 2015). La distribución de densidad de los 4 grupos de microorganismos se asocio al perfil de profundidad de la laguna. Para ello se utilizó el coeficiente de correlación de Spearman el cual mostró que no hay una

tendencia definida de las densidades asociada a la profundidad en la que se tomaron las muestras. Esto permite concluir que los procesos de transformación de nitrógeno tienen potencial para desarrollarse en toda la columna de agua de la laguna, (Li, et al. 2017).

6.2.2 Composición, abundancia y diversidad de comunidades microbianas en el perfil transversal de la columna de agua del ecosistema.

Se efectuó una aproximación de la composición, abundancia y diversidad microbiana del perfil transversal en la columna de agua de la laguna con la generación de librerías a partir de la amplificación del gen del ARN ribosomal 16S (gen16S rRNA). Este es ampliamente utilizado para la reconstrucción de filogenias, gracias a sus bajas tasas de evolución, lo que significa que su secuencia está altamente conservada entre las diferentes especies de bacterias y arqueas, (Schmidt, Delong and Pace, 1991). Para la evaluación se implementó el marcador molecular 16S en las muestras compuestas de las profundidades 1, (0-0.20 m), 2 (0.4-0.5 m) y 3 (0.8-1.40 m) tomadas el 12 de junio de 2015 (primer muestreo) y de las mismas profundidades (1, 2 y 3) tomadas el 23 de julio de 2015 (tercer muestreo). Todas las muestras correspondieron al punto P2. La TTabla 12 muestra la evaluación del número de Unidades Taxonómicas Operativas (número de OTU's por sus siglas en inglés: Operational Taxonomic Unit) en cada profundidad. De acuerdo con la tabla las muestras con mayor riqueza correspondieron a las profundidades 2 y 3 del tercer muestreo. Con los resultados obtenidos para el número de OTUS se pudo establecer un aumento de la riqueza al aumentar la profundidad.

Tabla 12. Evaluación del número OTU's

Profundidad	Muestreo 1	Muestreo 3
0.00 - 0.20	3400	3870
0.40 - 0.50	3655	4190
0.80 - 1.40	4032	4421

Se evaluó la diversidad en cada una de las muestras tal como se registra en la Tabla 13. Se encontró que el índice de Shannon presenta una tendencia similar a la que presentó la riqueza evaluada con el número de OTUS. Ambos aumentan con la profundidad. El índice de Shannon indica la heterogeneidad de una comunidad sobre la base del número de especies presentes en la muestra (diversidad máxima cuando todas las especies están presentes). Por tal razón, índices superiores a 5 como los encontrados en las muestras, evidencian que las comunidades microbianas asociadas al gen 16S a lo largo del perfil transversal son altamente diversas, lo que coincide con lo establecido por Wang *et al.*, (2012). Por su parte, los valores calculados para el índice de Simpson son cercanos entre si y no muestran una tendencia clara en relación con la profundidad. El índice de Simpson mide la probabilidad de que dos individuos seleccionados al azar en un hábitat pertenezcan a la misma especie. Entre mayor sea el valor de este índice, mayor será la diversidad de la comunidad. Esto se debe a que a diferencia del índice de Shannon, este depende tanto de la riqueza de especies como de la equidad con la que están distribuidas las poblaciones en un ecosistema (Pla, 2006). En general, se encontró que las muestras presentaron valores más altos para los índices de Simpson que los reportado por Sanapareddy *et al.* (2009). Desde el punto de vista termodinámico esto es un indicador del grado de madurez del ecosistema. Desde la ecología, la diversidad y riqueza de especies significa un mayor grado de organización, funcionalidad del ecosistema y coexistencia de especies (Jørgensen, Patten and Straškraba, 2000). Autores como Aoki, (2006) han relacionado los índices de diversidad de los ecosistemas acuáticos con su grado de eutrofización, la complejidad de la red trófica (a mayor diversidad mayor

complejidad), un uso más eficiente de la energía disponible y con propiedades emergentes como la resiliencia del ecosistema.

De un total de 29 filotipos encontrados, se determinó que *Proteobacteria*, *Bacterioides*, *Actinobacteria*, *Firmicutes*, *Synergistetes*, *Verumicrobia*, *Chloroflexi*, *Cyanobacteria*, *Spirochetes*, *Lentisphaerae* y *Acidobacteria*, representaron entre el 97.44% y el 99.02% del total del número de OTUS, encontrando concordancia con los resultados obtenidos por Moura et al. (2009), para una LF, donde se estableció que los filotipos dominantes estuvieron constituidos por secuencias correspondientes a *Firmicutes* y *Proteobacteria*. Al comparar la dominancia de los filotipos obtenidos en la laguna, con los reportados en sistemas de lodos activados, (Wang et al. 2012), se encontró en ambos casos que los géneros dominantes fueron *Proteobacteria* y *Bacterioides* con porcentajes de dominancia entre el 21% y el 53%. Resultados similares fueron encontrados en sistemas de filtros de membrana utilizados para el tratamiento de aguas residuales. Un análisis de varianzas realizado por estos autores, estableció que además de características del agua residual como la concentración de nutrientes, el pH y la temperatura y factores operacionales de los sistemas de tratamiento, la ubicación geográfica desempeñó un rol importante en la composición de las comunidades.

Tabla 13. Índices de diversidad y riqueza

Profundidad	Muestreo 1		Muestreo 3	
	Índices de diversidad y riqueza		Índices de diversidad y riqueza	
	Shannon	Simpson	Shannon	Simpson
0.00 - 0.20	7.169	0.949	8.121	0.963
0.40 - 0.50	8.153	0.986	8.253	0.986
0.80 - 1.40	8.409	0.988	8.312	0.987

No se observaron diferencias en la composición genética respecto a las profundidades. Se identificó que el 100% de las OTU's dominantes y el 72% del total de OTUs fueron compartidas entre las muestras.

El filotipo que representó más secuencias fue *Proteobacteria*, el cual constituye el linaje más grande y diverso del dominio bacteria y está constituido por más de 460 géneros y más de 16000 especies gran negativas. Estas incluyen organismos patógenos y organismos de vida libres entre los que se encuentran grupos bacterianos vinculados a procesos de fijación de nitrógeno. El segundo filotipo más representativo fue *Bacteroides*, el cual está compuesto por bacilos gran negativos, no motiles, no esporulados y anaerobios que constituyen el principal componente de la microbiota gastrointestinal. Estos desempeñan un rol importante en el procesamiento de moléculas orgánicas complejas en otras más simples, son característicos del proceso de amonificación, (Björnsson *et al.*, 2002; Dworking, Falkow and Rosenberg, 2016). En cuanto a los filum no dominantes representados por *Aquificae*, *Chrysiogenes*, *Deferribacter*, *Armatimonadetes* y *Gemmatimonadetes*, se encontró que las secuencias están relacionadas con procesos quimiolitótrofos de transformación de oligoelementos los cuales fueron comunes en las muestras tomadas en el fondo de la laguna, profundidad 3 (0.8-1.40 m). Estos resultados muestran que los procesos de transformación de elementos menores se dan predominantemente en zonas anaerobias de la laguna, (Bertrand, 2011), lo cual es propio de los procesos finales como la mineralización de carbono y nitrógeno que tiene lugar en el bentos de la laguna. A nivel de género, se encontró que *Streptomyces drozdowiczii*, *Brachymonas sp.*, *Streptomyces sp.*, *Aquicella spp*, *Geobacillus sp.*, *Chroococcidiopsis sp.*, *Eubacterium sp.*, *Acidobacterium sp.*, *Dysgonomonas sp*, *Macromonas bipunctata*, *Anaerovorax sp.*, *Planctomyces sp*, *Caldisericum sp.*, *Aquimonas sp*, *Spirillum volutans*, *Saccharothrix violaceirubra*, *Paludibacter spp*, *Hydrogenophaga sp*, *Rhizobium sp*, *Desulfuromonas sp*, *Prosthecobacter vanneervanii*, *Candidatus acumulibacter sp.* representaron entre el 32.5 y 76% de los géneros dominantes en las muestras, es decir, secuencias con porcentajes de distribución superiores al

1%. Además de estas especies, se encontró una alta abundancia (0.80% y 0.99% de aporte) de *Acinetobacter genomus* sp, *Aminobacterium* sp, *Anaerofilum* sp., *Desulforudis audaxviator*, *Gortzia infectiva*, *Clostridium* sp., *Desulfitobacterium hatniense*, *Dysgonomonas* sp., *Lewinella cohaerens*, *Mariniphaga bacteroidalesentre*, *Meniscus glaucopsis*, *Neochlamidia* sp., *Nitrososivrio* sp., *Oligoflexus bacterium*, *Optitus* sp., *Pedosphaera* sp., *Prochlorococcus* sp, *Rubrobacter* sp, *Singulisphaera* sp., *Syntrophus* ps., *Thermus* sp., *Trachelomonas* sp., *Verrumicrobium* sp. y *Xantobacter* sp.

En cuanto a las secuencias no dominantes (abundancias menores al 0.80% de contribución), se encontró que el 84.7% de los géneros y especies fueron compartidas entre todas las muestras, mientras el porcentaje restante representó organismos únicos para cada muestra. Se encontró que la muestra tomada en la profundidad 1 tiene un mayor número de especies únicas en relación a las otras profundidades. Este comportamiento se presenta debido a que los procesos de colonización microbiana son más favorables en presencia de radiación solar directa y temperaturas altas, según lo establecido por Díaz-Villanueva, Schwartz and Romani, (2011).

6.3. Resultados del modelo CFD

6.3.1 Estudio de trazadores y validación del campo hidrodinámico

Varias investigaciones en las que se representó el comportamiento hidrodinámico del fluido en lagunas facultativas con técnicas CFD, fueron validadas con estudios de trazadores (Aponte 2013, Alvarado, Vedantam et al. 2012, Shilton 2001). Por tal razón, para la validación de los modelos CFD se usaron dos estudios de trazadores. Los resultados experimentales de estos estudios se muestran en la Figura 8. La información de los estudios de trazadores fue analizada a través de la construcción de las curvas de distribución del tiempo de residencia, (Cruz, Alayón and Monsegny, 2000). Con la ayuda de las curvas, fue posible observar el comportamiento no ideal del flujo de agua residual dentro de la laguna. De

acuerdo con Levenspiel, (1986) esta presenta características de flujo entre disperso y mezcla perfecta.

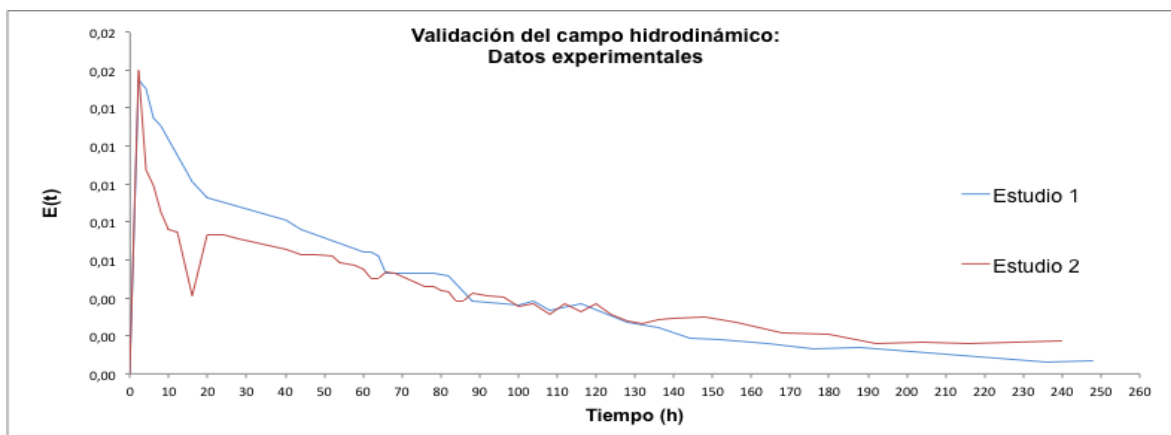


Figura 8. Distribución del tiempo de residencia. Estudios de trazadores 1 y 2

Los picos agudos tempranos en las curvas de distribución entre $t = 0$ y $t = 3$ identificaron la presencia de un corto circuito hidráulico, el cual quedo confirmado con los resultados del modelo CFD, (ver **Figura 11**). Los pequeños picos a lo largo de la curva indicaron la presencia de zonas de circulación interna lenta del fluido y zonas de recirculación. Estas zonas también fueron identificadas con los resultados del modelo CFD y correspondieron a la zona central de la laguna y al punto P2 y los vértices internos de esta, (ver **Figura 11**). La **Tabla 14** y la **Tabla 15** muestran los análisis de los estudios experimentales de trazadores. Los parámetros de cada estudio de trazadores fueron calculados siguiendo un modelo de flujo disperso, (Bahl, Gely and Pagano, 2012)

Tabla 14. Datos de los estudios de trazadores 1 y 2

Parámetro	Estudio 1	Estudio 2
t_i , tiempo hasta la aparición del trazador (h)	2.00	2.00
t_m , tiempo hasta aparición del 50% del trazador (h)	60	72
t_o , tiempo teórico de retención (h)	95.23	95.23
Masa de trazador recuperada (g)	2.15	2.42
Porcentaje de masa recuperada (%)	57	64

Tabla 15. Parámetros de los estudios de trazadores 1 y 2

Criterio	Descripción	Estudio 1	Estudio 2
t_i/t_o	Mide cortos circuitos. Un valor de 1 indica flujo pistón, mientras un valor de 0 indica flujo de mezcla.	0.021	0.021
t_m/t_o	Indica cortos circuitos y zonas muertas cuando su valor es <1	0.630	0.750
t_p/t_o	Indica la relación entre flujo pistón y flujo de mezcla del ecosistema.	0.042	0.021
$D. (\mu l)^{-1}$	Número de dispersión. Si $D. (\mu l)^{-1}$ tiende a 0 reactor flujo pistón ideal, si tiende a α reactor completamente mezclado ideal	0.406	0.340

De acuerdo con el estudio de trazadores 1, un valor de $t_i/t_o < 0,3$ significa que el trazador va directamente de la entrada a la salida sin cumplir con el tiempo de retención teórico de 3.99 días. Es decir, indica la presencia de cortos circuitos en la LF. El valor de 0.630 para el parámetro t_m/t_o indica la presencia de zonas de recirculación y un valor de 0.042 para el parámetro t_p/t_o significa predominio del comportamiento de reactor completamente mezclado en el ecosistema sobre el flujo pistón, (Shilton and Harrison, 2003a). Los resultados del estudio de trazadores 2 confirman el comportamiento hidráulico de la laguna facultativa obtenido en el estudio 1.

Respecto a los porcentajes de recuperación de rodamina WT, algunos autores han reportado la fuerte interferencia que tienen las partículas de materia orgánica en suspensión sobre el método de cuantificación del trazador. Camargo Valero & Mara (2009) verificaron que la rodamina WT tiene una alta tendencia a ser

adsorbida por las partículas de materia orgánica y posteriormente sufrir fenómenos como la sedimentación, lo que indudablemente afecta la cuantificación final del método. Adicionalmente, se ha encontrado que la fluorescencia de la rodamina WT varía con parámetros como la temperatura y la conductividad y que partículas en suspensión como la biomasa de algas pueden absorber a las mismas longitudes de onda de este trazador, provocando errores en la cuantificación del método analítico empleado. La adsorción de la rodamina WT sobre la superficie de las partículas en suspensión unida a fenómenos hidrodinámicos como los cortos circuitos y en especial las zonas de recirculación y zonas muertas desfavorecen aún más la precisión de los datos. En el caso específico de las zonas muertas estas favorecen una disminución en la concentración de salida del trazador disminuyendo los porcentajes reales de recuperación.

6.3.2 Prueba de independencia de malla

Los resultados de cada malla evaluada se muestran en la Tabla 16. En esta tabla, se pueden observar los resultados de la concentración de sólidos suspendidos y la velocidad del fluido en el efluente del ecosistema. Estos resultados corresponden a los obtenidos durante las simulaciones iniciales del modelo CFD bifásico. Los resultados de las mallas 2 y 3, no difieren significativamente entre sí. Basados en esta información y en los criterios de calidad aplicados a la malla, se seleccionó la malla número 2 como la malla óptima para las simulaciones definitivas. Esto se debe, a que la malla 2 brinda una solución razonable con un tiempo y gasto computacional aceptables. La prueba de independencia de malla garantiza que la solución obtenida no dependa del número y tamaño de los elementos, (Banda, 2007). Además, la selección de la malla óptima dependerá de que los elementos hexaédricos que la componen cumplan con los criterios de calidad seleccionados, en este caso el método por determinantes ($3 \times 3 \times 3$) y del ángulo interno. También de la convergencia de la solución, el criterio de calidad de los residuales y un gasto y tiempo computacional apropiados para la solución final.

Tabla 16. Valores simulados para la velocidad y concentración de sólidos suspendidos en el efluente del ecosistema para cada malla evaluada en el modelo CFD

Malla No.	Tamaño del elemento	Velocidad a la salida	Concentración de sólidos suspendidos
	(m)	(m.s ⁻¹)	(%P/V)
1	0.500	0.01340	0.2930
2	0.050	0.01120	0.2240
3	0.025	0.01123	0.2221

6.3.3 Modelo CFD monofásico Vs modelo CFD bifásico

Primero, se desarrolló un modelo monofásico el cual incluyó solo agua. Luego, se simuló una mezcla bifásica de agua residual que incluyó los sólidos suspendidos del afluente. En este modelo, no se simuló la biomasa de algas que se genera en el interior de la laguna, debido a la complejidad del fenómeno y las limitaciones de la CFD para representar la cinética de crecimiento de estos microorganismos.

Luego, se hicieron simulaciones en estado estacionario para cada modelo (monofásico-bifásico). Las iteraciones de estas simulaciones variaron, pero siempre se mantuvieron por debajo de las 10.000 y se ejecutaron hasta que se obtuvo la convergencia de la solución. Posteriormente, y una vez alcanzada la convergencia de la solución en cada modelo, se realizaron simulaciones en estado transitorio por periodos cortos de tiempo (2 horas) hasta obtener perfiles de velocidad y turbulencia estables. Finalmente, el periodo de simulación se amplió a 1, 2 y 3.5 veces el tiempo teórico de retención hidráulico con el objetivo de evaluar el desempeño de cada modelo CFD.

Para simular el campo hidrodinámico de la laguna se probaron los modelos de turbulencia $k - \epsilon$ Realizable, $k - \epsilon$ Estándar y $k - \epsilon$ RNG. Los modelos $k - \epsilon$ son

modelos basados en las ecuaciones de transporte para la energía cinética de la turbulencia (k) y su tasa de disipación (ε), (ver Ecuación 8 y 9).

En el modelo Estándar las ecuaciones desarrolladas para ambas expresiones se realizaron bajo la suposición de que el flujo era completamente turbulento y que los efectos de la viscosidad del fluido eran despreciables. Estos supuestos introdujeron imprecisiones al modelar flujos en régimen laminar o transitorio y flujos donde el efecto de la viscosidad no era despreciable. Ante estas limitaciones, se desarrollaron de manera progresiva los modelos Realizable y RNG. El modelo RNG fue derivado usando una técnica estadística llamada teoría del grupo de re-normalización (RNG por sus siglas en inglés). La estructura matemática de estas ecuaciones es similar a la del modelo Estándar pero incluye los siguientes refinamientos: el modelo RNG incluye un término adicional en la ecuación del parámetro (ε) que mejora la precisión cuando se modelan flujos forzados, también incluye el efecto de los remolinos o zonas de recirculación del fluido sobre la turbulencia lo que proveyó una mejor precisión para fluidos con números de Reynolds menores a 4000 ($Re < 4000$). Finalmente, el modelo Realizable es una mejora del modelo RNG ya que brinda mejor precisión del efecto de la viscosidad sobre la turbulencia del fluido y mejora el valor de la tasa de disipación (ε) introduciendo un término que evalúa el impacto de la fluctuación de vórtice sobre el balance de cantidad de movimiento del fluido: termino μ en la ecuación 7, (ANSYS, 2013). Desde el modelo, los mejores resultados en términos de convergencia de la solución, número de iteraciones y estabilidad de los residuales fueron obtenidos con el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ Realizable, la Figura 9 compara el comportamiento de los residuales obtenidos con estos modelos.

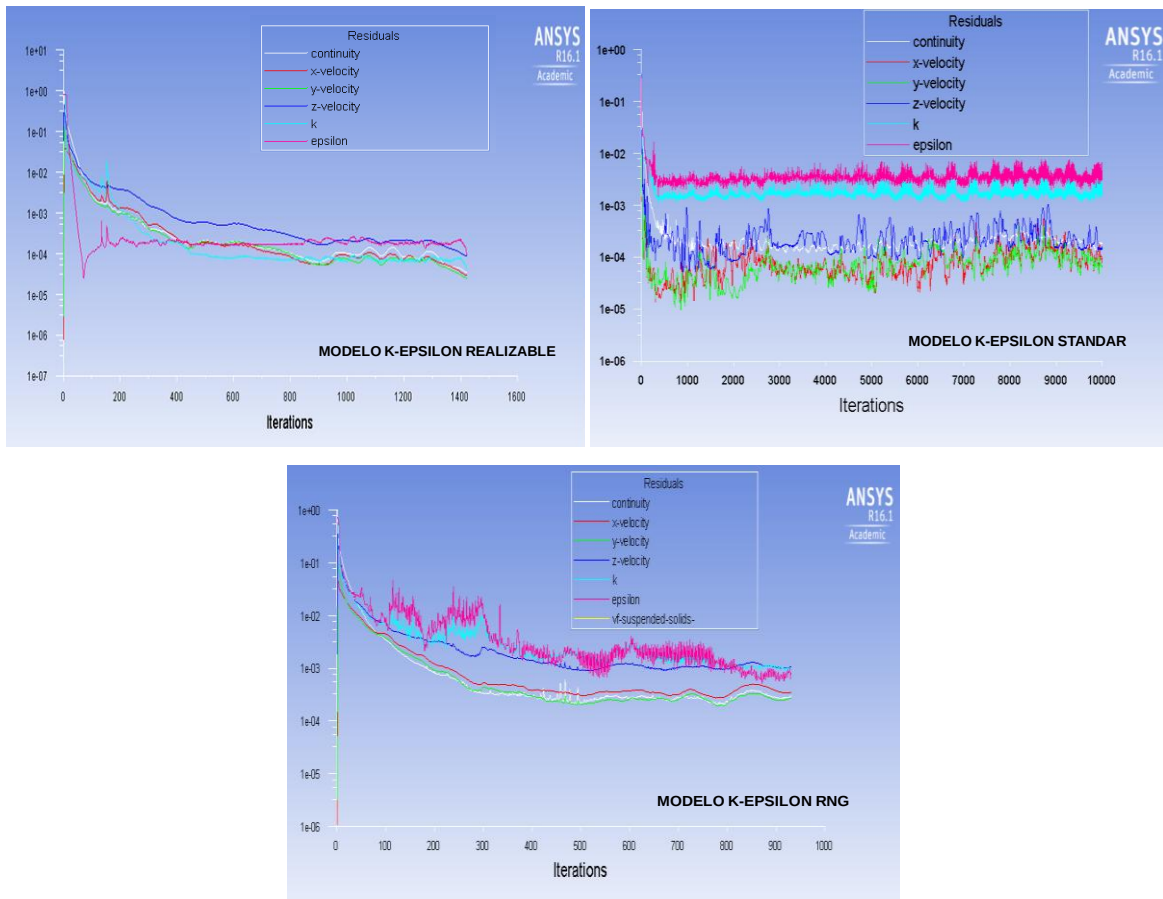


Figura 9. Comportamiento de los residuales obtenidos con los modelos Realizable, Estándar y RNG respectivamente.

La Tabla 17 muestra el criterio de convergencia alcanzado para los residuales con el uso del modelo Realizable. Los criterios cumplen con los valores recomendados por (ANSYS, 2013)Tabla 17

Tabla 17. Criterio de convergencia de los residuales alcanzado con los modelos

Variable	Modelo monofásico	Modelo Bifásico	Recomendado
Continuidad	10^{-4}	10^{-4}	10^{-3}
Velocidad X	10^{-4}	10^{-4}	10^{-3}
Velocidad Y	10^{-4}	10^{-4}	10^{-3}
Velocidad Z	10^{-3}	10^{-3}	10^{-3}

Variable	Modelo monofásico	Modelo Bifásico	Recomendado
Energía	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}
K	10^{-3}	10^{-3}	10^{-3}
Épsilon	10^{-3}	10^{-3}	10^{-3}
P1	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}
Fracción volumen de sólidos	No aplica	10^{-5}	10^{-3}

Diferentes investigaciones en las que se ha simulado el comportamiento hidrodinámico de este tipo de ecosistemas, recomiendan el uso del modelo Estándar como uno de los más apropiados para este tipo de problemas y uno de los que mejor describen la hidrodinámica del fluido, (Alvarado *et al.*, 2011). Sin embargo, es importante mencionar que la selección del modelo de turbulencia debe incluir un análisis del comportamiento del fluido para determinar si pertenece al régimen laminar, transitorio o turbulento, (ANSYS, 2013). Este aspecto no se menciona en los artículos de modelación revisados a pesar de que es un punto fundamental en la selección del modelo de turbulencia que se utiliza.

El modelo Standard es recomendado para flujos completamente turbulentos ($Re > 4000$), mientras el modelo Realizable es recomendado para flujos laminares ($Re < 2000$) o transitorios ($2000 < Re < 4000$), (ANSYS, 2013). En el caso de este trabajo de investigación, el fluido en la laguna facultativa secundaria presentó un número de Reynolds de 5822 en la entrada, 506 para la salida y 840 en el interior de la laguna (sección transversal). Estos datos confirman que la selección del modelo Realizable fue la más acertada para modelar el comportamiento hidrodinámico del agua residual. El modelo $k - \varepsilon$ Realizable, se acopló con una formulación de velocidad absoluta, recomendada para bajas velocidades y el “Pressure Based Solver” utilizado en simulaciones de fluidos incompresibles. Finalmente, se debe mencionar que el modelo $\kappa - \varepsilon$ Estándar, el cual se enfoca en los mecanismos que afectan la energía cinética turbulenta κ y su tasa de

disipación ϵ , incluye en la ecuación para κ , términos de fluctuación de la turbulencia que son resueltos empleando la presunción de Boussinesq, (ANSYS 2013, Villamizar 2014); en esta, el tensor de Reynolds se asume proporcional a las tasas medias de deformación. Por otro lado, el modelo de turbulencia $\kappa - \epsilon$ Realizable, el cual tiene las mismas ecuaciones de energía cinética turbulenta del modelo estándar, introduce variabilidad en uno de los parámetros: C_μ , en la ecuación de ϵ , la cual mejora la simulación de la disipación en los flujos de recirculación, (zonas 1, 2, 3 de los campos hidrodinámicos simulados), (ANSYS 2013). Por otro lado, el modelo bifásico incluyó la mezcla con sólidos suspendidos. Para la simulación de los sólidos se usaron dos aproximaciones de fase, el modelo “Euleriano” y el “Mixture”, ambos con un enfoque Euleriano para el transporte de los sólidos. Al finalizar las simulaciones no se observaron diferencias importantes entre los resultados de ambos modelos. Al parecer las bajas velocidades características de este tipo de ecosistemas acuáticos construidos, (ecosistemas lentos), son la causa de esta situación, (Fluent, 2009). Por tal razón, las simulaciones finales se realizaron con el modelo “Mixture” con lo que se logró disminuir el tiempo de computo y el gasto computacional en un 13%. Inicialmente, las simulaciones del modelo bifásico se realizaron sin el acople de las fuerzas de arrastre y deslizamiento (*Drag and Slip forces*), pero la solución fue no convergente. Por esta razón, para la interacción entre las dos fases fue necesario seleccionar los modelos para estas fuerzas.

Se probaron cinco combinaciones, las cuales no arrojaron diferencias entre sí respecto al campo de velocidades, número de iteraciones y convergencia de la solución. Por tal razón, se seleccionó la combinación Gibilaru-Legendre, Magnaudet. La Figura 10 muestra las combinaciones de los modelos para las fuerzas de arrastre y deslizamiento utilizadas. En el modelo bifásico se simuló tres diámetros de partícula correspondientes a la distribución del diámetro de partículas propuesto por Peveri et al. (2006). Los valores fueron: mínimo $1\text{e-}5$ m, promedio $5\text{e-}5$ m y máximo $8\text{e-}5$ m. Las simulaciones mostraron una pequeña diferencia de 2.7% en la concentración de sólidos suspendidos del efluente entre

el valor mínimo y máximo. Por esta razón, se utilizó el valor promedio del diámetro de partícula en las simulaciones definitivas del modelo bifásico.

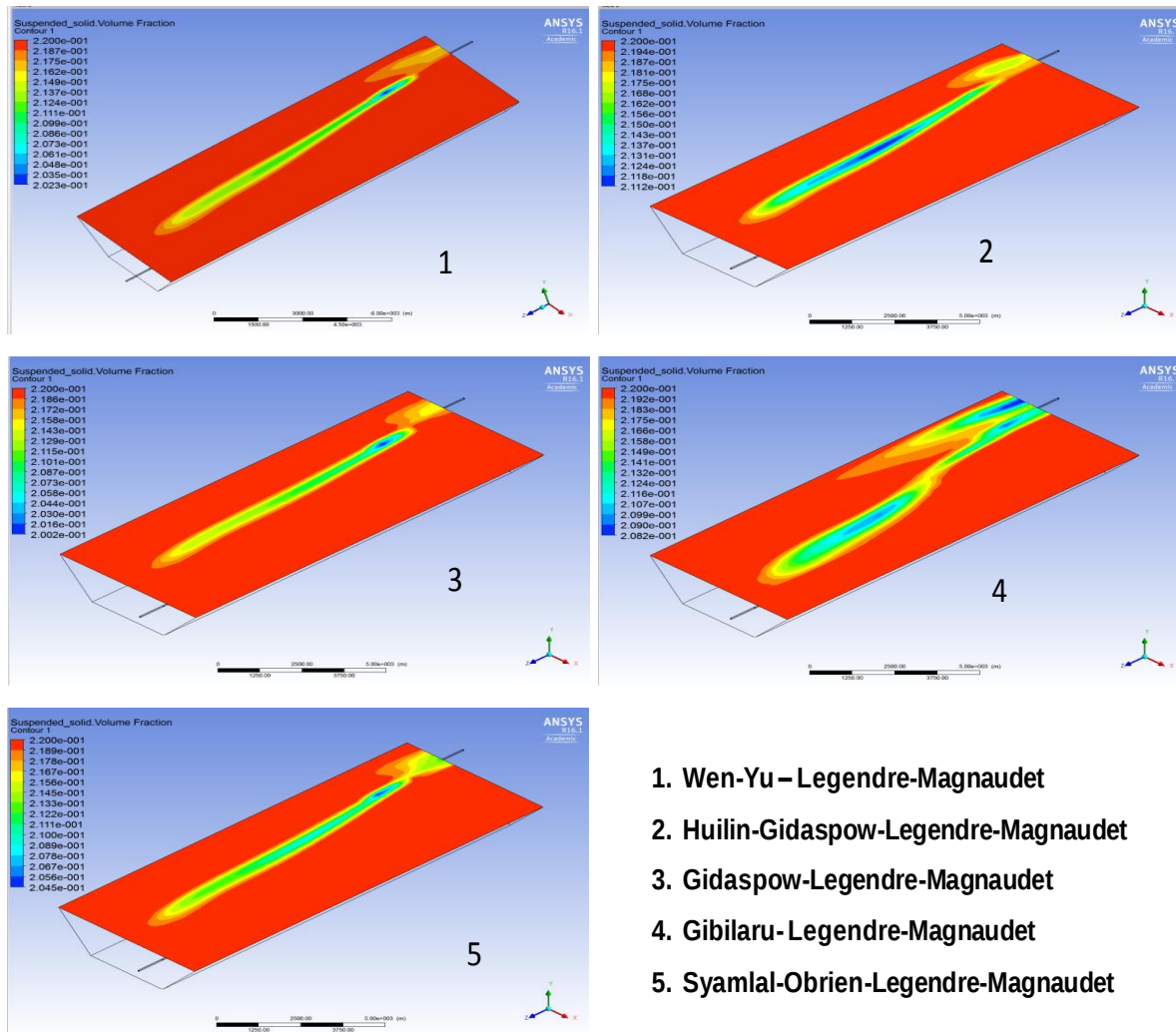


Figura 10. Modelos usados para las fuerzas de arrastre y deslizamiento

La Figura 11, presenta las magnitudes de la velocidad y las líneas de corriente obtenidas para los dos modelos (monofásico y bifásico). En la Figura 11, se pueden observar dos zonas de recirculación en el modelo monofásico y tres en el modelo bifásico. Así mismo, un corto circuito hidráulico presente en ambos escenarios. La ausencia de estructuras como los baffles o las mallas favorecen la presencia de este tipo de fallas hidráulicas, (Ashworth and Skinner, 2011). Estos

resultados validan la información suministrada por los parámetros, t_i/t_o , t_m/t_o de los estudios de trazadores experimentales. De acuerdo con Alvarado et al. (2013), las anteriores zonas son influenciadas fuertemente por la turbulencia inducida por la entrada de flujo a la laguna, lo que indudablemente afecta la calidad del efluente.

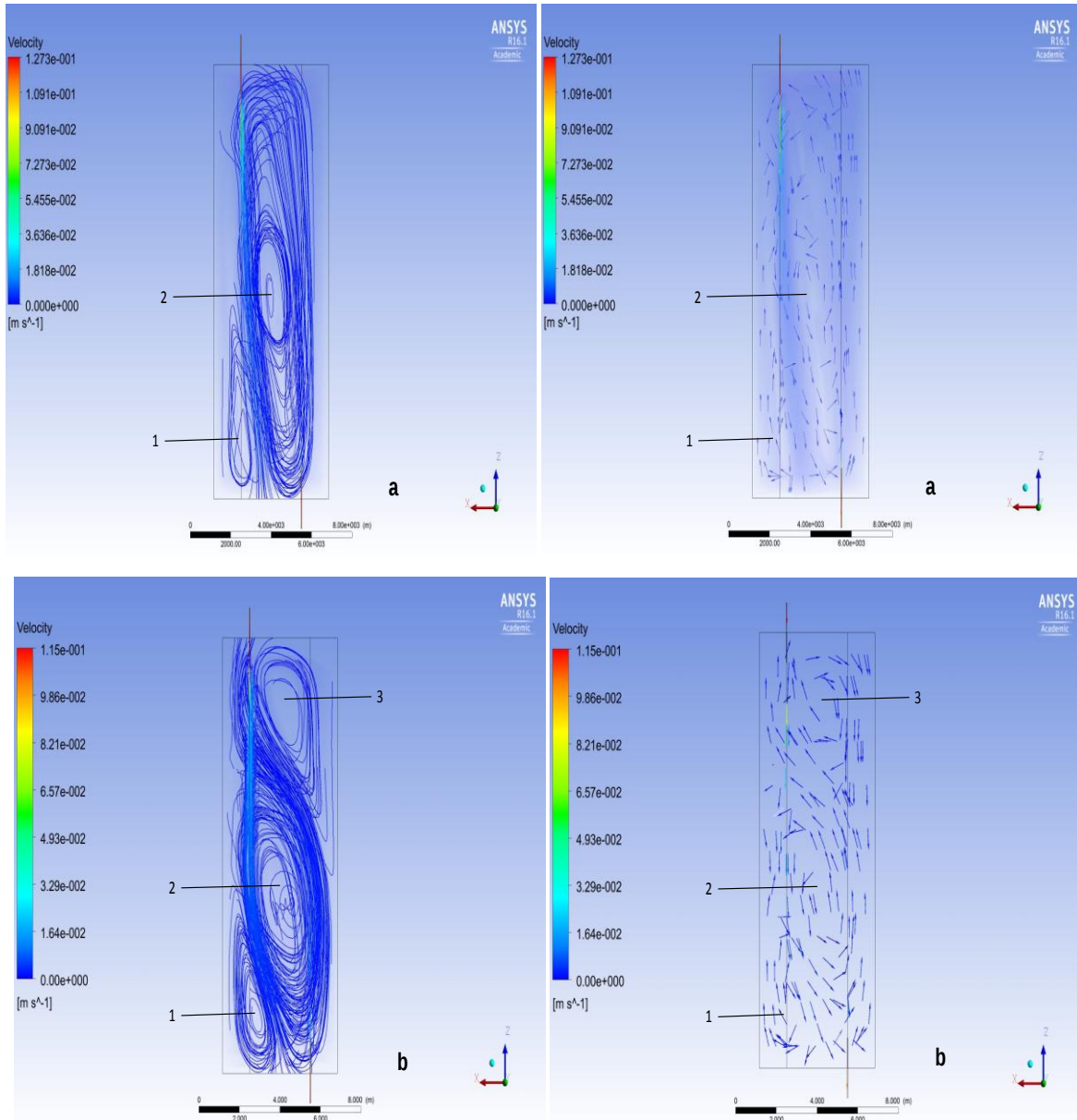


Figura 11. Magnitudes de velocidades y líneas de corriente obtenidas con Fluent para los modelos monofásico (a) y bifásico (b)

Las magnitudes de velocidad obtenidas con el modelo bifásico, cercanas a 0.115 m.s^{-1} en la tubería de entrada a la laguna y de 0.088 m.s^{-1} en las zonas adyacentes, muestran que este brinda una mejor aproximación a los datos reales de velocidad del fluido dentro del ecosistema. Por su parte, el modelo monofásico muestra magnitudes de velocidad mayores (0.127 m.s^{-1}), lo que explica porque el pico de máxima concentración del trazador en el efluente aparece 0.5 horas antes que el modelo bifásico y los estudios de trazadores 1 y 2. También, esto explica porque la varianza de la curva distribución del tiempo de residencia del modelo monofásico es menor que la del modelo bifásico, (ver Tabla 21).

En la Figura 11, se pueden observar diferencias en las magnitudes de la velocidad del fluido obtenidas con ambos modelos. Los resultados de las simulaciones del modelo bifásico, mostraron que las magnitudes de la velocidad del fluido en la entrada y la salida de la laguna fueron 7.83% mayores que los valores experimentales medidos en estos mismos puntos. Este valor presenta cierta similitud con los resultados obtenidos por Alvarado *et al.*, (2013), quienes en un modelo bifásico aire-agua para una laguna facultativa aireada obtuvieron porcentajes de error cercanos al 10%. Esta diferencia de magnitudes se puede atribuir a dos razones. La primera, el cambio en la condición de frontera de la salida, la cual para el modelo monofásico es “Outflow” mientras para el bifásico cambia a “Pressure outlet” (ver Tabla 9). La condición de frontera Outflow actúa como una restricción que no permite un desbalance entre la masa que entra y sale del ecosistema acuático, (ANSYS, 2013). Por esta razón, los campos de velocidades son restringidos a los valores de la condición de frontera pre-establecidos. Por otro lado, la condición de frontera “Pressure outlet” elimina la restricción y permite que el modelo calcule libremente la concentración de sólidos y agua residual a la salida. De esta manera, el porcentaje de error en el balance de masa del modelo monofásico es 0%, mientras el bifásico presentó un error del 0.60%. La segunda causa, son las interacciones entre el fluido y los sólidos suspendidos, representadas en las fuerzas de arrastre y deslizamiento (Drag and Slip forces). Estas fuerzas, permiten la interacción e influencia de los sólidos

suspendidos con los perfiles de velocidad del fluido, lo cual afecta la hidrodinámica del ecosistema acuático, (ver Figura 11).

Los tiempos de simulación y el gasto computacional para ambos modelos fueron significativamente diferentes. El tiempo de convergencia de cada simulación para el modelo monofásico fue 0.5 veces menor que el tiempo requerido para el modelo bifásico. Para este último, se estableció que se necesitan mínimo 2,5 veces el tiempo de retención hidráulico para que el modelo alcance la estabilidad y brinde resultados plausibles. La Figura 12, muestra una secuencia temporal de las simulaciones del modelo bifásico. En ellas se puede observar que la concentración de sólidos suspendidos disminuyó gradualmente hasta el día 5 cuando alcanzó la concentración de entrada (0,041%P/V) y, a partir de ese momento el modelo simuló las condiciones reales del ecosistema.

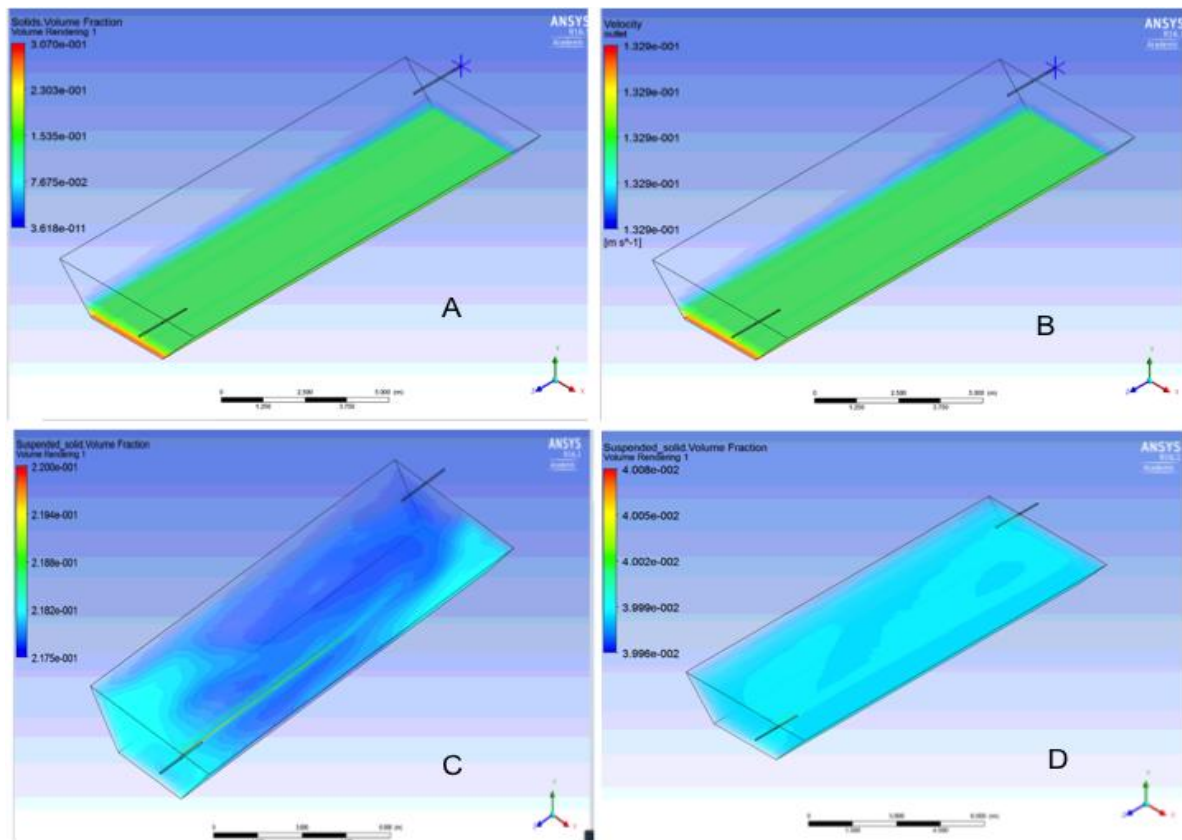


Figura 12. Secuencia de tiempo para las simulaciones del modelo bifásico. (a) dos horas, (b) seis horas, (c) 2 días, (d) 5 días.

Entre el día 5 y el día 10 de la simulación, el modelo alcanzó una concentración de sólidos en el efluente de 0.02340 %P/V. Este valor corresponde a una eficiencia de eliminación de sólidos del 43%. Al comparar este valor con la eficiencia promedio de eliminación de sólidos real, la cual fue de 49%, se encontró un porcentaje de error del 13% entre el valor simulado y el valor real. Hasta este punto, al igual que el caudal de agua residual en el afluente, la concentración de sólidos suspendidos se introdujo como un escalar (valor promedio experimental). Siguiendo la sugerencia de Alvarado et al. (2013), se programó una Función Definida por el Usuario (UDF por sus siglas en inglés) utilizando el lenguaje de programación C++, para simular en estado transitorio la concentración de sólidos suspendidos que entran a la laguna. La UDF utilizada fue del tipo “*Define_Profile*” y se construyó basada en los datos experimentales de la concentración de sólidos suspendidos del afluente. Se realizó seguimiento a la UDF, con un monitor del tipo “area-weighted averaged concentration”, (ver anexo 4). Los resultados obtenidos con la UDF, mostraron que el porcentaje de error de la concentración de sólidos suspendidos en el efluente se redujo hasta 3%. Lo cual demuestra que, efectivamente la UDF mejora el desempeño del modelo de forma significativa. En la Tabla 18, se compararon los resultados obtenidos con el escalar y la UDF con los valores experimentales de la concentración de sólidos en el efluente.

Tabla 18. Valores de la concentración de sólidos suspendidos en el efluente para escalar, UDF y experimental

Variable a comparar	Escalar	UDF	Experimental
Concentración del efluente (%P/V)	0.023	0.020	0.021
Eficiencia de eliminación de sólidos (%)	43	51	49
Porcentaje de error (%)	13	3	No aplica

La **Figura 13**, muestra la distribución de sólidos suspendidos en el cuerpo de agua. Se muestra una vista transversal y una longitudinal para la condición de entrada del escalar.

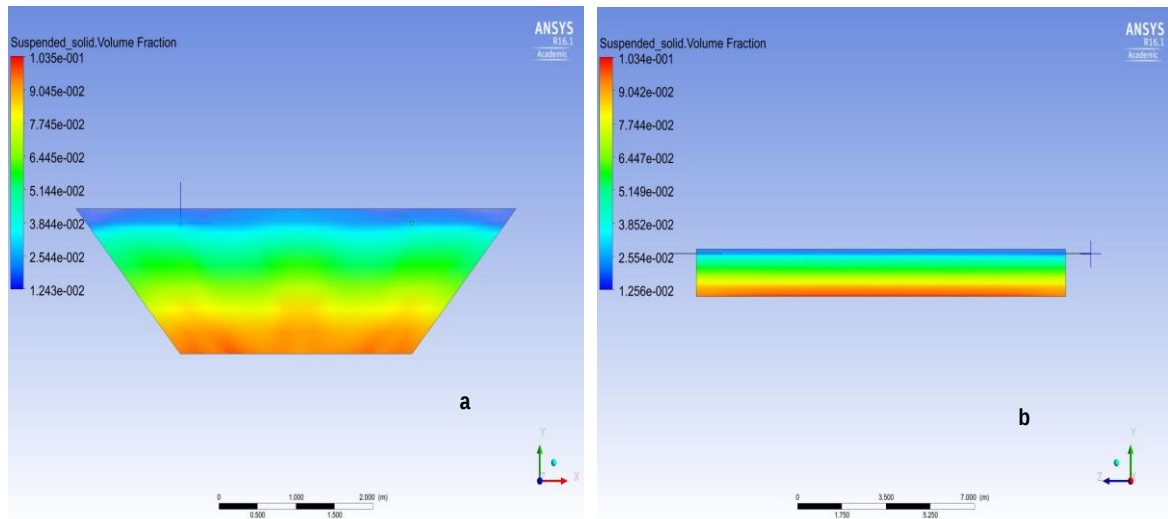


Figura 13. Distribución de la concentración de sólidos suspendidos en el cuerpo de agua de la laguna, (a) vista transversal (b) vista longitudinal.

Finalmente, se compararon los resultados experimentales de los puntos P1, P2 y P3 y sus respectivas profundidades con los valores simulados, obtenidos con el escalar y la UDF en estos mismos puntos. Las comparaciones se muestran en las Tabla 19 y Tabla 20.

Tabla 19. Comparación de las concentraciones experimentales con las simuladas obtenidas con el escalar

Prof. (m)	Punto P1			Punto P2			Punto P3		
	Concentración (%)			Concentración (%)			Concentración (%)		
	Exp.	Sim.	%E	Exp.	Sim.	%E	Exp*.	Sim*.	%E*
0.05	0.030	0.026	13	0.017	0.026	48	0.019	0.023	17
0,45	0.041	0.052	21	0.016	0.053	231	0.025	0.042	68
1.40	N.A	0.093	N.A	0.097	0.094	3	N.A	0.093	N.A

* Exp: experimental. Sim: simulada. %E: porcentaje de error. N.A: No aplica

Tabla 20. Comparación de concentraciones experimentales con las simuladas obtenidas con la UDF

Prof. (m)	Punto P1			Punto P2			Punto P3		
	Concentración (%)			Concentración (%)			Concentración (%)		
	Exp.	Sim.	%E	Exp.	Sim.	%E	Exp*.	Sim*.	%E*
0.05	0.030	0.026	13	0.017	0.020	17	0.019	0.020	5
0,45	0.041	0.036	12	0.016	0.020	19	0.025	0.020	20
1.40	N.A	N.A	N.A	0.097	0.090	7	N.A	N.A	N.A

* Exp: experimental. Sim: simulada. %E: porcentaje de error. N.A: No aplica

En las tablas, se puede observar que la mejor concordancia entre los datos experimentales y simulados se obtuvieron con la UDF. Así mismo, que los porcentajes de error más altos, se localizaron en el punto P2 de la laguna, (punto 2 de la Figura 11). Este punto, es una zona de la laguna que como se explicó anteriormente no presenta comportamiento de reactor completamente mezclado. De acuerdo con la representación del comportamiento hidrodinámico del fluido mostrada en la Figura 11 el punto P2 corresponde a una zona de estancamiento la cual desfavorece el comportamiento de reactor completamente mezclado, (Pérez and Torres, 2008; Ashworth and Skinner, 2011)

6.3.4 Ensayos de trazadores: modelos CFD Vs ensayos experimentales

Para simular la inyección del trazador en el modelo CFD, se implementaron dos métodos en cada modelo. El primero a través del modelo de Fase Discreta, (DPM) y el segundo a través del modelo de Especies Químicas (Species). El DPM, requiere un mayor gasto computacional y los resultados que brindó no son los esperados para este tipo de simulaciones. Por el contrario, el modelo de Especies Químicas requirió 80% menos recursos computacionales que el DPM y brindó resultados satisfactorios al compararlos con los ensayos experimentales de trazadores. Esto concordó con lo propuesto por Ramesh and Nilesh (2015).

Para la inyección, se resolvieron primero las ecuaciones del fluido (agua residual) usando una aproximación de estado estable, hasta alcanzar la convergencia. Luego, se resolvieron las ecuaciones para la Rodamina WT (especie química) con una aproximación de estado transitorio. Finalmente, ambas: agua residual y trazador se simularon en estado transitorio. Se prefirió el método de pulso al método de paso y se monitoreo la concentración de RWT a la salida con un monitor de tipo “area-weighted averaged concentration”. Para el modelo bifásico fue necesario correr el modelo hasta estabilizar la concentración de sólidos suspendidos (día 5) y a partir de este tiempo realizar la inyección del trazador.

Los resultados de los ensayos de trazadores de los modelos CFD fueron comparados con los resultados experimentales en términos de las curvas de distribución del tiempo de residencia. La Figura 14, muestra que el primer pico de concentración en el modelo monofásico aparece en las primeras 1.5 horas de la simulación, presentando una diferencia de 0.5 horas respecto a los picos de concentración obtenidos con los estudios experimentales. El pico de concentración para el modelo bifásico ocurrió al mismo tiempo que los estudios experimentales, (2 horas). Por lo tanto, este último modelo proveyó una mejor aproximación a los datos experimentales que el modelo monofásico.

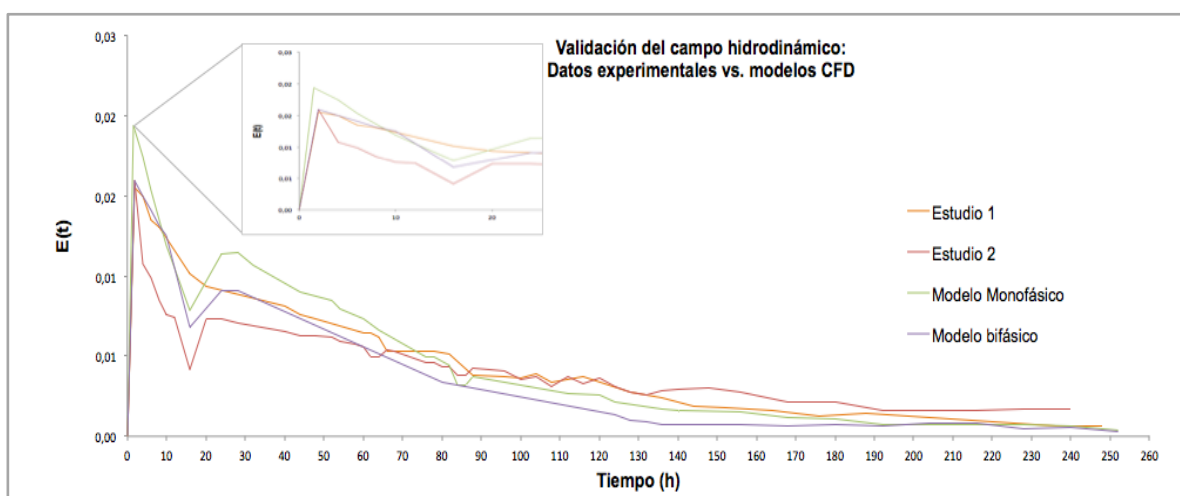


Figura 14. Curvas de concentración de trazador obtenidas experimentalmente y generadas con los modelos CFD (monofásico y bifásico).

La Figura 15 muestra el avance de la inyección del trazador en el volumen de agua de la laguna facultativa para ambos modelos. En esta figura se puede observar la formación del corto circuito que provoca la salida del trazador en un tiempo menor al tiempo de retención hidráulico teórico. La Figura 15a muestra la permanencia del trazador en una de las zonas muertas de la laguna (vértice adyacente a la tubería de entrada).

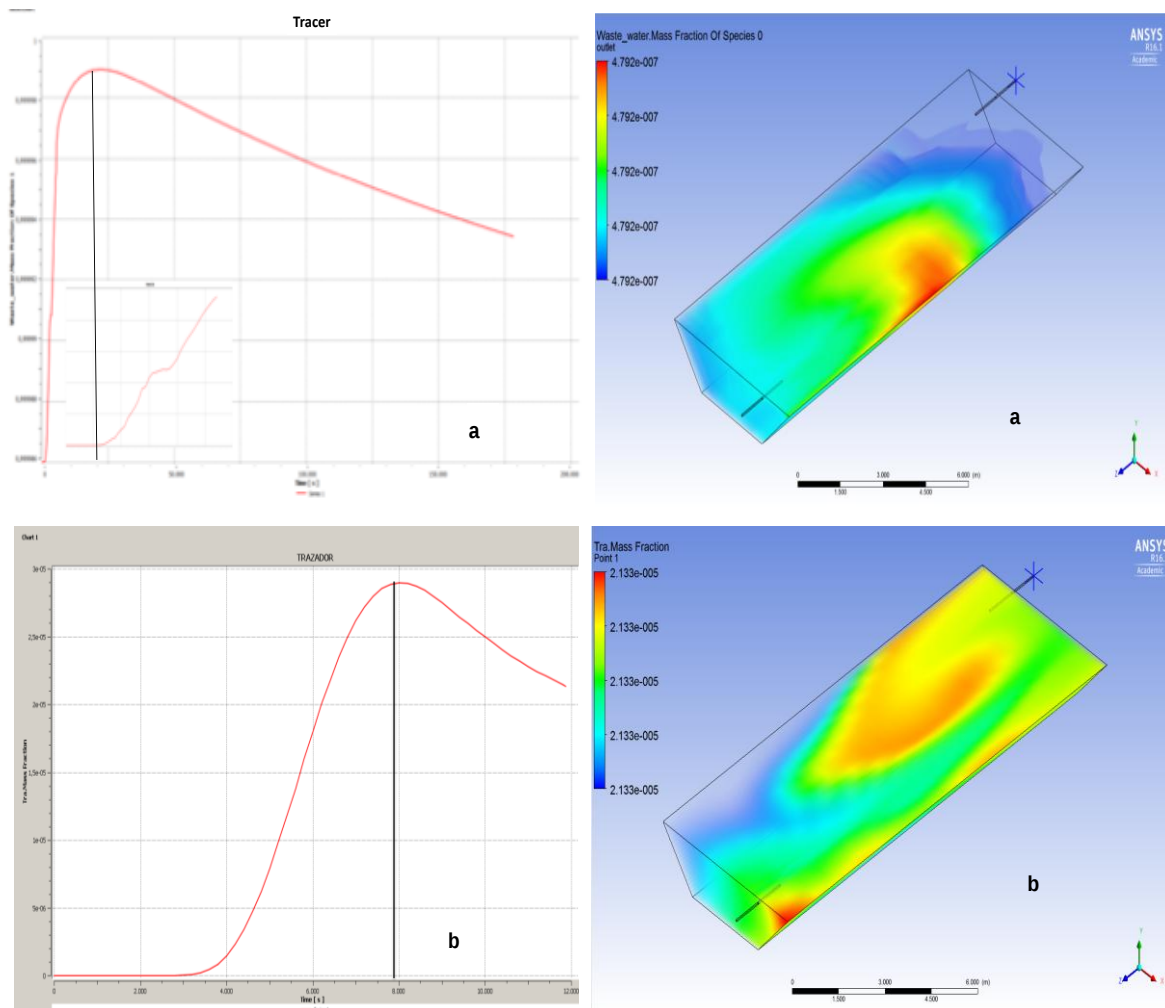


Figura 15. Inyección de trazador en el modelo CFD. (a) salida de máxima concentración y distribución del trazador en el volumen de agua para el modelo monofásico, (b) salida de máxima concentración y distribución del trazador en el volumen de agua para el modelo bifásico.

Las curvas de distribución del tiempo de residencia (RTD) del trazador, exhiben diferencias entre los datos experimentales de los estudios 1 y 2 y los datos obtenidos con cada modelo. Una de las causas para esta situación es la presencia de la biomasa de algas y otras partículas en suspensión dentro de la laguna. Se ha demostrado la fuerte interferencia de la biomasa de algas en el método de cuantificación del trazador la cual fue verificada por Camargo-Valero & Mara (2009). Esto se presenta debido a que las algas en suspensión pueden absorber energía a las mismas longitudes de onda del trazador, provocando errores en la cuantificación, por encima del valor real. En este caso, la concentración de clorofila fue mayor durante el estudio de trazadores 2 que en el 1, (1069 $\mu\text{g.l}^{-1}$ vs 859 $\mu\text{g.l}^{-1}$ respectivamente). Estas diferencias en la concentración de clorofila pueden explicar porque el porcentaje de recuperación del trazador obtenido en el estudio 2 (64%) fue mayor al obtenido en el estudio 1 (57%).

En otras investigaciones se ha demostrado que el porcentaje de recuperación de trazador ideal para este tipo de estudios experimentales debería ser alrededor del 90%. Esto permite una mayor confiabilidad de la curva de distribución del tiempo de residencia y, en consecuencia una mejor predicción del comportamiento hidrodinámico del fluido dentro del ecosistema, (Pérez, Rincón and Bracho, 2011). Sin embargo, experimentalmente estos porcentajes de recuperación son difíciles de alcanzar. Se han reportado porcentajes de recuperación del trazador que van desde 29% de rodamina WT, (Lin *et al.*, 2003) hasta valores cercanos al 70% (Pérez, Rincón and Bracho, 2011). Son varias las explicaciones para estas variaciones en los porcentajes de recuperación. La primera, está relacionada con la estructura química de la molécula de rodamina WT y las propiedades físicas que exhibe. La rodamina WT pertenece a una familia de compuestos orgánicos heterocíclicos fluorescentes cuya estructura química está basada en la molécula de xanteno, (McMurry, 2008). Autores como (Lin *et al.*, 2003), argumentaron que la estructura química de la molécula y su grupo funcional (grupo amino primario) favorecen un mayor valor del coeficiente de reparto octanol-agua (constante K_{ow} = 89.13) haciendo que la adsorción sobre la superficie de las partículas de materia

orgánica sea el mecanismo preferido por la molécula y el que más favorece la pérdida de trazador. Esto se debe entre otras razones, a que al adherirse cobran relevancia fenómenos hidrodinámicos como las zonas de recirculación y zonas muertas, (Rosero *et al.*, 2008), sitios donde el material particulado incrementa su tiempo de permanencia dentro de la laguna y sufre en mayor proporción procesos de sedimentación lo que a su vez favorece la deposición de la rodamina WT en el bentos de la laguna. También, se ha encontrado que procesos de tipo biológico y fotoquímicos favorecen la pérdida de trazador en proporciones que varían desde un 3% a 10% de la masa total inyectada, debido a la degradación de la molécula de rodamina WT, (Lin *et al.*, 2003).

En la Figura 14 se puede observar que la curva RTD para el modelo monofásico tiene una ligera desviación hacia la izquierda ($t = 0.5$ horas) y un valor más bajo de varianza que el modelo bifásico y los estudios experimentales de trazadores 1 y 2, (ver Tabla 21). Este comportamiento de la curva RTD puede ser explicado por la no inclusión del efecto de los sólidos suspendidos sobre el fluido en el modelo monofásico. La interacción o efecto que tienen los sólidos en suspensión y el fluido está representada por las fuerzas de arrastre y deslizamiento (drag and slip forces respectivamente). Las fuerzas de arrastre, son fenómenos complejos que dan cuenta de las fuerzas que desde el fluido actúan sobre los sólidos inmersos en estos. Estas fuerzas se pueden clasificar en fuerzas directas, las cuales son ejercidas por la presión del fluido sobre la superficie de las partículas de sólidos. Fuerzas de forma, que hacen referencia a la forma geométrica de los sólidos, generalmente asumidos como esferas o cilindros para simplificar el problema y fuerzas de pared que son ejercidas perpendicularmente sobre la superficie de las pequeñas partículas en suspensión, (Bird, Stewart and Lightfoot, 2007). En la Figura 16 se representa la manera cómo actúan las fuerzas de arrastre sobre una partícula esférica inmersa en un fluido.

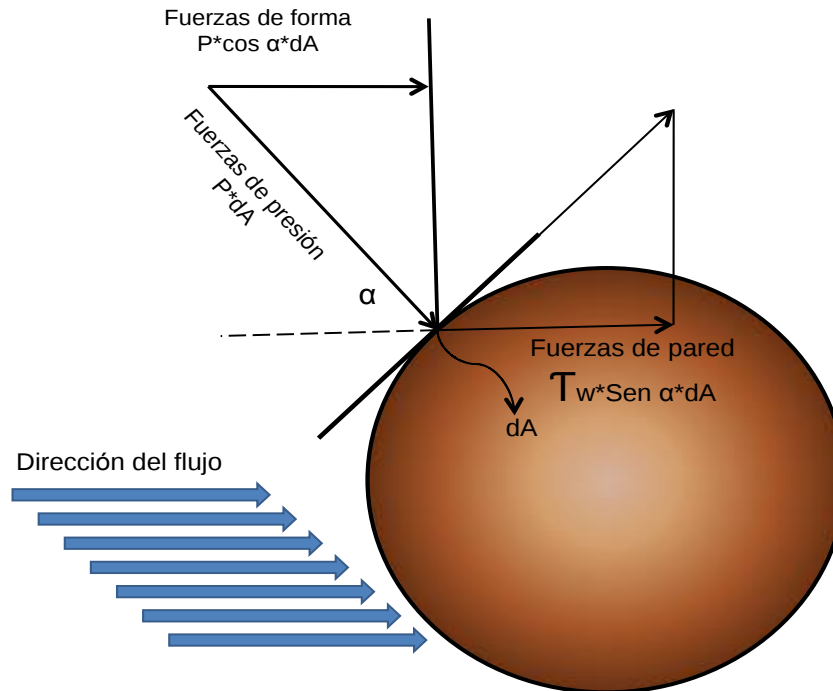


Figura 16. Representación de las fuerzas de arrastre que actúan sobre una partícula esférica

Por su parte, las fuerzas de deslizamiento son todas aquellas fuerzas que favorecen el desplazamiento de las partículas dentro del fluido, (Wu, 2013). En este caso particular es posible encontrar fuerzas como la centrífuga especialmente en zonas de la laguna como las zonas de recirculación o zonas de estancamiento o la fuerza de gravedad que favorece el movimiento de las partículas desde la superficie hacia el bentos de la laguna.

Estudios experimentales y simulaciones CFD desarrollados para sistemas multifásicos (sólido-fluido), han demostrado la importancia de incluir los fenómenos de interacción asociados a las fuerzas de arrastre y deslizamiento en las representaciones de estos sistemas hechas con modelo CFD. Brucato, Grisafi and Montante, (1998) demostraron que los coeficientes de rozamiento de partículas milimétricas o sub-milimétricas inmersas en un fluido líquido pueden incrementarse hasta 40 veces debido a los efectos de la turbulencia. También demostraron que al incluir en sus modelos matemáticos el efecto de las

interacciones sólidos-fluido representadas por los coeficientes calculados se mejoró la precisión de los cálculos hidrodinámicos. Posteriormente, Wadnerkar *et al.*, (2012) demostraron a través de la CFD que incluir en el modelo las interacciones sólidos-fluido (liquido) mejora de manera crítica las predicciones del modelo, por lo que resaltaron la importancia de la selección adecuada del modelo con el que se van a representar las fuerzas de arrastre y deslizamiento. Investigaciones más recientes ratificaron los resultados encontrados por Wadnerkar *et al.*, (2012) y lograron demostrar la importancia de incluir las fuerzas de arrastre y deslizamiento en las simulaciones de sistemas multifásicos realizadas con técnicas de CFD, (Tamburini *et al.*, 2013, 2014; Ashmawy, 2016). En la Tabla 21, se comparó el tiempo de retención hidráulico teórico con el tiempo de retención obtenido en los modelos monofásico y bifásico. Se encontró que en ambos casos el tiempo de retención hidráulico simulado estuvo por debajo del valor real. Para el modelo monofásico un porcentaje de error del 35% y para el modelo bifásico de 26%. Esto significa que en el modelo monofásico el trazador viaja desde la entrada hasta la salida más rápido que en el modelo bifásico y que este último modelo ofrece una mejor representación de la hidrodinámica dentro del ecosistema.

Tabla 21. Comparación de los parámetros obtenidos con los modelos CFD y los estudios de trazadores 1 y 2

Parámetro	Estudio 1	Estudio 2	Modelo monofásico	Modelo bifásico
Tiempo de retención experimental (h)	75	111	62	70
Tiempo de retención teórico (h)	95.76	95.76	95.76	95.76
Porcentaje de error (%)	22	16	35	26
Varianza (σ^2)	4602	4414	3057	4607
δ	0.406	0.340	0.403	0.478

En conclusión, el fluido en un ecosistema del tipo laguna facultativa, es mejor representado en los ejercicios de modelación hidrodinámica como un fluido multifásico en el que se incluyan las interacciones partículas – fluido representadas por las fuerzas de arrastre y deslizamiento y, más aún cuando los paquetes de modelación CFD cuentan con las herramientas necesarias para hacerlo.

6.3.5 Acople de la ecuación de energía y ecuaciones de transferencia de energía por radiación

6.3.5.1 Patrones de temperatura

Se utilizó el modelo bifásico, para simular los perfiles de temperatura del cuerpo de agua, la transferencia de energía a través de las paredes circundantes y los perfiles de penetración de la radiación solar incidente. Para las paredes se evaluaron y compararon dos tipos de material: suelo y una geomembrana de polietileno con la cual se recubrió el área interna de la laguna. Para ello, se acopló la ecuación de energía con las ecuaciones de transferencia de energía por radiación y el modelo “solar load”. Este ultimo permitió simular la radiación solar incidente en el municipio de Ginebra-Valle del Cauca.

En el primer escenario simulado se utilizó la geomembrana de polietileno. En este, a partir del quinto día de simulación la temperatura del efluente alcanzó un valor cercano a los datos experimentales. El valor simulado fue 25.15 °C mientras el experimental 24.77 °C, lo que indicó un porcentaje de error de 1.50%. Por su parte, el escenario en el que no se uso la geomembrana, es decir, donde las paredes internas estaban sin recubrimiento, el efluente alcanzó una temperatura de 24.45 °C para un error de 1.30%. Los dos escenarios dieron resultados muy cercanos al valor experimental. Sin embargo, la geomembrana permitió un incremento en la temperatura del efluente de 0.7 °C respecto del suelo. Adicionalmente, se monitorearon tres puntos en el interior de la laguna correspondientes al punto P2 y sus profundidades, (0.05m, 0.45m y 1.40m). La

Tabla 22 muestra la comparación entre los datos experimentales y simulados en cada escenario para la ubicación P2.

Tabla 22. Comparación datos experimentales y simulados de temperatura en el punto P2. Geomembrana y suelo sin viento.

Profundidad (m)	Experimental	Geomembrana	Suelo	Error (%)	
	(°C)			G*	S*
0.05	25.80	25.25	24.55	2.13	4.84
0,45	25.10	25.25	24.55	0.60	2.19
1.40	24.12	24.55	23.65	1.78	1.95

* G: geomembrana, S: suelo

La Tabla 22 muestra que la geomembrana, favorece el incremento de la temperatura del cuerpo de agua del ecosistema en cada profundidad. Para las profundidades 0.05 m y 0.45 m el incremento fue 0.7 °C mientras, para 1.40 m fue 0.9 °C. Aunque estos incrementos parecieran ser no significativos, demuestran que en el diseño de las lagunas facultativas, la selección del material para las paredes circundantes, puede desempeñar un rol importante en el comportamiento térmico del ecosistema. Es decir, la selección adecuada del material puede facilitar un incremento de la temperatura del cuerpo de agua para favorecer procesos de biorremediación como la amonificación, la nitrificación y la metanogénesis. De acuerdo con Von Sperling and Lemos, (2006), este tipo de ecosistemas son muy influenciados por variables físicas como la temperatura. Esto, gracias a que no son sistemas mecanizados y que basan su funcionamiento en procesos naturales. Von Sperling and Lemos, (2006) argumentaron que aumentos en la temperatura del cuerpo de agua disminuyen los requerimientos de área superficial (tierra) y mejoran las eficiencias de conversión de procesos de biorremediación como la amonificación y la nitrificación. En otros estudios, se ha demostrado que incrementos entre 2°C y 4°C en la temperatura del agua residual, mejoran la eficiencia de conversión del proceso de metanogénesis que se presenta en el bentos de la laguna, (Zinder, Anguish and Cardwell, 1984; Kalyuzhnyi, Martinez

and Martinez, 1997; Karteris, Papadopoulos and Balafoutas, 2005; Spachos and Stamatis, 2011). La Figura 17, muestra los perfiles 3D para la temperatura obtenidos con la geomembrana.

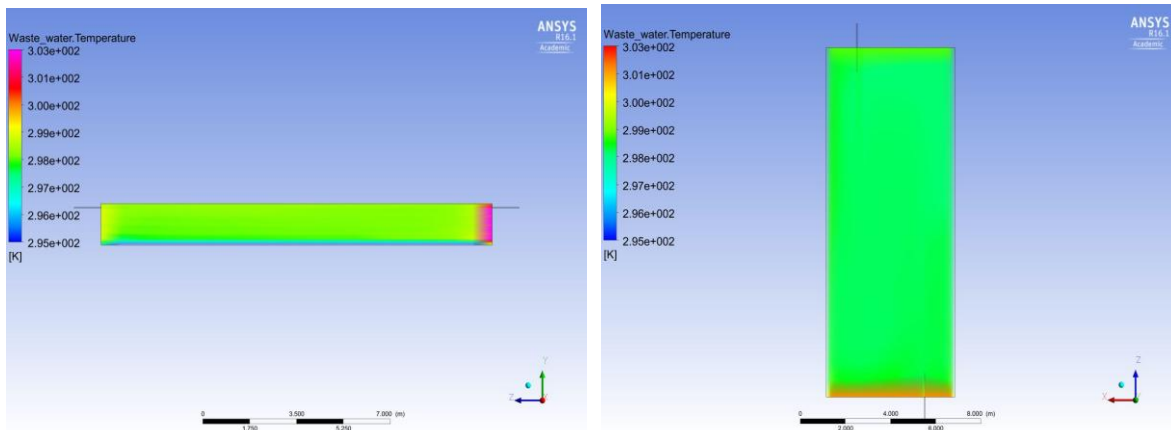


Figura 17. Perfiles de temperatura transversal y longitudinal para la geomembrana.

Los perfiles presentan dos gradientes. En el primero la temperatura se incrementa longitudinalmente, es decir desde la entrada hasta la salida y en el segundo la temperatura decrece desde la superficie hasta el fondo, este se denomina el gradiente transversal. En general, los dos gradientes son pequeños, lo que demuestra la estabilidad térmica del volumen de agua del ecosistema. Como se sabe el agua tiene la capacidad de formar puentes de hidrógeno, razón por la cual, parte del calor transferido hacia el volumen de agua de la laguna se utiliza en romper estos enlaces. La cantidad restante es absorbida por el agua, las sustancias húmicas y material en suspensión para su calentamiento, (Incropera and DeWitt, 1996). Este calentamiento, además de la radiación solar, es ocasionado por la transferencia de calor con el aire en la superficie y por la masa de agua que ingresa en el afluente. Al parecer, estos dos procesos no afectan de manera significativa la temperatura del volumen de agua en la laguna. Básicamente, porque gracias a su alta capacidad calorífica el agua residual minimiza los cambios de temperatura, (Himmelblau, 1969). Además, por que los cambios en la temperatura del aire, (variaciones nictemerales) ocasionados por las

condiciones climáticas tropicales predominantes en el municipio de Ginebra –Valle del Cauca, no son lo suficientemente drásticas para generar cambios significativos en la temperatura del volumen de agua. Mediciones experimentales realizadas durante cuatro jornadas de 24 horas mostraron que el delta de la temperatura del aire entre el día y la noche estuvo entre los 0.2 °C y los 7.2°C.

También, los dos gradientes de temperatura, se pueden explicar por la penetración de la radiación solar en el cuerpo de agua, por el fenómeno de transporte de sólidos y por la temperatura del volumen de agua que entra en el afluente, (Kayombo *et al.*, 2002). En el caso del gradiente transversal, al aumentar la profundidad disminuye la penetración de la radiación solar. Esto se debe a las características propias del agua residual (transmitancia) y a una mayor densidad de sólidos suspendidos a medida que aumenta la profundidad. Por lo tanto, se espera que el fondo sea la zona más fría de la laguna. La Figura 17(B) muestra que el fondo ($h = 1.47\text{m}$) es la zona más fría con una diferencia de 0.7 °C para la geomembrana y 0.9 °C para el suelo, respecto a la superficie ($h = 0.05\text{m}$).

El gradiente transversal mostrado por el modelo, coincide con estudios experimentales que exhiben este mismo comportamiento en lagunas facultativas secundarias, (Correa Restrepo, 2008; Sah, Diederik, Rousseau, *et al.*, 2011; Torres *et al.*, 1999). La Tabla 23, muestra las diferencias de temperatura entre la superficie y el fondo de lagunas facultativas secundarias, ubicadas en diferentes zonas geográficas y condiciones ambientales de regiones tropicales. En la tabla se observa que en ninguno de los estudios, se sobrepasan los 4 °C de diferencia y, que el delta de temperatura obtenido experimentalmente y con el modelo CFD se encuentra dentro del rango de los estudios mencionados. Autores como Torres *et al.* (1999) manifestaron, que diferencias de temperatura inferiores a los 5 °C pueden asumirse como la ausencia del gradiente de temperatura en este tipo de ecosistemas para la biorremediación de aguas residuales. Esto se debe, según Torres *et al.* (1999) a que variaciones inferiores a los 5 °C no producen cambios significativos en la densidad del fluido. Lo anterior coincide con lo expuesto por

Smith, Van Ness and Abbott, (1997) quienes determinaron experimentalmente que cambios en la temperatura del volumen de agua similares a los rangos obtenidos en este estudio, modifican la densidad del fluido desde 997.4 kg.m^{-3} hasta 996.9 kg.m^{-3} . Por lo anterior, es posible afirmar que los dos pequeños gradientes mostrados en la Figura 17, en realidad corresponden a pequeñas variaciones de la temperatura del cuerpo de agua, que no alcanzan a generar gradientes significativos en la densidad del volumen de agua. Otra razón para las pequeñas variaciones de temperatura mostradas en la Figura 17, son las condiciones ambientales predominantes en la zona donde esta ubicada la laguna, (Ragush *et al.*, 2017). En este sentido Ginebra, Valle del Cauca es un municipio que se caracteriza por la estabilidad de condiciones ambientales como la temperatura, cuyos valores generalmente se mantienen en el rango de los 22°C a los 30°C . Estas variaciones poco drásticas en la temperatura del aire, sumadas a factores como la poca profundidad del ecosistema (1.47m), su reducida área superficial (83.22m^2), la cual limita la transferencia de calor en la superficie, la estabilidad de los periodos de insolación de la superficie del fluido (aproximadamente 12 h), las barreras físicas que reducen el paso del viento (árboles) alrededor de la laguna y la capacidad calorífica del agua residual, ($4094 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$) desfavorecen la estratificación térmica del cuerpo de agua del ecosistema.

Tabla 23. Deltas de temperatura superficie-fondo en lagunas facultativas

Ubicación	T ($^{\circ}\text{C}$) superficie	T ($^{\circ}\text{C}$) fondo	Diferencia	Observación
Santa Fe – Antioquia (Colombia) (Correa Restrepo, 2008)	28.14	27.89	0.25	Condiciones tropicales (500 msnm)
León (Nicaragua) (Sah, Diederik, Rousseau, <i>et al.</i> , 2011b)	31	27	4.0	Condiciones tropicales (100 msnm)
Cieza (España) (Torres <i>et al.</i> , 1999)	12.5	12.0	0.5	Mediterráneo continental

				(200 msnm)
Ubicación	T (°C) superficie	T (°C) fondo	Diferencia	Observación
Ginebra (Colombia) Experimental	25.8	24.1	1.7	Condiciones tropicales (1100 msnm)
Modelo CFD geomembrana	25.3	24.6	0.7	Condiciones tropicales
Modelo CFD suelo	24.6	23.7	0.9	Condiciones tropicales

La variación longitudinal de la temperatura, además de la radiación solar es influenciada por factores como el fenómeno de transporte de sólidos y la transferencia de calor desde la masa de agua que entra en el afluente. Autores como A. Shilton and Harrison (2003) han demostrado que los sólidos con mayor diámetro de partícula ($>80\ \mu\text{m}$) tienden a depositarse cerca a la entrada del afluente mientras los de diámetro más pequeño ($<20\ \mu\text{m}$) son transportadas por el fluido a diferentes zonas de la laguna como zonas de recirculación o hasta la salida del efluente. Esto, genera un gradiente longitudinal en la concentración de los sólidos suspendidos, lo que permite una mayor penetración de la radiación solar incidente en el tramo final de la laguna. En esta investigación, el análisis estadístico de los datos experimentales, demostró que no existen diferencias significativas en las concentraciones de sólidos suspendidos cuando se comparan las profundidades de manera longitudinal. Un comportamiento similar se observó en las concentraciones de sólidos suspendidos obtenidas con el modelo bifásico. La ausencia de estos gradientes, puede ser atribuida a las siguientes causas: la configuración de la laguna (laguna convencional) y su relación largo-ancho ($L \times A$) la cual es 2.56 con ausencia de baffles. Autores como Abbas, Nasr and Seif, (2006), argumentaron que las mejores eficiencias de tratamiento se presentan en aquellas lagunas con una relación $L \times A$ igual a 4 con presencia de dos o cuatro baffles a $L/3$ (dos baffles) o $L/5$ (cuatro baffles). También, está el efecto del

comportamiento hidrodinámico del fluido sobre el transporte de sólidos, (Shilton, 2001), siendo el corto circuito mostrado en la Figura 11, el efecto hidrodinámico que mas desfavorece la presencia del gradiente longitudinal de esta concentración. Este fenómeno desfavorece la penetración de la radiación solar en el tramo final de la laguna, impidiendo variaciones de temperatura más pronunciadas. Finalmente, la transferencia de calor desde el agua que ingresa en el afluente, es otro factor importante que influye en los cambios de temperatura del volumen de agua dentro de la laguna facultativa. De acuerdo con Fleming, (2010), el afluente de un sistema de tratamiento de aguas residuales, experimenta variaciones cíclicas en sus características físico-químicas y microbiológicas en tramos de 24 horas. Estas variaciones son conexas a las rutinas diarias de la población. Generalmente, con mayores flujos durante el día con picos de caudal en la mañana y en la tarde y menores flujos en la noche. La temperatura no es un parámetro ajeno a estos ciclos de variación. Regularmente, los valores más altos se presentan durante el día y pueden alterar la temperatura del cuerpo de agua del ecosistema, su actividad biológica y las eficiencias de conversión de las especies químicas presentes, (Fleming, 2010). Para el caso particular del ecosistema acuático en el que se realizó esta investigación, este correspondió a una laguna facultativa secundaria, la cual recibe su afluente desde un sistema de tratamiento previo, que en este caso correspondió a una laguna anaerobia. Esta, atenúa las variaciones físico-químicas del flujo de entrada, incluida la temperatura, lo que a su vez disminuye el impacto de la transferencia de calor desde el afluente sobre el volumen de agua del ecosistema. En la Tabla 24 se presentan las mediciones de temperatura en el afluente durante las jornadas de muestreo de 24 horas. Al comparar los datos tomados durante el día con los medidos en la noche, fue posible observar que el delta de temperatura del afluente estuvo entre 0.50 °C y 4.50 °C, valores cercanos al delta de temperatura del aire que estuvo entre 0.60 °C y 7.20°C. En conclusión, es posible inferir que el ecosistema acuático construido del tipo laguna facultativa secundaria, en el cual se realizó esta investigación es, bajo las condiciones dadas, resiliente térmicamente a los procesos de transferencia de calor desde el afluente y el aire en la superficie. Lo

anterior significa que el ecosistema tiene la capacidad de absorber las perturbaciones ocasionadas por la transferencia de calor desde el efluente y la superficie sin que se altere significativamente la temperatura del volumen de agua dentro de la laguna.

Tabla 24. Deltas de temperatura del afluente en periodos de 24 horas

Fecha	Día		Noche		Delta (T afluente) °C
	Hora	Temperatura afluente (°C)	Hora	Temperatura afluente (°C)	
12/06/15	08:00	27,00	20:00	24,40	2,60
	13:00	29,00	01:00	24,90	4,10
	16:00	29,00	05:00	24,50	4,50
3/07/15	08:00	25,15	20:00	28,00	2,85
	10:00	26,10	22:00	26,60	0,50
	13:00	27,80	01:00	24,00	3,80
	16:00	27,00	05:00	24,00	3,00
23/07/15	08:00	24,00	20:00	26,15	2,15
	10:00	25,60	22:00	26,40	0,80
	13:00	26,30	01:00	27,70	1,40
	16:00	26,00	05:00	27,50	1,50
18/08/15	08:00	24,90	20:00	26,15	1,25
	10:00	24,80	22:00	27,90	3,10
	13:00	23,30	01:00	27,10	3,80
	16:00	24,00	05:00	26,50	2,50

6.3.5.2 Transferencia de calor hacia el suelo circundante

Posteriormente, se realizaron simulaciones para estudiar la transferencia de calor desde el cuerpo de agua del ecosistema hacia el entorno. En cada simulación se empleó un tiempo computacional de 2.51 veces el tiempo de retención hidráulico teórico. Las simulaciones mostraron, que las pérdidas de calor del volumen de agua a través de las paredes circundantes, son mayores cuando no se usa la geomembrana para recubrir las paredes internas de este ecosistema. Es decir, la geomembrana hace las veces de un aislante térmico. La Figura 19 muestra los contornos de transferencia de calor a través de las paredes laterales. La Figura

19(a) corresponde a la geomembrana mientras la Figura 19(b) al suelo sin geomembrana. Los resultados indicaron que el rango para el flux de calor (perdidas de calor) con la geomembrana estuvo entre 0 y -27.78 W.m^{-2} , mientras para el suelo estuvo entre 0 y -166.70 W.m^{-2} . Estas diferencias en el valor del flux de calor son una de las explicaciones de porque con el recubrimiento de la geomembrana, las temperaturas del cuerpo de agua fueron más elevadas. Los resultados de las simulaciones también dejaron en evidencia que en ambos escenarios las mayores pérdidas de calor del ecosistema se dan a través del fondo de la laguna.

La superficie del volumen de agua, es otra área de la laguna a través de la cual hay procesos importantes de transferencia de calor. Ecosistemas del tipo lagunas facultativas secundarias podrían ser catalogados como ecosistemas polimícticos, de acuerdo a la clasificación dada por Von Sperling and Lemos, (2006), cuyas pérdidas o ganancias de calor dependen del comportamiento de factores abióticos como la temperatura del aire, la temperatura del cuerpo de agua, el viento en la superficie y la radiación solar. En ese sentido, Yáñez, (1993) y Brito (2000) citado por (Von Sperling and Lemos, 2006) establecieron correlaciones para calcular la temperatura del volumen de agua en función de la temperatura del aire (ver Ecuación 19). Estos autores encontraron que para rangos en la temperatura del aire entre los 15°C y 30°C , (rangos similares a los medidos en Ginebra-Valle del Cauca), la temperatura del volumen de agua en las lagunas facultativas se mantuvo 1°C a 5°C por encima de la temperatura del aire.

$$T_{\text{liquido}} = 12.7 + 0.54 * T_{\text{aire}}$$

Ecuación 19. Correlación de Yáñez, (1993)

Experimentalmente, resultados similares fueron encontrados por Aguirre, Ruiz and Múnera, (2007). Estos autores encontraron variaciones nictemerales en la temperatura del volumen de agua de lagunas facultativas secundarias entre 4°C y 6.7°C por encima de la temperatura del aire. Las mayores temperaturas del cuerpo de agua se presentaron entre las 11:00 am y las 3:00 pm, periodo en el que se

presenta la mayor irradiancia solar sobre la superficie del volumen de agua. Un comportamiento similar se encontró en las mediciones hechas en esta investigación. La Figura 18 muestra el comportamiento de la temperatura del aire y el agua residual durante las 4 jornadas de muestreo de 24 horas.

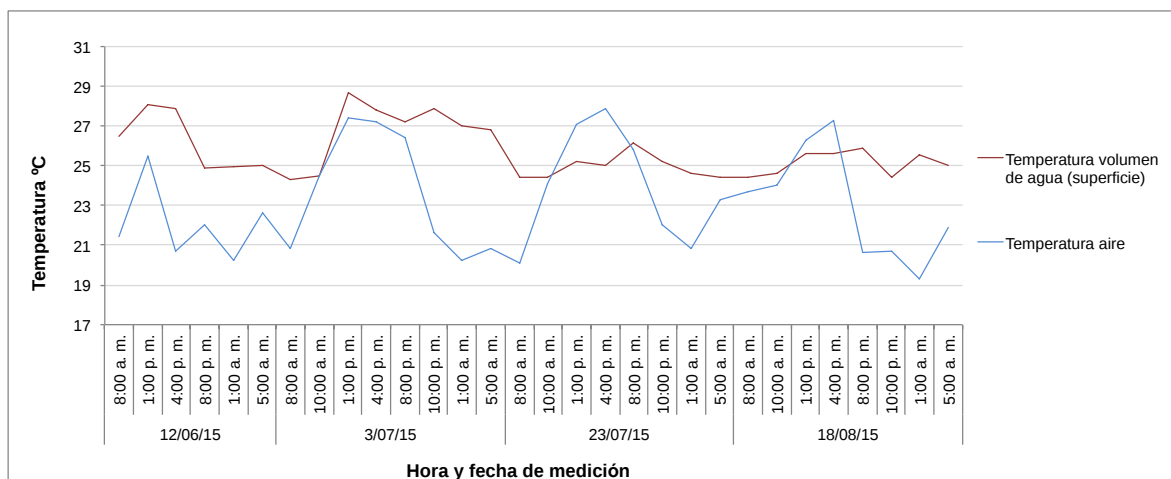


Figura 18. Variaciones en la temperatura del aire y el volumen de agua

En la figura, se puede observar que la tendencia es que la temperatura del volumen de agua de la laguna permanezca por encima de la temperatura del aire, excepto en dos ocasiones (día 23.07.2015 entre 10:00 am y 8:00 pm y 18.08.2015 entre 1:00 pm y 4:00 pm) donde la temperatura del aire fue superior, estas épocas corresponden a unas de las más calurosas del año en la zona de estudio. De acuerdo con lo argumentado por Aguirre, Ruiz and Múnera, (2007) y Correa Restrepo, (2008), esta última situación es favorecida por el aumento en la velocidad del viento en la superficie que coadyuva a la pérdidas de calor por convección del volumen de agua. En estas pérdidas de calor y la subsecuente disminución en la temperatura del fluido juega un papel importante el área superficial del ecosistema, (Incropera and DeWitt, 2006) la cual, como ya se mencionó debido a su poca extensión desfavorece la pérdidas o ganancias de calor por convección. Finalmente, autores como Von Sperling and Lemos, (2006) argumentaron que en estos casos, las pérdidas de calor en la superficie del fluido

se compensan por la transferencia de calor desde el bentos de la laguna lo que a su vez favorece la estabilidad térmica del volumen de agua.

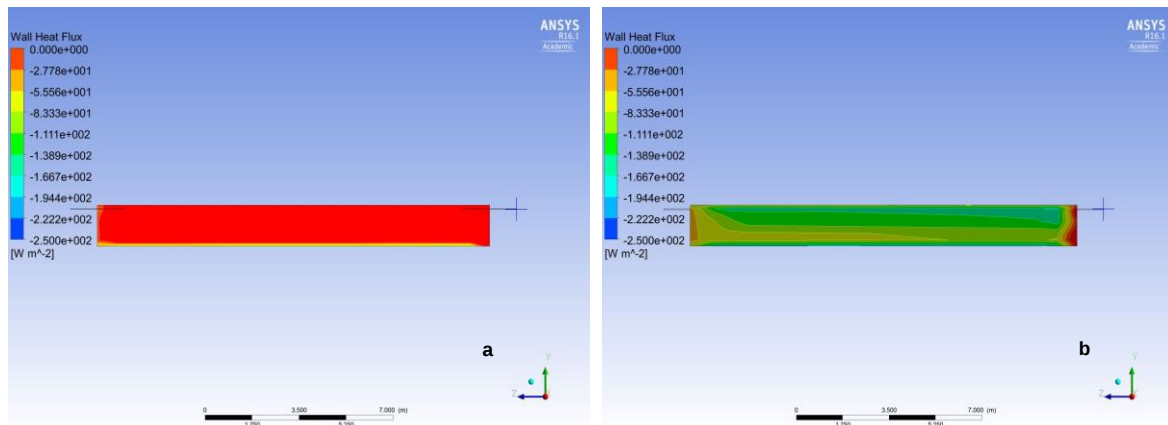


Figura 19. Flux de calor (pérdidas) a través de las paredes laterales, (a) geomembrana, (b) suelo.

6.3.5.3 Perfiles de penetración de radiación solar

Los perfiles de penetración de radiación solar incidente en el cuerpo de agua se muestran en la Figura 20. En la figura es posible observar la atenuación de la radiación solar al aumentar la profundidad, (Curtis *et al.*, 1994). La atenuación se debe principalmente a la absorción de la luz por el agua, las sustancias húmicas y la dispersión debida al material particulado, (Curtis *et al.*, 1994; Sukias *et al.*, 2001). En ese orden de ideas, es posible establecer una relación entre el aumento de la concentración de sólidos suspendidos y la atenuación de la radiación solar. La Tabla 25 muestra la comparación entre los datos simulados para la concentración de sólidos suspendidos y radiación solar en los puntos P1, P2 y P3 y sus respectivas profundidades.

De acuerdo con Sukias *et al.* (2001), los sólidos suspendidos contribuyen a la atenuación de la radiación por sustancias húmicas y material particulado, la mayor penetración de radiación solar en las capas superiores del cuerpo de agua de la

laguna, obedece a Radiación Fotosintéticamente Activa (PAR, aproximadamente entre 400nm y 800nm) la cual tiene una media de penetración en el cuerpo de agua de 0.11m.

Tabla 25. Relación entre concentración sólidos suspendidos y radiación incidente

Profundidad (m)	Punto P1		Punto P2		Punto P3	
	Conc. (%)	Rad. (W.m ²)	Conc. (%)	Rad. (W.m ²)	Conc*. (%)	Rad*. (W.m ²)
0.05	0.026	1.246	0.026	1.280	0.023	1.286
0,45	0.052	0	0.053	0	0.032	0
1.40	0.093	0	0.094	0	0.093	0

*Conc: concentración; Rad: radiación

En esta investigación, fue posible demostrar con el modelo que la penetración de la radiación solar en el cuerpo de agua alcanza los 0.13 m de profundidad, valor muy próximo al valor teórico encontrado. De igual manera, mediciones en campo de la penetración de la radiación hechas con disco secchi, mostraron longitudes entre 0.10 y 0.15m de profundidad. Estos valores confirman y validan los resultados del modelo. Por encima de los 0.12 m de profundidad el modelo muestra que no hay penetración de radiación solar, (Ver Figura 20). Con esta información, es posible concluir que los procesos fotosintéticos y de foto-oxidación, solo cuentan con una pequeña fracción del volumen total de la laguna para ser llevados a cabo, esta “pequeña fracción” corresponde al 10% del volumen total de la laguna.

La radiación solar con las longitudes de onda más corta (inferiores a 400 nm) son responsables de la eliminación de microorganismos patógenos e indicadores de contaminación fecal como las coliformes fecales y virus, (Curtis *et al.*, 1994). En este sentido se puede afirmar que concentraciones de sólidos suspendidos superiores de 0.026 %P/V disminuyen la eficiencia de la laguna facultativa secundaria para eliminar este tipo de indicadores de contaminación.

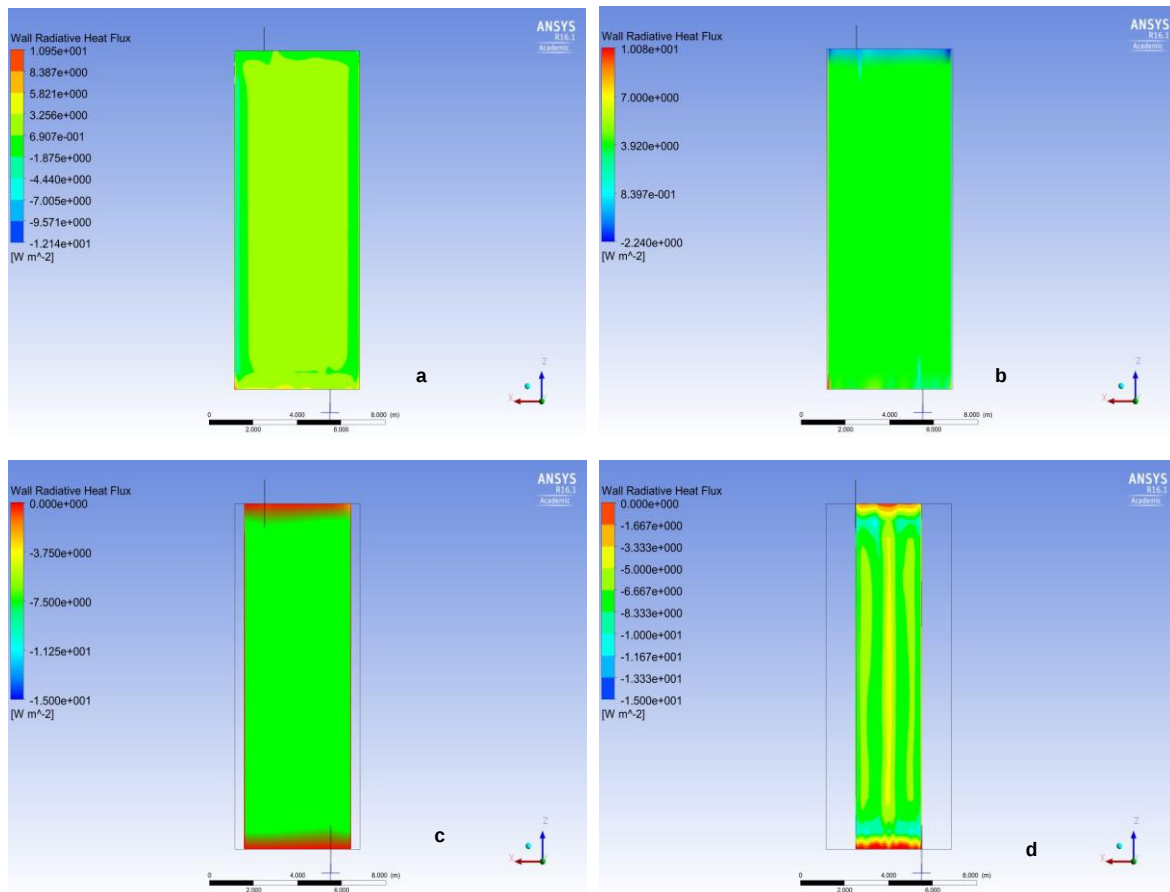


Figura 20. Perfiles de penetración de radiación solar incidente. (a) superficie, (b) 0.05 m, (c) 0.45 m, (d) 1.47 m (fondo)

6.3.5.4 Condición de viento en la superficie

En cuanto a la temperatura, al simular el efecto del viento sobre la superficie de la laguna, con una velocidad media de 0.81 m.s^{-1} se generó un leve incremento en la temperatura del efluente y en los puntos P1, P2 y P3. La temperatura simulada del efluente fue 26.65°C la cual se encontró 1.88°C por encima de la temperatura experimental. Con estos datos el error relativo en el efluente fue 7.6%. La Tabla 26 compara los datos de temperatura experimentales y simulados para la geomembrana con y sin viento en el punto P2. Se puede observar un incremento de la temperatura en las simulaciones con viento, siendo mayor el error relativo en las profundidades 0.45m y 1.40m que en la superficie, (0.05m). En estas profundidades el error fue de 5.77% y 7.59% respectivamente. Estos valores

fueron significativamente inferiores al error de 19.05% obtenido en un trabajo de modelación semejante realizado por Ukpong (2013). En ese trabajo Ukpong desarrolló su código en el lenguaje de programación Fortran. Las diferencias en los porcentajes de error son un indicador de las bondades que ofrece el modelo CFD frente a otras técnicas de modelación.

Tabla 26. Comparación datos experimentales y simulados de temperatura en el punto L/2. Geomembrana y geomembrana con viento.

Profundidad (m)	Experimental	Geomembrana	Geomembrana con viento	Error (%)	
	(°C)			G*	GW*
0.05	25.80	25.25	26.65	2.13	3.29
0,45	25.10	25.25	26.55	0.60	5.77
1.40	24.12	24.55	25.95	1.78	7.59

*G: geomembrana, GW: geomembrana con viento

Entre la comunidad científica dedicada al estudio de las lagunas facultativas, se ha generalizado el paradigma de que la estratificación térmica en las lagunas facultativas es un fenómeno natural ocasionado por la variación vertical de la temperatura y los cambios que esta genera sobre la densidad del fluido. Los cambios en la densidad alteran los patrones de flujo en la laguna, afectan su desempeño y reducen la eficiencia de su operación. De acuerdo con varios autores, esta estratificación da lugar a tres zonas en el cuerpo de agua de la laguna: el epilimnion, la termoclina y el hipolimnion, (Von Sperling and Lemos, 2006; Aguirre, Ruiz and Múnera, 2007; Correa Restrepo, 2008; Fleming, 2010; Aponte, 2013).

La anterior concepción se usa de forma muy generalizada cuando se aplica a las lagunas facultativas. Esto se debe a que se utiliza sin mencionar o tener en cuenta factores clave como la localización geográfica o las condiciones ambientales (dirección y velocidad del viento, periodo de insolación de la superficie,

temperatura del aire) del sitio donde se ubican las lagunas, (latitud, longitud, altitud) factores de diseño como la profundidad o su geometría. Ukpong, (2013a) argumentó que en los ecosistemas acuáticos es posible hablar de estratificación térmica siempre y cuando los deltas de temperatura entre la superficie y el fondo del volumen de agua sean superiores a 5°C.

En esta investigación fue evidente que, ni en los datos experimentales, ni en los datos obtenidos con el modelo para los escenarios con y sin viento en la superficie se generan gradientes superiores a 5°C (ver Tabla 27). Por lo anterior, es posible descartar el efecto de la temperatura sobre los patrones de flujo generados por el cambio en la densidad del fluido. Es decir, los resultados indican que bajo las condiciones ambientales (tropicales) del municipio de Ginebra-Valle del Cauca-Colombia, la condición de viento predominante en la superficie, el periodo de insolación, la disponibilidad de luz solar, la localización geográfica, (altitud, longitud y latitud), la profundidad del cuerpo de agua de la laguna, (ecosistema somero), no es científicamente plausible siquiera pensar en la formación de estas tres capas generadas por los cambios de temperatura. Sería más apropiado, referirse a este tipo de ecosistemas acuáticos como conformados por tres zonas en función de la penetración de la radiación solar en el cuerpo de agua. Zona fótica o eufótica, que corresponde al volumen de la laguna donde hay penetración de la radiación solar. Es la zona de la laguna donde se encuentra la mayor población de algas en actividad fotosintética y posee las concentraciones de oxígeno disuelto más altas. La zona intermedia o zona facultativa y la zona afótica, anaerobia ó bentos, que es una región con ausencia de luz y bajos niveles de oxígeno disuelto en la que se llevan a cabo procesos como la metanogénesis. En conclusión, sería posible decir que para una laguna facultativa en condiciones tropicales como las de Ginebra-Valle del Cauca-Colombia, es más adecuado concebir el cuerpo de agua como un medio isotrópico desde el punto de vista térmico.

Por otra parte, Ukpung, (2013a y 2013b) expresó que la transferencia de calor por convección entre la superficie del agua y el viento es uno de los fenómenos más complejos para representar con este tipo de modelos y la zona con mayores errores relativos entre los datos simulados y experimentales. A pesar de ello, el modelo CFD desarrollado en esta investigación generó errores relativos para la temperatura de la superficie de 3.3%.

Adicionalmente, el viento puede tener un efecto importante en el comportamiento hidrodinámico de las lagunas, esto se debe a que mejora la mezcla vertical de sus componentes y favorece el comportamiento hidrodinámico hacia reactor completamente mezclado, (Gu and Stefan, 1995; Sah, Diederik P L Rousseau, *et al.*, 2011b). Para hacer un análisis del efecto del viento sobre el comportamiento hidrodinámico de la laguna se deben tener en cuenta los siguientes factores: el área superficial de la laguna y la velocidad y dirección del viento, (Sah, Diederik P L Rousseau, *et al.*, 2011b; Ukpung, 2013b). Ukpung, demostró que el efecto de tres velocidades distintas, 2.27 m.s^{-1} , 1.88 m.s^{-1} y 1.64 m.s^{-1} sobre una laguna piloto no producían diferencias significativas entre sí, en la concentración de especies químicas y parámetros físicos como la temperatura en la superficie. Sin embargo, encontró algunas diferencias en las profundidades medias y el fondo. Un comportamiento similar se puede observar en los resultados de temperatura de la Tabla 26. Las mayores diferencias en los errores relativos de la temperatura se presentan a 0.45m y 1.40m (profundidades media y fondo respectivamente). Shilton & Harrison (2003a), sostienen que incorporar el efecto del viento en las simulaciones de computación no genera diferencias sustanciales al compararlas con los resultados cuando el efecto del viento no es tenido en cuenta. En ese sentido, los resultados de la Tabla 26 muestran que no hay diferencias significativas entre los resultados de la simulación con y sin viento.

Otra razón para que el efecto del viento no sea significativo en la laguna experimental en la que se desarrolló esta investigación, es su área superficial la cual es 83.22 m^2 . Es un área pequeña que no favorece el efecto del viento sobre la

transferencia de calor por convección en la superficie, (Incropera, 2006). Finalmente, la Tabla 27 muestra los deltas de temperatura entre la superficie y el fondo para cada escenario evaluado. En la tabla se puede observar que los escenarios con y sin viento presentan el mismo valor.

Tabla 27. Deltas de temperatura superficie-fondo en lagunas facultativas

Ubicación	T (°C) superficie	T (°C) fondo	Diferencia	Observación
Ginebra (Colombia) Experimental	25.8	24.1	1.7	Condiciones tropicales
Modelo CFD suelo	24.6	23.7	0.9	Condiciones tropicales
Modelo CFD geomembrana	25.3	24.6	0.7	Condiciones tropicales
Modelo CFD geomembrana con viento	26.7	26.0	0.7	Condiciones tropicales

6.3.5.5 Determinación experimental del retardante de llama BDE 99

A manera de estudio exploratorio, se usó el modelo bifásico para simular el transporte del retardante de llama BDE 99 en la laguna facultativa secundaria. En ese orden de ideas, la técnica analítica de cuantificación (GC-MS/MS), permitió detectar la presencia y medir la concentración en la laguna de los compuestos orgánicos presentados en la Tabla 28. Se cuantificaron los bifenilos policlorados (PCBs) 44 y 66, el plaguicida Endrín y el retardante de llama BDE 99. Estos compuestos son catalogados como persistentes en el ambiente. Los PCBs 44 y 66 como cancerígenos, (IRIS, 1994) y el BDE 99 como potencialmente nocivo para la salud humana, (Morrissey, Hend and Mary, 2008). La laguna experimental, presentó eficiencias de eliminación para estos compuestos entre 69% y 92%. Recientemente, Kim *et al.*, (2013) evaluaron la eficiencia de eliminación de los

congéneres PBDE 47 al 209 en veinte sistemas de tratamiento de agua residual, incluidas dos lagunas facultativas secundarias, localizados en distintas regiones de Canadá. Kim y colaboradores encontraron que las lagunas facultativas presentaron eficiencias de eliminación promedio entre 36% y 90%. Los valores más bajos correspondieron a la época invernal, mientras los más altos a la temporada de verano. También, encontraron que la eficiencia de eliminación de los PBDE es directamente proporcional al aumento de la temperatura del volumen de agua e inversamente proporcional a la concentración de sólidos en el efluente. Los resultados experimentales encontrados, son acordes a los hallazgos de Kim *et al.*, (2013). Esto, gracias a que por su localización geográfica, la laguna experimental no tiene como limitante los cambios drásticos (bajas temperaturas) en la temperatura del volumen de agua, lo cual explica las eficiencias de eliminación mostradas en la Tabla 28. Por lo anterior, es posible colegir que este tipo de ecosistemas acuáticos contruidos, localizados en zonas tropicales, poseen ventajas en cuanto a la eliminación de este tipo de compuestos orgánicos, frente a sus análogos ubicados en latitudes más al norte o sur del planeta. Otra ventaja importante de este tipo de ecosistemas localizados en regiones tropicales, respecto a la degradación de estos contaminantes, es la abundancia de radiación solar y la estabilidad de los periodos de insolación de la superficie de la laguna. Recientes investigaciones a escala de laboratorio han demostrado que la biotodegradación de los PBDE es un proceso importante en la eliminación de este tipo de compuestos, (Leal, Esteves and Santos, 2013). La limitación mas importante en este aspecto, es la presencia en el volumen de agua de sustancia húmicas y material particulado. Estudios realizados por USEPA (1998) y Leal, Esteves and Santos, (2013) demostraron que las moléculas de los PBDE se adhieren, gracias a su hidrofobicidad a la superficie de las pequeñas partículas de sólidos en suspensión. Estas, facilitan su transporte hasta el efluente y limitan la penetración de la radiación solar que en últimas es la responsable de la eliminación por foto-degradación.

En conclusión, la eliminación de compuestos orgánicos persistentes como los PBDE en las lagunas facultativas, es un área de investigación relativamente nueva, con muchos interrogantes aún por responder. Esto, debido a que las investigaciones hechas hasta el momento han sido a escala de laboratorio, que no tienen en cuenta las variaciones ambientales y climatológicas reales del sitio donde se localizan las lagunas y, en las que no se ha evaluado la degradación llevada a cabo por los microorganismos. Esta última, con mucho potencial en este tipo de ecosistemas acuáticos gracias a la presencia de cofactores como la temperatura, las condiciones super-óxicas en ciertas regiones del ecosistema acuático y la presencia de exo-enzimas microbianas.

Tabla 28. Concentración de compuestos orgánicos en la laguna

Compuesto	Entrada	Salida	P/2 (1.40m)			%
	µg. kg ⁻¹	µg. kg ⁻¹	µg. kg ⁻¹			Eliminación
Aldrín	<5	<5	<5	<5	<5	N.A
PCB_44	18,9	<5	49,0	<5	<5	74,0
PCB_66	64,5	<5	49,2	41,2	77,2	92,0
Endosulfan	<5	<5	<5	<5	<5	N.A
4,4-DDE	<5	<5	<5	<5	<5	N.A
Endrín	50,45	<5	<5	<5	<5	90,0
4,4-DDD	<5	<5	<5	<5	<5	N.A
BDE 99	16,16	5	32,2	115,3	36,1	69,0
BDE 100	<5	<5	<5	<5	<5	N.A

6.3.5.6 Escenario CFD para transporte del Retardante de llama BDE 99

Para este escenario el tiempo computacional requerido fue 10 días, (2.51 veces el tiempo de retención hidráulico teórico). En este periodo de tiempo, el modelo alcanzó una concentración simulada para el retardante de llama en el efluente de 0.01243 %P/V. Este valor corresponde a una eficiencia de eliminación simulada con el modelo de 87.57%. De esta forma, al comparar la eficiencia simulada

(87.57%) con la eficiencia de eliminación real (69%) se obtuvo un porcentaje de error del 26%. Este porcentaje de error es un indicador aceptable de que las técnicas de modelación CFD poseen potencial suficiente para representar procesos complejos como la degradación y transporte de contaminantes orgánicos persistentes como los retardantes de llama bromados. Adicionalmente, se realizó seguimiento a la concentración simulada del retardante de llama BDE 99 en el punto P2 a 1.47 m de profundidad. La Tabla 29 muestra los porcentajes de error obtenidos entre los datos simulados y experimentales.

Tabla 29. Resultados experimentales y simulados para la concentración de BDE 99

Profundidad (1.40 m)	Experimental	Modelo CFD	Error
	%P/V	%P/V	(%)
Muestra 1	3.22e-7	4.34e-7	35
Muestra 2	1.15e-6	4.34e-7	62
Muestra 3	3.61e-7	4.34e-7	20

La Figura 21 muestra los perfiles de la concentración del retardante de llama BDE 99 en la laguna facultativa.

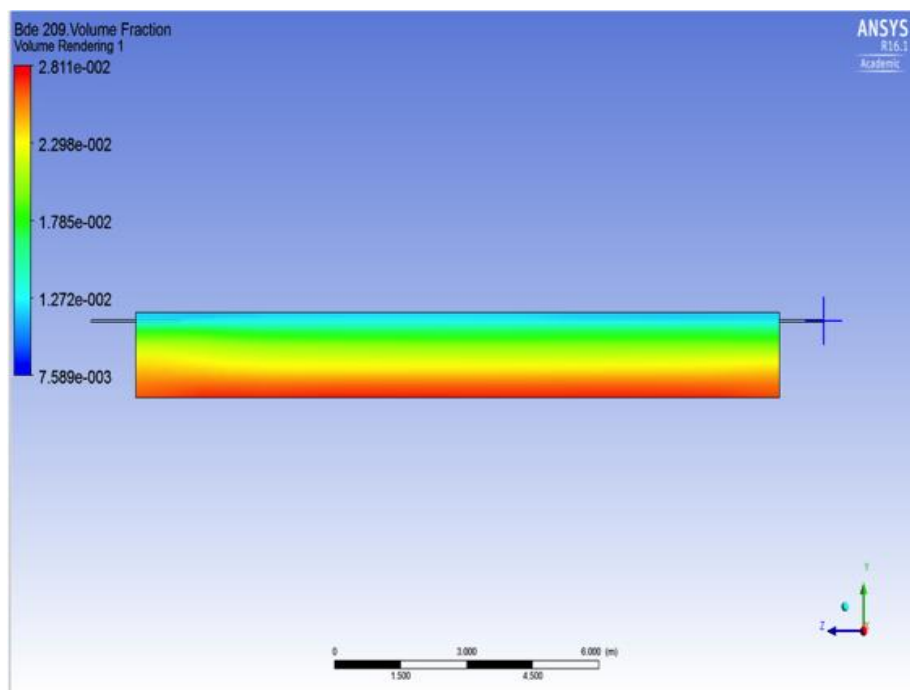


Figura 21. Perfiles de concentración del retardante de llama BDE 99

En la figura, es posible observar el gradiente transversal de la concentración del retardante de llama. Este gradiente es similar al obtenido para los sólidos suspendidos y puede usarse como un indicador del efecto que tienen los sólidos sobre el transporte del contaminante. Autores como Leal, Esteves and Santos, (2013); Deng and Tam, (2016), demostraron el efecto de los sólidos suspendidos sobre el transporte de este tipo de contaminantes, encontrando correlaciones positivas entre las concentraciones de sólidos suspendidos y del retardante de llama, básicamente, porque la hidrofobicidad del retardante de llama ($K_{ow} = 6,97$) favorece su adsorción sobre la superficie de las pequeñas partículas en suspensión. De esta manera, utilizar herramientas de modelación como las expuestas en este trabajo de investigación para proponer mejoras de diseño que aumenten las eficiencias de eliminación de sólidos suspendidos favorecería a su vez la eliminación de compuestos orgánicos hidrofóbicos como los encontrados en el efluente de esta laguna facultativa.

6.4. Modelo ecológico

Como complemento al modelo CFD, se realizó un ejercicio de simulación ecológica para representar el calor de reacción de los procesos de amonificación, nitrificación, fotosíntesis y respiración. En este modelo se relacionaron los procesos mencionados con variables físico-químicas y bioquímicas como el oxígeno disuelto, la clorofila *a*, la temperatura del agua, la radiación solar, el pH, el NTK, el nitrógeno amoniacal y el nitrógeno orgánico. Adicionalmente se incluyeron dos variables aleatorias que fueron los puntos P1, P2 y P3 y sus respectivas profundidades. Generalmente los modelos ecológicos utilizados para representar ecosistemas acuáticos construidos del tipo laguna facultativa secundaria se han construido dividiendo el ecosistema en compartimentos, (Peng *et al.*, 2007b; Mukherjee, Mukherjee and Nivedita, 2008a) ó utilizando ecuaciones de balance de materia, correlaciones lineales y ecuaciones diferenciales (Moreno-Grau *et al.*, 1996; Peng *et al.*, 2007; Mukherjee, Mukherjee and Nivedita, 2008a; Babu *et al.*, 2011; Aponte-Reyes, 2014). Aunque estos artificios han brindado resultados aceptables acerca de la cuantificación de los procesos, desde lo ecológico dejan mucho que desear debido a la fragmentación del ecosistema, la exclusión de variables ambientales como la radiación solar y en general la visión reduccionista y primordialmente ingenieril con que se aborda el ecosistema. En palabras de Garbisu *et al.*, (2012): el desarrollo de investigaciones enfocadas en mejorar el análisis y comprensión de los procesos de descontaminación de ecosistemas construidos como las lagunas facultativas, se ha basado en modelos hidrodinámicos o ecológicos donde el enfoque ha sido primordialmente ingenieril, restando importancia a los principios ecológicos que gobiernan los procesos naturales responsables de la biorremediación, razón por la cual aún no se han explorado en su totalidad las ventajas o limitaciones que pueden tener este tipo de ecosistemas. Ante esta situación, en el modelo ecológico se utilizó un artificio estadístico llamado modelo lineal mixto generalizado con el que se representaron los procesos mencionados. Los modelos lineales mixtos son modelos multifactoriales y su uso se ha extendido en los últimos 15 años a diversas disciplinas de la biología entre las que se encuentra la ecología, (Ponciano *et al.*,

2009). Con estos modelos y gracias a la incorporación de los factores aleatorios se ha intentado dar cuenta de una parte de la complejidad de los ecosistemas estudiados más próxima a la realidad, (McMahon and Diez, 2007; Song *et al.*, 2010).

6.4.1 Modelos lineales mixtos

El modelo lineal mixto para la variable OD se estructuró de la siguiente manera:

$$OD_{ijk} = \alpha_{jk} + \beta_{jk} * Lugar * Prof + \theta_{jk} * Hora * Prof + \gamma_j * Prof + \varphi_{jk} * Hora + \tau_j * Lugar + \dots + \varepsilon_{ijk}$$

Ecuación 20. Estructura del modelo lineal mixto

Donde:

- OD_{ijk} : es la i-ésima concentración de oxígeno disuelto en el j-ésimo lugar a la k-ésima profundidad.
- α_{jk} : Efecto aleatorio del j-ésimo lugar donde se tomó la medición a la k-ésima profundidad.
- ε_{ijk} : Error aleatorio de la i-ésima observación debido a el j-ésimo lugar en la k-ésima profundidad.
- $\beta_{jk}, \theta_{jk}, \gamma_j, \varphi_{jk}, \tau_j$: coeficientes de las variables explicativas del modelo y sus interacciones de primer orden con los factores.
- i : observación, j : lugar, k : profundidad.
- $E[\varepsilon_{ijk}] = 0$; $\varepsilon_{ijk} \sim N(0, \sigma^2)$; $cov(\varepsilon_{ijk}, \varepsilon_{ijk}) = 0, \forall i \neq j \neq k$
- $\alpha_{jk} \sim N(0, D)$

Para el OD se implementaron 3 modelos con 3 estructuras aleatorias diferentes:

- modelo 1 = lmer (log(OD) ~ (prof | lugar) + hora*prof + prof + hora + lugar
- modelo 2 = lmer (log(OD) ~ (1 | lugar) + hora*lugar + lugar + hora

- modelo 3 = lmer (log(OD) ~ (1 | prof)+ hora*prof + hora + prof

En el modelo 1 se asumieron la profundidad y el lugar como efectos aleatorios. En el 2 se asumió solo el lugar donde fueron tomadas las muestras y en el modelo 3, la profundidad. Luego se aplicó el criterio de información de Akaike, (AIC), para medir la calidad relativa de cada modelo. El AIC proporciona un medio para la selección del modelo siendo el modelo preferido aquel con el menor valor de AIC. En la Tabla 30 se muestran los resultados del AIC para cada modelo.

Tabla 30. Criterio de información AIC para factores aleatorios

Modelo	Criterio de información AIC	Valor p
1	382.84	
2	382.79	0.8815
3	379.09	0.2130

La tabla muestra que los valores del AIC son parecidos para los tres modelos. La aplicación de la prueba “Schi2” confirmó que las diferencias entre los modelos no son estadísticamente significativas, (valor $p > 0,05$). Esto significa que la discrepancia en los datos que explican los tres modelos fue la misma. Por lo cual, se eligió el modelo 1 como la mejor estructura aleatoria. Posteriormente, se eligió la mejor estructura para los efectos fijos. Se procedió a ajustar los modelos lineales mixtos con diferentes combinaciones para las variables explicativas. Los modelos ajustados fueron los siguientes:

- modelo_1 = lmer(log(OD)~(prof|lugar) + hora*prof + prof + hora + lugar + clorf + clorf*lugar + temp.agua*prof + temp.agua + temp.agua*hora + pH + pH*prof + pH*hora) + ϵ
- modelo_2 = lmer(log(OD)~(prof|lugar) + hora*prof + prof + hora + lugar + clorf + clorf*lugar + rad.solar*prof + rad.solar+ pH + pH*prof + pH*hora)+ ϵ

- $\text{modelo_3} = \text{lmer}(\log(\text{OD}) \sim (\text{prof}|\text{lugar}) + \text{hora}*\text{prof} + \text{prof} + \text{hora} + \text{lugar} + \text{clorof} + \text{clorof}*\text{prof} + \text{rad.solar}) + \varepsilon$

En el modelo 1 se incluyeron las variables: clorof (Clorofila), temp.agua (Temperatura de agua) y pH. Para el 2 se suprimió la variable temperatura del agua y se ingresó la variable radiación solar. Por último, el modelo 3 solo contó con la variable clorofila y radiación solar. La Tabla 31 muestra los resultados del criterio de información de Akaike para los factores fijos de cada modelo.

Tabla 31. Criterio de información AIC para factores fijos

Modelo	Criterio de información AIC	Valor p
1	359.24	
2	375.39	0.0049
3	382.01	8.85e-5

Los valores del AIC muestran que el menor valor corresponde al modelo 1. La diferencia entre los valores del AIC para cada modelo fue estadísticamente significativa (Valor P < 0,05). Con estos resultados se definió el modelo 1 como la mejor estructura para los efectos fijos. Los modelos lineales mixtos obtenidos y sus respectivos parámetros se muestran a continuación:

6.4.1.1 Modelo lineal mixto para el oxígeno disuelto (OD)

En el anexo 9.5, en la Tabla 45 se presentan los parámetros del modelo lineal mixto del oxígeno disuelto. La Figura 22 muestra la concordancia entre los resultados experimentales y los predichos con el modelo construido. En las figuras 23 a 29, los puntos negros indican datos experimentales, los rojos datos simulados obtenidos con el modelo lineal mixto de cada variable representada.

$M_{\text{OD}} = \text{lmer}(\log(\text{OD}) \sim (\text{prof}|\text{lugar}) + \text{hora}*\text{prof} + \text{prof} + \text{hora} + \text{lugar} + \text{clorof} +$

$$\text{clorof} \cdot \text{lugar} + \text{temp_agua} \cdot \text{prof} + \text{temp_agua} + \text{temp_agua} \cdot \text{hora} + \text{pH} + \text{pH} \cdot \text{prof} + \text{pH} \cdot \text{hora}) + \varepsilon$$

Ecuación 21. Modelo lineal mixto para OD

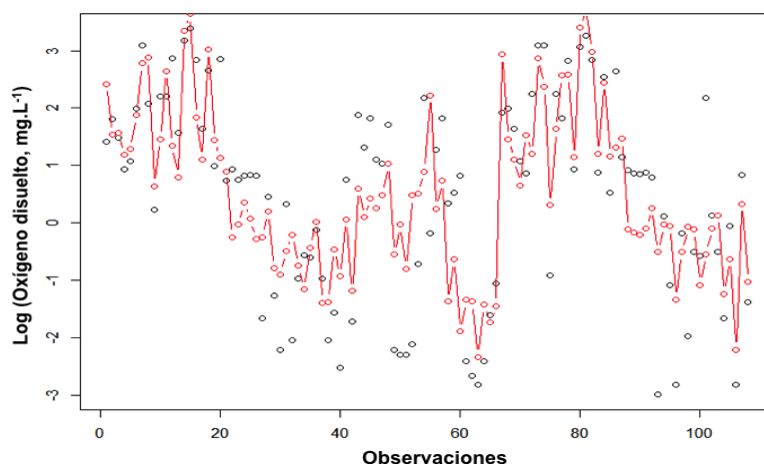


Figura 22. Valores experimentales Vs. valores predichos. Modelo lineal OD

6.4.1.2 Modelo lineal mixto para el pH

En el anexo 9.5, en la Tabla 46 se presentan los parámetros del modelo lineal mixto para el pH. La Figura 23 muestra la concordancia entre los resultados experimentales y los predichos con el modelo lineal mixto construido.

$$\mathbf{M_pH} = \text{lmer} (\text{pH} \sim (\text{prof_lugar}) + \text{hora} \cdot \text{prof} + \text{prof} + \text{hora} + \text{lugar} + \text{nit_tot} + \text{nit.tot} \cdot \text{prof} + \text{temp.agua} \cdot \text{prof} + \text{temp_agua} + \text{temp_agua} \cdot \text{hora}) + \varepsilon$$

Ecuación 22. Modelo lineal mixto para pH

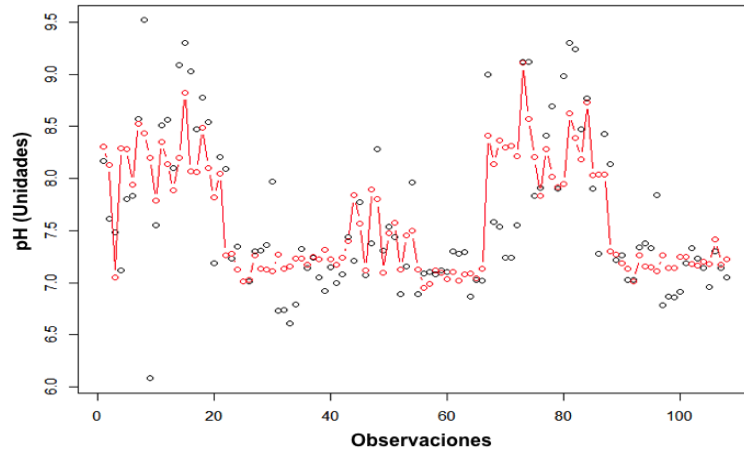


Figura 23. Valores experimentales Vs. valores predichos. Modelo lineal pH

6.4.1.3 Modelo lineal mixto para la temperatura del agua

En el anexo 9.5, en la Tabla 47 se presentan los parámetros del modelo lineal mixto para la temperatura del cuerpo de agua. La Figura 24 muestra la concordancia entre los resultados experimentales y los predichos con este modelo.

Modelo_temperatura_agua = lmer(temp.agua ~ (prof_lugar) + hora*prof + prof + hora + lugar + rad_solar*hora + rad_solar + tem_amb*hora + tem_amb) + ε

Ecuación 23. Modelo lineal mixto temperatura del volumen de agua

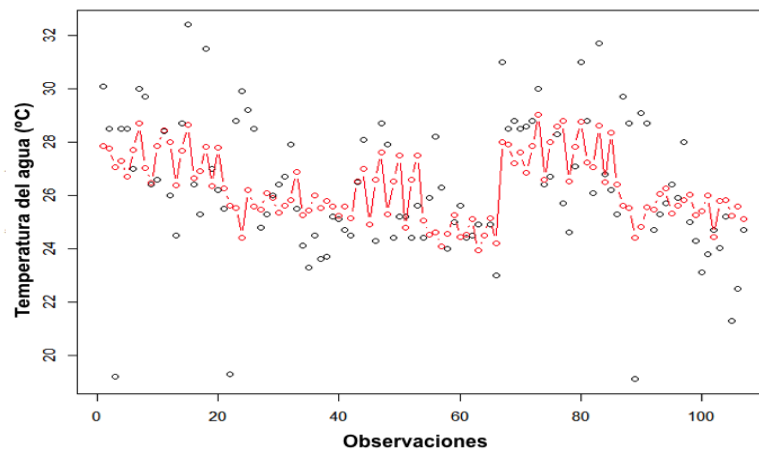


Figura 24. Valores experimentales Vs. valores predichos.

6.4.1.4 Modelo lineal mixto para la clorofila (fotosíntesis)

En el anexo 9.5, la Tabla 48 presenta los parámetros del modelo para clorofila. La Figura 25 muestra la concordancia entre los resultados experimentales y los predichos con el modelo.

$$\begin{aligned} M_{\text{clorofila}} = & \text{lmer}(\text{clorof} \sim (\text{prof_lugar}) + \text{hora} * \text{prof} + \text{prof} + \text{hora} + \text{lugar} + \text{pH} * \text{hora} \\ & + \text{pH} + \text{pH} * \text{prof} + \text{temp_agua} * \text{prof} + \text{temp_agua} + \text{temp_agua} * \text{hora} + \text{OD} * \text{prof} + \\ & \text{OD} * \text{hora} + \text{OD} * \text{lugar} + \text{OD}) + \varepsilon \end{aligned}$$

Ecuación 24. Modelo lineal para clorofila-a

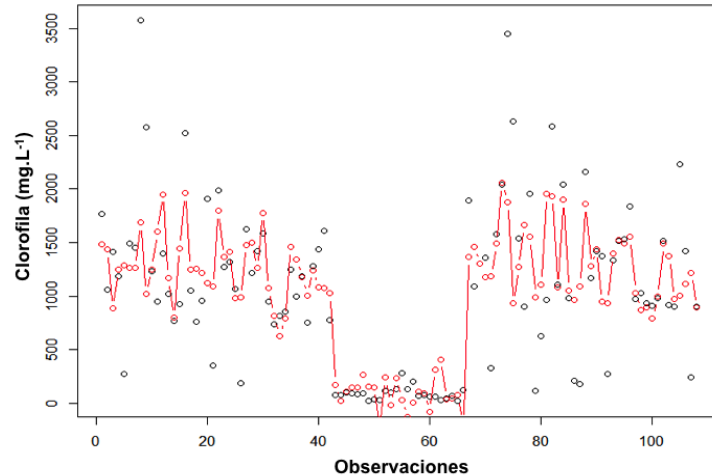


Figura 25. Valores experimentales Vs. valores predichos. Modelo lineal clorofila

6.4.1.5 Modelo lineal mixto para el nitrógeno total

En el anexo 9.5, en la Tabla 49 se presentan los parámetros del modelo lineal mixto para el nitrógeno total. La Figura 26 muestra la concordancia entre los resultados experimentales y los predichos con el modelo lineal mixto.

$$M_N_total = lmer(nit \sim (prof_lugar) + hora*prof + prof + hora + lugar + pH*hora + pH + pH*prof + temp_agua*prof + temp_agua + temp_agua*hora + OD*prof + OD*hora + OD*lugar + OD) + \varepsilon$$

Ecuación 25. Modelo lineal mixto nitrógeno total

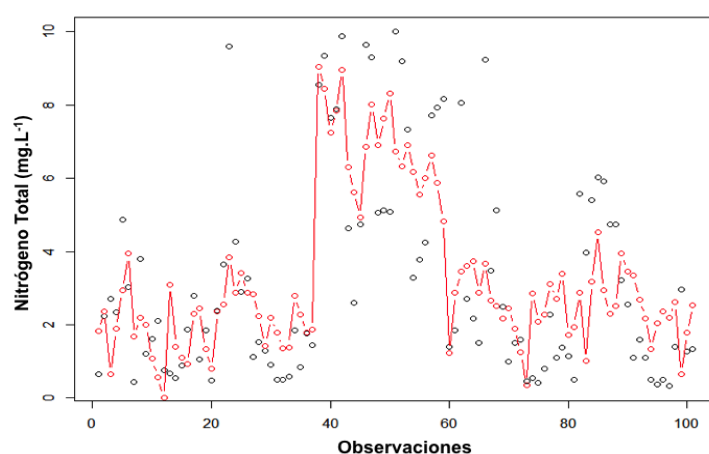


Figura 26. Valores experimentales Vs. valores predichos. Modelo lineal nitrógeno total

6.4.1.6 Modelo lineal mixto para el nitrógeno amoniacal (Nitrificación)

En el anexo 9.5, en la Tabla 50 se presentan los parámetros del modelo lineal mixto para el nitrógeno amoniacal. La Figura 27 muestra la concordancia entre los resultados experimentales y los predichos con el modelo lineal mixto construido.

$$M_N_amoniacal = lmer(nit.amo \sim (prof_lugar) + hora*prof + prof + hora + lugar + pH*hora + pH + pH*prof + temp_agua*prof + temp_agua + temp_agua*hora + OD*prof + OD*hora + OD*lugar + OD) + \varepsilon$$

Ecuación 26. Modelo lineal mixto nitrógeno amoniacal

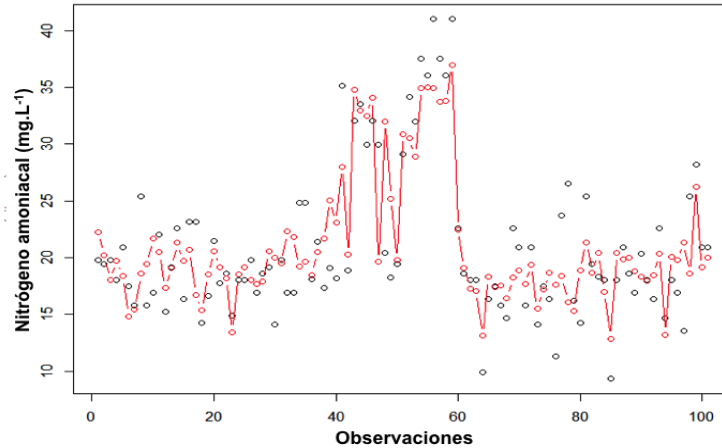


Figura 27. Valores experimentales Vs valores predichos. Modelo lineal nitrógeno amoniacal

6.4.1.7 Modelo lineal mixto para el nitrógeno orgánico (Amonificación)

En el anexo 9.5, en la Tabla 51 se presentan los parámetros del modelo lineal mixto para el nitrógeno orgánico. La Figura 28 muestra la concordancia entre los resultados experimentales y los predichos con este modelo lineal mixto.

$$\begin{aligned} \mathbf{M_N_orgánico} = & \text{lmer}(\text{Nitrogeno.Orgánico} \sim (\text{prof_lugar}) + \text{hora*prof} + \text{prof} + \text{hora} \\ & + \text{lugar} + \text{pH*hora} + \text{pH} + \text{pH*prof} + \text{temp.agua*prof} + \text{temp.agua} + \\ & \text{temp.agua*hora} + \text{OD*prof} + \text{OD*hora} + \text{OD*lugar} + \text{OD}) + \varepsilon \end{aligned}$$

Ecuación 27. Modelo lineal mixto nitrógeno orgánico

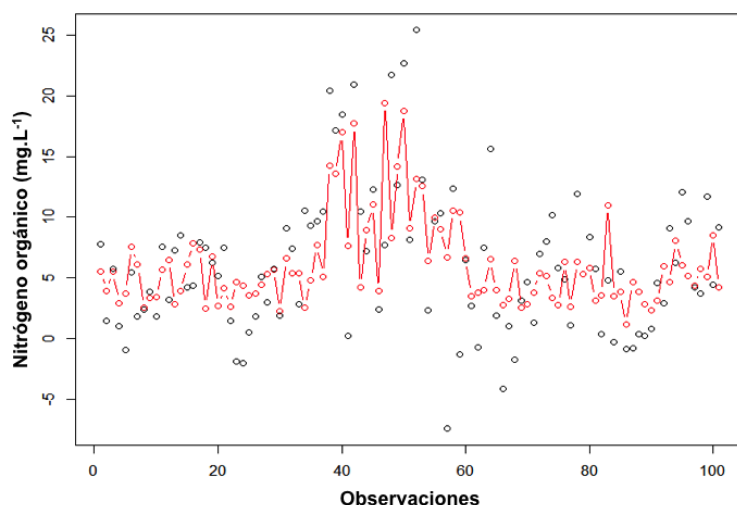


Figura 28. Valores experimentales Vs valores predichos. Modelo lineal nitrógeno orgánico.

Los resultados y gráficas obtenidas, muestran que los GLIMMIX, son una alternativa interesante para correlacionar variables ambientales ofreciendo representaciones más cercanas a la realidad. Esto, gracias a que con ellos se pueden representar funciones o procesos ambientales que por su aleatoriedad son difíciles de modelar con otro tipo de artificios matemáticos o estadísticos, (Seoane, 2014). En los últimos años, los GLIMMIX se han utilizado para modelar sistemas ecológicos complejos, (Laiolo *et al.*, 2008; Steinmeyer *et al.*, 2010; Chiarati *et al.*, 2012), incluso han sido utilizados para correlacionar variables como la diversidad del canto de una población de aves y la tasa anual de cambio de dicha población. Para comparar la magnitud de cada efecto aleatorio y fijo en los modelos construidos se hizo la partición de la varianza entre ellos, $(\frac{\sigma}{\sum_i^n \sigma_i} \times 100)$. Los resultados se presentan en la Tabla 32.

De los componentes fijos el que mayor variabilidad aporta al modelo es la franja horaria. Esto se debe a que las franjas fueron agrupadas de acuerdo a la radiación solar incidente en cada una de ellas, (hora 1: noche, hora 2: mañana, Hora 3: tarde). Esto significa que los cambios de la radiación solar incidente sobre el

volumen de agua producen variaciones significativas en las variables del ecosistema que fueron modeladas.

Tabla 32. Partición de la varianza entre efectos aleatorios y fijos

Variable	Hora 2	Hora 3	Prof.	Lugar 2	Lugar 3	pH	Temp. Ambiente
Oxígeno disuelto	24,20	28,85	28,00	8,41	8,28	0,25	----
pH	30,81	36,10	28,16	1,69	1,62	0,11	----
Temperatura agua	28,83	32,30	0,32	15,21	14,71	----	0,09
Clorofila	23,94	21,99	20,95	6,34	6,27	2,24	----
Nitrógeno total	25,09	23,06	21,79	7,12	7,04	0,23	----
Nitrógeno amoniacal	6,26	5,76	5,44	18,87	18,70	5,86	----
Nitrógeno orgánico	6,41	5,89	5,57	18,14	17,95	6,00	----

En la tabla también se puede observar que la variabilidad aportada por la temperatura ambiente al cuerpo de agua, es baja (0,09%). Este resultado ratifica los resultados obtenidos con el modelo CFD en los que se resalta la estabilidad de la temperatura del cuerpo de agua frente a los cambios de la temperatura del aire del municipio de Ginebra-Valle del Cauca.

6.4.2 Modelos lineales mixtos implementados en Stella

Posteriormente, los modelos lineales mixtos construidos fueron implementados en el software Stella ®. Este software ha sido ampliamente utilizado para simular modelos ecológicos gracias a que ofrece ventajas desde el punto de vista gráfico y de cuantificación, (Aponte-Reyes, 2014).

6.4.2.1 Modelo conceptual

El modelo conceptual para representar de forma dinámica la generación de la energía química asociada a los procesos de transformación seleccionados, se

desarrolló utilizando el software Stella by ISEE Systems, Inc.®. El modelo se presenta en la Figura 29. Los cuatro procesos incluidos en el modelo se representaron de forma estratificada respecto al gradiente de profundidad, 0,05m (zona fótica), 0,45m (zona facultativa) y 1,47 (bentos).

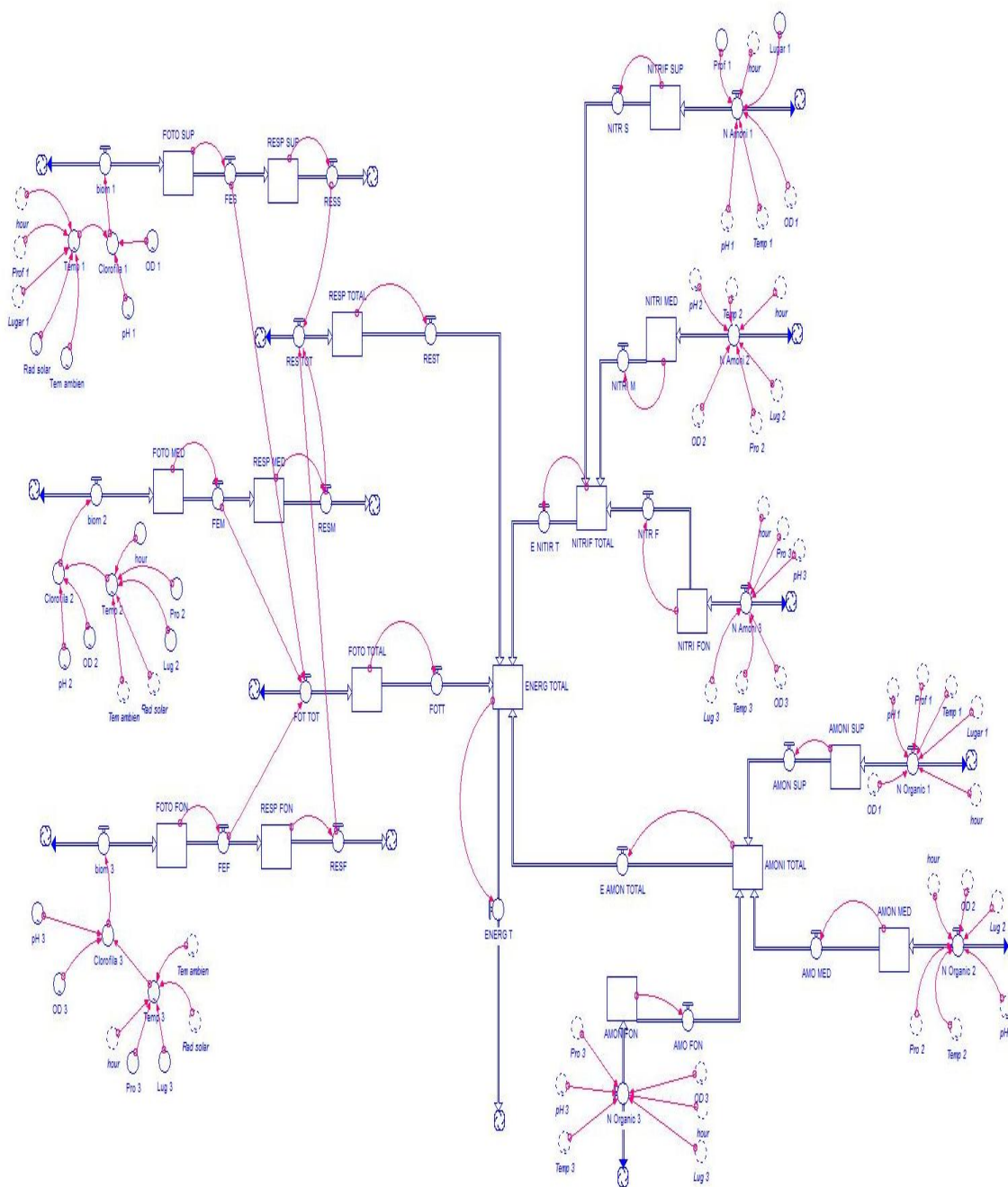


Figura 29. Modelo conceptual en Stella by ISEE System, Inc. ®

Posteriormente, con los modelos lineales implementados en Stella ® se realizó seguimiento a las variables: nitrógeno orgánico, nitrógeno amoniacal y clorofila. Los resultados simulados obtenidos fueron comparados con los datos experimentales y se determinó el porcentaje de error (valor promedio, máximo y mínimo) para estas variables. Los resultados se muestran en la Tabla 33.

Tabla 33. Porcentajes de error entre variables simuladas en Stella y experimentales

Proceso		Porcentajes de Error		
		Promedio	Máximo	Mínimo
Clorofila	Superficie	84	488	0
	Medio	362	819	12
	Fondo	40	63	2
Nitrógeno amoniacal	Superficie	20	35	1
	Medio	17	32	1
	Fondo	3	16	0
Nitrógeno orgánico	Superficie	15	32	1
	Medio	8	34	0
	Fondo	5	30	1

Los mayores porcentajes de error se presentan en los procesos asociados al ciclo del carbono (>40%), mientras los procesos seleccionados asociados al ciclo del nitrógeno presentan porcentajes de error aceptables, (<35%). De acuerdo con Hernández et al. (2010) porcentajes de error cercanos al 30% en este tipo de investigaciones son aceptables. Las series de datos simulados y experimentales fueron comparadas por medio de gráficas de caja las cuales se muestran a continuación:

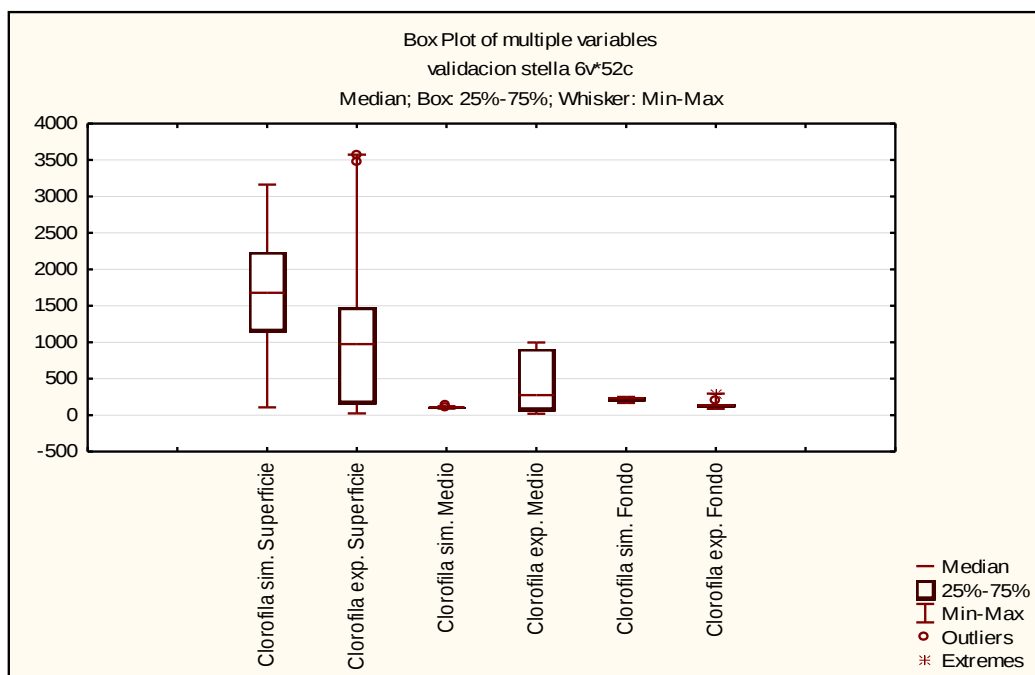


Figura 30. Diagrama de cajas para clorofila, datos sim y exp a 0.05, 0.45 y 1.47m

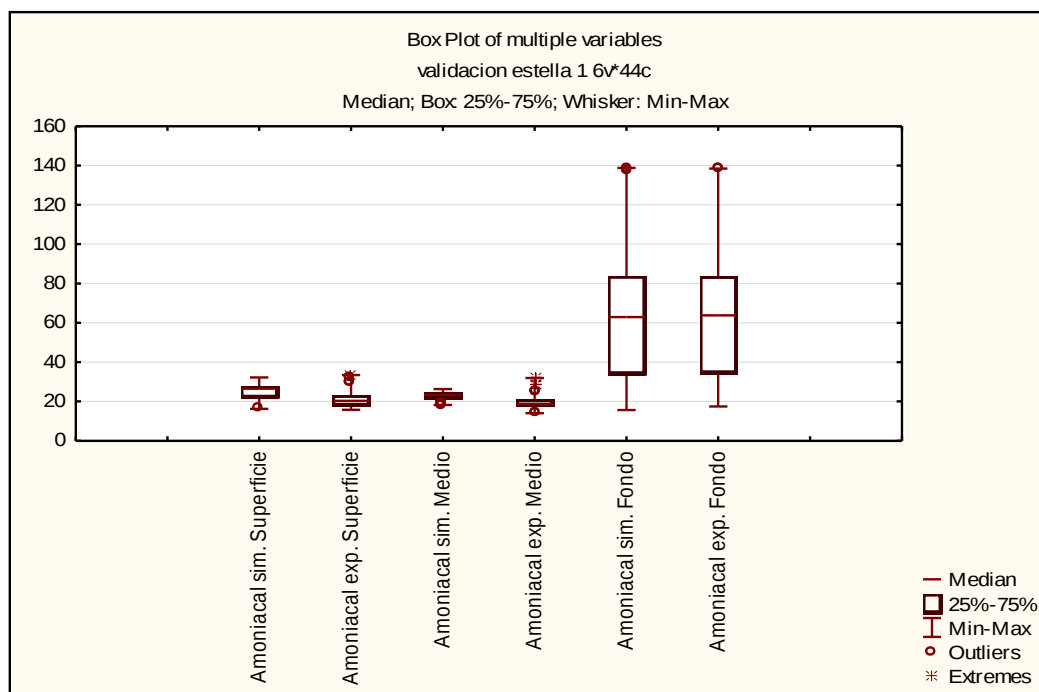


Figura 31. Diagrama de cajas para Nitrógeno amoniocal simulado (sim.) y experimental (exp.) a 0.05, 0.45 y 1.47m

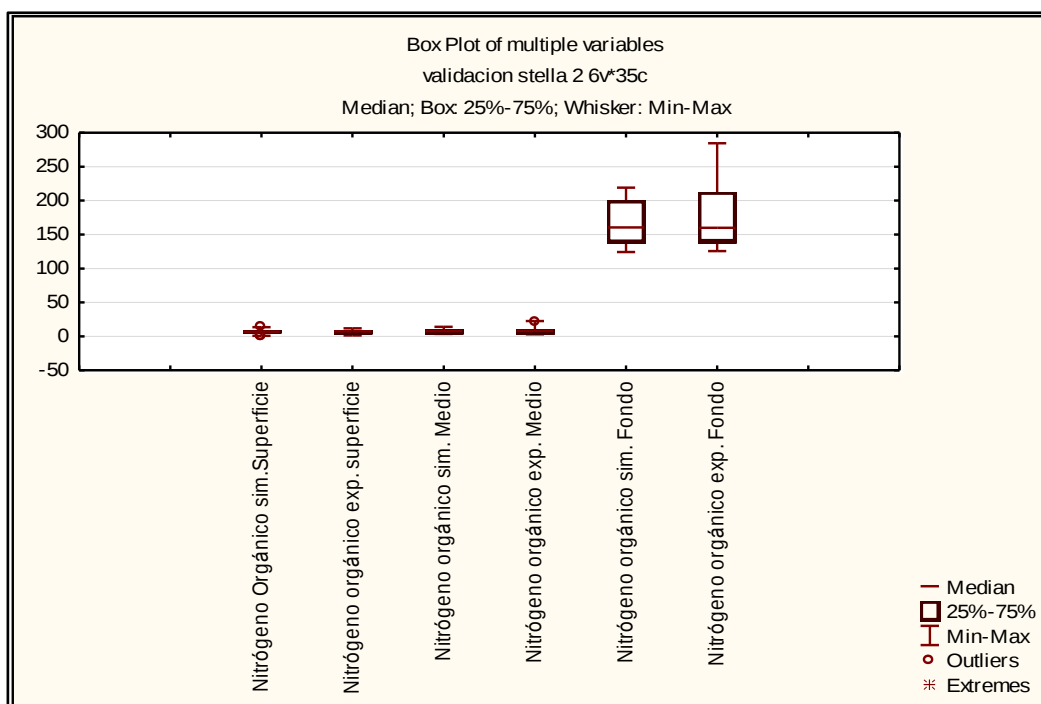


Figura 32. Diagrama de cajas para nitrógeno orgánico simulado (sim.) y experimental (exp.) a 0.05, 0.45 y 1.47m

Las series de datos graficadas, permiten concluir que el modelo representa de manera aceptable los procesos asociados al nitrógeno amoniacal y nitrógeno orgánico. Pero, es deficiente para representar los procesos asociados al ciclo del carbono, en este caso la fotosíntesis y la respiración asociada a la biomasa de algas. Estos procesos tienen lugar en la zona superficial del volumen de agua (zona fótica) y son afectados fuertemente por cambios en condiciones ambientales como la radiación solar, la nubosidad, el viento en la superficie, la biomasa de algas y las partículas en suspensión. Es decir, construir un modelo lineal mixto para estos procesos bioquímicos requiere la inclusión de estas variables y por ende la construcción de un modelo de mayor complejidad.

Respecto al calor de reacción asociado a cada proceso, se encontró de acuerdo al modelo, que aquellos con un calor de reacción mayor corresponden a la amonificación y nitrificación, ver Tabla 34.

Tabla 34. Calor de reacción

Proceso	Fotosíntesis (kj.día ⁻¹)	Respiración (kj.día ⁻¹)	Nitrificación (kj.día ⁻¹)	Amonificación (kj.día ⁻¹)	Total (kj.día ⁻¹)
Promedio	9,80	20,68	376,04	872,69	1323,07
Máximo	1596,52	2725,04	1088,37	4842,78	10489,67
Mínimo	0,09	0,13	64,16	1,56	3,51

El calor de reacción es, a una temperatura y presión dadas, la cantidad de calor transferido desde o hacia los alrededores del ecosistema cuando los procesos de conversión química tienen lugar en el volumen de agua, (Levenspiel 1986). Algunos autores como Ludovisi, (2006) han utilizado este concepto para evaluar la naturaleza de los procesos de conversión que tienen lugar los ecosistemas y como un indicador del grado de desarrollo de las comunidades y procesos de descontaminación que tienen lugar en el ecosistema. En ese sentido, los mayores valores en el calor de reacción de los procesos de nitrificación y amonificación indican un mayor desarrollo de las poblaciones y comunidades de microorganismos involucradas en estos procesos de transformación. Es decir una mayor abundancia y diversidad de las especies. En este caso particular, es difícil sacar conclusiones acertadas sobre los procesos de fotosíntesis y respiración, como ya se mencionó los modelos lineales mixtos generalizados construidos para representar estos procesos deben mejorarse con el ánimo de brindar resultados confiables. En conclusión, el uso de modelos ecológicos para representar variables como el calor de reacción podrían constituirse en una herramienta valiosa y de bajo costo para monitorear ecosistemas acuáticos como el involucrado en esta investigación.

7. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

7.1. Conclusiones

- Con el modelo bifásico se caracterizó por primera vez, para este tipo de ecosistemas, el fenómeno de transporte de sólidos suspendidos. Al comparar los resultados obtenidos con cada modelo, se logró demostrar que los sólidos afectan la hidrodinámica del fluido en el ecosistema, resultando en un mayor número de dispersión de la curva de distribución de tiempos de residencia y en velocidades más bajas que las obtenidas con el modelo monofásico. La magnitud de la velocidad en el afluente obtenida con el modelo bifásico fue cercana a 0.115 m.s^{-1} mientras con el modelo monofásico fue 0.127 m.s^{-1} .
- Se evaluaron dos condiciones de frontera para la concentración de sólidos suspendidos en el afluente del modelo bifásico. Los resultados obtenidos demostraron que el uso de una UDF mejoró los resultados del modelo en un 10%.
- En el modelo bifásico se evaluaron tres valores de diámetro de partícula: mínimo ($1\text{e-}5 \text{ m}$), promedio ($5\text{e-}5 \text{ m}$) y máximo ($8\text{e-}5\text{m}$), basados en la distribución del diámetro de partículas de los sólidos del afluente. Las simulaciones mostraron una diferencia de 2.7% en la concentración de sólidos suspendidos del efluente entre el valor mínimo y máximo.
- Para representar el fenómeno del transporte de sólidos en la laguna facultativa secundaria, se utilizaron dos aproximaciones: la primera correspondió al enfoque Lagrangiano y la segunda al enfoque Euleriano. Los mejores resultados, representados en un 45% menos de gasto

computacional en términos de tiempo, memoria y resultados finales, fueron obtenidos con la aproximación Euleriana.

- Para representar el comportamiento hidrodinámico del fluido en el ecosistema se evaluaron tres modelos de turbulencia en cada modelo CFD. Estos fueron: $k - \varepsilon$ Realizable, $k - \varepsilon$ Estándar y $k - \varepsilon$ RNG, los mejores resultados en términos de convergencia de la solución fueron obtenidos con el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ Realizable. Los modelos Estándar y RNG fueron no convergentes.
- Se logró demostrar que la geomembrana actúa como un aislante térmico desfavoreciendo la transferencia de calor desde el cuerpo de agua del ecosistema hacia sus alrededores. el rango para el flux de calor (perdidas de calor) con la geomembrana estuvo entre 0 y -27.78 W.m^{-2} , mientras para el suelo estuvo entre 0 y -166.70 W.m^{-2}
- Se encontró que el uso de la geomembrana incrementa la temperatura del volumen de agua del ecosistema en 0.7°C respecto al escenario en el que no se utiliza. Este resultado permite colegir que desde el diseño de este tipo de ecosistemas, la selección adecuada del material en las paredes circundantes puede favorecer incrementos en la temperatura del volumen de agua y posteriormente disminuir los requerimientos de área superficial (tierra) y mejorar las eficiencias de conversión de procesos de biorremediación como la amonificación, la nitrificación y la metanogénesis.
- Gracias a los resultados de esta investigación se puede concluir que el ecosistema acuático construido, en el cual se realizó esta investigación, es bajo las condiciones dadas de temperatura del afluente, dirección y velocidad del viento en la superficie, temperatura del aire y localización geográfica del municipio de Ginebra, resiliente térmicamente a la

transferencia de calor desde el afluente, el aire y las paredes circundantes, así como a las variaciones nictemerales de la radiación solar incidente.

- En esta investigación se usó el modelo bifásico para representar el transporte del retardante de llama BDE 99 en la laguna facultativa. Con los resultados obtenidos (porcentaje de error de 26% entre la eficiencia simulada y experimental) se logró demostrar, que los modelos CFD poseen el potencial suficiente para representar el transporte de este tipo de contaminantes orgánicos.
- Los resultados de esta investigación demostraron que bajo las condiciones ambientales del municipio de Ginebra-Valle del Cauca-Colombia, la condición de viento y el periodo de insolación de la superficie, la disponibilidad de luz solar, la localización geográfica, (altitud, longitud y latitud) y la profundidad del cuerpo de agua de la laguna, (ecosistema somero), fue posible descartar el efecto de la temperatura sobre los patrones de flujo generados por el cambio en la densidad del fluido. Es decir que desde la ecología y bajo las condiciones mencionadas sería más apropiado referirse a este tipo de ecosistemas acuáticos someros en función de la penetración de la radiación solar en el cuerpo de agua, es decir zona fótica, la zona intermedia o zona facultativa y la zona afótica, anaerobia ó bentos.
- En este caso particular, se demostró que incluir en el modelo CFD la condición de viento en la superficie no tiene un efecto significativo sobre la hidrodinámica y perfiles de temperatura del volumen de agua en el ecosistema ni sobre la transferencia de calor a través de las paredes circundantes.

- Con los resultados de este trabajo de investigación se logró demostrar que los modelos lineales mixtos generalizados son una excelente alternativa para la modelación ecológica de este tipo de ecosistemas. Esto gracias a que permiten incorporar factores aleatorios como la radiación solar ó la profundidad y lugar de toma de las muestras.

7.2. Recomendaciones para futuras investigaciones

- De acuerdo con los resultados obtenidos con los modelos CFD monofásico y bifásico, se recomienda que en futuros ejercicios de modelación CFD para representar ecosistemas acuáticos contruidos del tipo laguna facultativa, se incluya la mezcla bifásica agua-sólidos suspendidos en aras de una representación más confiable del comportamiento hidrodinámico del fluido en este tipo de ecosistemas.
- Se recomienda el uso de modelos CFD bifásicos para representar y simular el transporte de contaminantes orgánicos persistentes como los retardantes de llama y bifenilos policlorados en estos ecosistemas. Un modelo más exhaustivo debería incluir la generación de la biomasa de algas en la zona fótica de la laguna y usarse para proponer mejoras de diseño u operación que favorezcan la degradación de este tipo de contaminantes.
- Gracias a que la eliminación de compuestos orgánicos persistentes como los PBDE en las lagunas facultativas, es un área de investigación relativamente nueva aún, hay muchos interrogantes por responder. Esto, se debe a que las investigaciones hechas hasta el momento han sido a escala de laboratorio y no tienen en cuenta las variaciones ambientales y climatológicas del sitio donde se localizan las lagunas y en las que no se ha evaluado la degradación llevada a cabo por los microorganismos, siendo

esta última un área con mucho potencial para la investigación en este tipo de ecosistemas acuáticos. Por lo anterior, se recomienda estudiar los procesos de biodegradación de estos compuestos a escala piloto en condiciones reales en ecosistemas acuáticos contruidos del tipo laguna facultativa secundaria.

- En esta investigación se logró demostrar que los modelos lineales mixtos generalizados constituyen una excelente alternativa para representar procesos ecológicos como la transformación de especies químicas asociadas al ciclo del nitrógeno. Por tal razón, se recomienda profundizar su uso en la construcción de modelos más complejos que brinden una mejor representación dinámica del ecosistema.

8. REFERENCIAS

Abbas, H., Nasr, R. and Seif, H. (2006) 'Study of waste stabilization pond geometry for the wastewater treatment efficiency', *Ecological Engineering*, 28(1), pp. 25–34.

Abreu S., Carrasquero, M., (2002) 'Distribución de la concentración de Clorofila-a en laguna facultativa para el tratamiento de aguas residuales'. Estado Zulia, Venezuela, pp. 1–4.

Rojas, A., Madero, E., Ramirez, L., (2009) 'Índice de potencial productivo del suelo aplicado a tres fincas ganaderas de ladera en el Valle del Cauca, Colombia', *Acta Agronomica*, 58(2), pp. 85–90.

Aguirre, N., Ruiz, R. and Múnera, C. (2007) 'Nictemeral variation of the water quality in the lagoons of stabilization of the municipality of La Ceja , Antioquia', *Revista Facultad de Ingeniería*, 40, pp. 22–40.

Alvarado, A. et al. (2011) 'Hydraulic assessment of waste stabilization ponds: Comparison of computational fluid dynamics simulations against tracer data', *Maskana - Universidad de Cuenca*, 2(1), pp. 81–89.

Alvarado, A., Vedantam, S., et al. (2012) 'A compartmental model to describe hydraulics in a full-scale waste stabilization pond.', *Water research*, 46(2), pp. 521–30.

Alvarado, A., Sanchez, E., et al. (2012) 'CFD analysis of sludge accumulation and hydraulic performance of a waste stabilization pond', *Water Science and Technology*, 66(11), pp. 2370–2377.

Alvarado, A. et al. (2013) 'CFD study to determine the optimal configuration of aerators in a full-scale waste stabilization pond.', *Water research*, 47(13), pp. 4528–37.

Anderson, D., Glibert, P. and Burkholder, J. (2002) 'Harmful algal blooms and eutrophication: nutrient sources, compositions, and consequences', *Estuaries*, 25(4), pp. 704–726.

ANSYS (2013) ANSYS Fluent Theory Guide. Edited by Ansys. New York, USA.

Aoki, I. (2006) 'Min-Max principle of entropy production with time in aquatic communities', *Ecological Complexity*, 3(1), pp. 56–63.

Aponte-Reyes, A. (2014) 'Desarrollo de modelos ecológicos para carbono y nitrógeno en lagunas facultativas secundarias', *Ingeniería, Investigación y Tecnología*. Elsevier, 15(3), pp. 437–456.

Aponte, A. (2013) *Innovación mediante modelado hidrodinámico y ecológico de lagunas facultativas secundarias para la reducción de la contaminación hídrica por aguas residuales municipales en zonas tropicales*. Universidad del Valle.

Arauzo, M. et al. (2000) 'The role of algae in a deep wastewater self-regeneration pond', *Water Research*, 34(14), pp. 3666–3674.

Ashmawy, E. (2016) 'Drag on a slip spherical particle moving in a couple stress fluid', *Alexandria Engineering Journal*. Faculty of Engineering, Alexandria University, 55(2), pp. 1159–1164.

Ashworth, J. and Skinner, M. (2011) *Waste Stabilisation Pond Design Manual*. Firts, Development. Firts. Edited by Power and Water Corporation. Leeds UK.

Azov, Y. and Goldman, J. (1982) 'Free ammonia inhibition of algal photosynthesis in intensive cultures.', *Applied and environmental microbiology*, 43(4), pp. 735–9.

Babu, M. et al. (2011) 'Nitrogen mass balances for pilot-scale biofilm stabilization

ponds under tropical conditions.’, *Bioresource technology*, 102(4), pp. 3754–60.

Bahl, C., Gely, M. and Pagano, A. (2012) ‘Patrones De Flujo En Reactores Quimicos: Desarrollo de Modelos Matemáticos y numéricos Basados en CFD’, *Mecánica Computacional*, XXXI, pp. 13–16.

Banda, G. (2007) *Computational Fluid Dynamics Modelling of Baffled Waste Stabilization Ponds*, Civil Engineering. University of Leeds.

Baskaran, A. and Kashef, A. (1996) ‘Investigation of air flow around buildings using computational fluid dynamics techniques’, *Engineering Structures*, 18(11), pp. 861–875.

Beran, B. and Kargi, F. (2005) ‘A dynamic mathematical model for wastewater stabilization ponds’, *Ecological Modelling*, 181(August 2003), pp. 39–57.

Bertrand, J. (2011) *Environmental Microbiology: Fundamentals and Applications Microbial Ecology*. 1st edn. Edited by P. Caumette et al. New York, USA.

Biber, P., Harwell, M. and Cropper, W. (2004) ‘Modeling the dynamics of three functional groups of macroalgae in tropical seagrass habitats’, *Ecological Modelling*, 175(1), pp. 25–54.

Bird, R., Stewart, W. and Lightfoot, E. (2007) *Transport phenomena*, Departamento de Ingeniería Química. Edited by Ediciones Repla s.a. Ciudad de México.

Björnsson, L. et al. (2002) ‘Filamentous Chloroflexi (green non-sulfur bacteria) are abundant in wastewater treatment processes with biological nutrient removal’, *Microbiology*, 148(8), pp. 2309–2318.

Bozdogan, H. (1987) ‘Model selection and Akaike’s Information Criterion (AIC):

The general theory and its analytical extensions', *Psychometrika*, 52(3), pp. 345–370.

Broughton, A. and Shilton, A. (2012) 'Tracer studies on an aerated lagoon', *CEUR Workshop Proceedings*, 1542, pp. 33–36.

Brucato, A., Grisafi, F. and Montante, G. (1998) 'Particle drag coefficients in turbulent fluids', *Chemical Engineering Science*, 53(18), pp. 3295–3314.

Butler, E. et al. (2015) 'Oxidation pond for municipal wastewater treatment', *Applied Water Science*. Springer Berlin Heidelberg, pp. 1–21.

Cai, T., Park, S. and Li, Y. (2013) 'Nutrient recovery from wastewater streams by microalgae: Status and prospects', *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. Elsevier, 19, pp. 360–369.

Cayuela, L. (2010) 'Modelos lineales mixtos en R', in *Tutorial R. Firts. Andalucía, España: EcoLab, Centro Andaluz de Medio Ambiente, Universidad de Granada-Junta de Andalucía*, pp. 128–185.

Chiarati, E. et al. (2012) 'Subordinates benefit from exploratory dominants: Response to novel food in cooperatively breeding carrion crows', *Animal Behaviour*. Elsevier Ltd, 83(1), pp. 103–109.

Chisti, Y. (2007) 'Biodiesel from microalgae', *Biotechnology Advances*. Elsevier Inc., 25(3), pp. 294–306.

Colaizzi, P., et al. (2016) 'Soil heat flux calculation for sunlit and shaded surfaces under row crops: 1. Model development and sensitivity analysis', *Agricultural and Forest Meteorology*. Elsevier B.V., 216, pp. 115–128.

Correa-Restrepo, G. (2008) *Evaluación y monitoreo del sistema de lagunas de*

estabilización del municipio de Santa Fé de Antioquia, Colombia. 1st edn. Universidad de Antioquia.

Cruz, L., Alayón, W. and Monsegny, C. (2000) 'Metodología Para la Selección del Regimen de Flujo en Lagunas de Estabilización. Revista Ingeniería e Investigación, (46), pp. 14–19.

Curtis, T. et al. (1994) 'Light penetration in waste stabilization ponds', Water Research, 28(5), pp. 1031–1038.

Deng, D. and Tam, N. (2016) 'Adsorption-uptake-metabolism kinetic model on the removal of BDE-47 by a Chlorella isolate', Environmental Pollution. Elsevier Ltd, 212, pp. 290–298.

Díaz-Villanueva, V., Schwartz, T. and Romani, A. (2011) 'Biofilm formation at warming temperature: acceleration of microbial colonization and microbial interactive effects.', Biofouling, 27(1), pp. 59–71.

Dochain, D. et al. (2003) 'Dynamical modelling of a waste stabilisation pond', Bioprocess and Biosystems Engineering, 26(1), pp. 19–26.

Dworking, S., Falkow, V. and Rosenberg, K. (2016) The Prokaryotes. A Handbook on the Biology of Bacteria: Ecophysiology, Isolation, Identification, Applications. 5th edn. Edited by Balows, A. and Truper, H. New York, USA.

Environmental Protection Agency USEPA (1995) 'Wastewater collection, treatment and storage', in Environmental Protection Agency USEPA (ed.) Ap-42. Second. Washington, D.C USA, pp. 1–46.

Environmental Protection Agency USEPA (2010) Toxicological Review of BDE 209, Environmental Protection Agency. Washington, D.C USA.

Eriksson, J. et al. (2004) 'Photochemical decomposition of 15 Polybrominated Diphenyl Ether Congeners in Methanol/Water', *Environmental Science and Technology*, 38(11), pp. 3119–3125.

Escalas-Cañellas, A. et al. (2008) 'A time series model for influent temperature estimation: Application to dynamic temperature modelling of an aerated lagoon', *Water Research*, 42(10–11), pp. 2551–2562.

Evett, S. et al. (2012) 'Soil profile method for soil thermal diffusivity, conductivity and heat flux: Comparison to soil heat flux plates', *Advances in Water Resources*. Elsevier Ltd, 50, pp. 41–54.

Fleming, G. (2010) *Treatment Ponds and Lagoons*. 1st edn. Edited by T. P. S. A. of T. Supervisors. Pennsylvania, USA.

Fluent, A. (2009) *Ansys Fluent 14.0 Tutorial Guide*. 2nd edition, Ansys INC. Edited by Ansys INC. New York, USA.

Frioni, L. (1999) *Procesos Microbianos*. Edited by Editorial de la Fundación Universidad Nacional de Rio Cuarto. Buenos Aires, Argentina.

Fukami, K., Nishijima, T. and Ishida, Y. (1997) 'Stimulative and inhibitory effects of bacteria on the growth of microalgae', *Hydrobiologia*, 358(1987), pp. 185–191.

Garbisu et al (2012) 'Biorremediación y ecología', *Ecosistemas revista científica y tecnica de ecología y medio ambiente*, 11(3), pp. 114–116.

Garcia-Ocampo, A. (2003) 'Physical Properties of Magnesium Affected Soils in Colombia', *Revista de ciencias Universidad Nacional de Colombia*, 4 (21), pp 40-47

García, J. et al. (2006) 'Long term diurnal variations in contaminant removal in high

rate ponds treating urban wastewater.’, *Bioresource technology*, 97(14), pp. 1709–15.

Ghanam, J. et al. (2013) ‘Response Of Anaerobic Consortium Populations To Carbon/Nitrogen (C/N) Variation During Anaerobic Digestion Of Olive Mill Wastewater’, *Journal of Biotechnology Letters*, 4(1), pp. 72–78.

Ghidossi, R., Veyret, D. and Moulin, P. (2006) ‘Computational fluid dynamics applied to membranes: State of the art and opportunities’, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 45(6), pp. 437–454.

Glaz, P. et al. (2016) ‘Greenhouse gas emissions from waste stabilization ponds in Western Australia and Quebec (Canada)’, *Water Research*. Elsevier Ltd, 101(May), pp. 01–47.

Gomes-Passos, R., Von-Sperling, M. and Bressani-Ribeiro, T. (2014) ‘Hydrodynamic evaluation of a full-scale facultative pond by computational fluid dynamics (CFD) and field measurements’, *Water Science and Technology*, 70(3), pp. 569–575.

González, J., Bécares, E. and Luis, E. (2001) ‘Limnología de sistemas experimentales de lagunaje para el tratamiento de aguas residuales.’, *Asociación Española de Limnología*, 2, pp. 267–277.

Gonzalez, L. and Bashan, Y. (2000) ‘Increased growth of the microalga *Chlorella vulgaris* when coimmobilized and cocultured in alginate beads with the plant-growth-promoting bacterium *Azospirillum brasilense*.’, *Applied and environmental microbiology*, 66(4), pp. 1527–31.

Gu, R. and Stefan, H. (1995) ‘Stratification dynamics in wastewater stabilization

ponds', Water Research, 29(8), pp. 1909–1923.

Versteeg, H. (1995) An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method. 1st edn. Edited by Longman Group Ltd. New York.

El Halouani, H. et al. (1993) 'Elimination de l'azote et du phosphore dans un lagunage à haut rendement', Revue des sciences de l'eau, 6(1), p. 47.

Harfoot, M. et al. (2014) 'Emergent global patterns of ecosystem structure and function from a mechanistic general ecosystem model.', PLoS biology, 12(4), p. 100-104.

Van-Den Hende, S. et al. (2014) 'Up-scaling aquaculture wastewater treatment by microalgal bacterial flocs: From lab reactors to an outdoor raceway pond', Bioresource Technology. Elsevier Ltd, 159, pp. 342–354.

Hernández, R., Fernández, C. and Baptista, P. (2010) Metodología de la Investigación. 5th edn. Edited by Mc Graw Hill. México.

Himmelblau, D. (1969) Principios básicos y cálculos en ingeniería química. 6 edición, Annals of Physics. 6 edición. Ciudad de Mexico.

Hofkirchner, W. and Schafrank, M. (2011) Philosophy of Complex Systems, Philosophy of Complex Systems. Elsevier.

Houweling, D. et al. (2008a) 'Dynamic modelling of nitrification in an aerated facultative lagoon', Water Research, 42(1–2), pp. 424–432.

Houweling, D. et al. (2008b) 'Dynamic modelling of nitrification in an aerated facultative lagoon.', Water research, 42(1–2), pp. 424–32.

Huggins, D., Piedrahita, R. and Rumsey, T. (2004) 'Analysis of sediment transport

modeling using computational fluid dynamics (CFD) for aquaculture raceways', *Aquacultural Engineering*, 31(3–4), pp. 277–293.

Incropera, F., DeWitt, D. (2006) *Fundamentos de Transferencia de Calor*. 4 edición. Edited by P. Roig. Ciudad de Mexico: Pearson Educación.

IRIS. (1994) Aroclor 1248 ; CASRN 12672-29-6. Firts. Edited by Environmental Protection Agency USEPA. Washington, D.C USA.

Kirk, J. (2007) *Light and Photosynthesis in aquatic ecosystems*. Third edit. Cambridge, U.K: Cambridge University Press.

Jørgensen, S. (2008) 'Overview of the model types available for development of ecological models', *Ecological Modelling*, 215(1–3), pp. 3–9.

Jørgensen, S. (2010) 'A review of recent developments in lake modelling', *Ecological Modelling*, 221(4), pp. 689–692.

Jørgensen, S. E., Patten, B. C. and Straškraba, M. (1992) 'Ecosystems emerging: toward an ecology of complex systems in a complex future', *Ecological Modelling*, 62(1–3), pp. 1–27.

Jørgensen, S., Patten, B. and Straškraba, M. (1999) 'Ecosystems emerging: 3. Openness', *Ecological Modelling*, 117(1), pp. 41–64.

Jørgensen, S. E., Patten, B. C. and Straškraba, M. (2000) 'Ecosystems emerging: 4', *Ecological Modelling*, 126(2–3), pp. 249–284.

Kalyuzhnyi, S., Martinez, E. and Martinez, J. (1997) 'Anaerobic treatment of high-strength cheese whey wastewaters in laboratory and pilot UASB- reactors', *Bioresource technology*, 60, pp. 59–65.

Karteris, A., Papadopoulos, A. and Balafoutas, G. (2005) 'Modeling the temperature pattern of a covered anaerobic pond with computational fluid dynamics', *Water, Air, and Soil Pollution*, 162(1–4), pp. 107–125.

Kaya, D., Dilek, F. and Gökçay, C. (2007) 'Reuse of lagoon effluents in agriculture by post-treatment in a step feed dual treatment process', *Desalination*, 215(1–3), pp. 29–36.

Kayombo, S., Mbwette, T., et al. (2000) 'Modelling diurnal variation of dissolved oxygen in waste stabilization ponds', *Ecological Modelling*, 127(1), pp. 21–31.

Kayombo, S. et al. (2002) 'Diurnal cycles of variation of physical-chemical parameters in waste stabilization ponds', *Ecological Engineering*, 18(3), pp. 287–291.

Kayombo, S., Mbwette, T., et al. (2003) 'Effects of substrate concentrations on the growth of heterotrophic bacteria and algae in secondary facultative ponds', *Water Research*, 37(12), pp. 2937–2943.

Kelter, P. et al. (1997) 'A Discussion of Water Pollution in the United States and Mexico ; with High School Laboratory Activities for Analysis of Lead , Atrazine , and Nitrate', *Journal of Chemical Education*, 74(12), pp. 1413–1421.

Kim, M. et al. (2013) 'Parameters affecting the occurrence and removal of polybrominated diphenyl ethers in twenty Canadian wastewater treatment plants', *Water Research*. Elsevier Ltd, 47(7), pp. 2213–2221.

Kirk, J. (2007) *Light and Photosynthesis in Aquatic Ecosystems*. Third edit. Edited by Cambridge University. Canberra Australia: CSIRO.

Kirrolia, A., Bishnoi, N. and Singh, R. (2013) 'Microalgae as a boon for sustainable

energy production and its future research & development aspects', Renewable and Sustainable Energy Reviews. Elsevier, 20, pp. 642–656.

Kotteswari, M. and Murugesan, S. (2012) 'Phycoremediation of Dairy Effluent by using the Microalgae Nostoc sp', International Journal of Environmental Research and Development., 2(1), pp. 35–43.

Laiolo, P. et al. (2008) 'A next-generation approach to the characterization of a non-model plant transcriptome', Current Science Plos One, 3(3), pp. 1435–1439.

Larsdotter, K. (2006) 'Wastewater treatment with microalgae – a literature review Avloppsrening med mikroalger – en litteraturstudie Algal growth', VATTEN, 62, pp. 31–38.

Leal, J., Esteves, V. and Santos, E. (2013a) 'BDE-209: Kinetic Studies and Effect of Humic Substances on Photodegradation in Water'. Environmental Science and Technology, 47, pp. 14010–14017.

Levenspiel, O. (1986) Ingenieria de las reacciones quimicas. 2 edition. Barcelona, España: Ediciones REPLA s.a.

Li, H., Rong, L. and Zhang, G. (2016) 'Study on convective heat transfer from pig models by CFD in a virtual wind tunnel', Computers and Electronics in Agriculture. Elsevier B.V., 123, pp. 203–210.

Lima, S. et al. (2004) 'Biodegradation of P-chlorophenol by a microalgae consortium', Water Research, 38(1), pp. 97–102.

Lin, A. et al. (2003) 'Comparison of rhodamine WT and bromide in the determination of hydraulic characteristics of constructed wetlands', Ecological Engineering, 20(1), pp. 75–88.

Madigan, M., Martinko, J. and Parker, J. (2010) *Biología de los Microorganismos*. 10th edn. Edited by Pearson. Barcelona, España: Prentice Hall.

Maldonado, J., Agüera, E. and Pérez Vicente, R. (2008) 'Asimilación del nitrógeno y del azufre', *Fisiología y bioquímica vegetal*, pp. 215–236.

Mara, D. (2004) *Domestic Wastewater treatment in Developing Countries*. Firts. Edited by EarthScan. London UK.

Mara, D. and Horan, N. (2003) *Handbook of Water and Wastewater Microbiology*, Edited by Duncan Mara and Nigel Horan. London UK: Academic Press.

Marchi, M. et al. (2011) 'Dynamic model of Lake Chozas (León, NW Spain)—Decrease in eco-exergy from clear to turbid phase due to introduction of exotic crayfish', *Ecological Modelling*, 222(16), pp. 3002–3010.

Mashauri, D. and Kayombo, S. (2002) 'Application of the two coupled models for water quality management: facultative pond and constructed wetland models', *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 27(11–22), pp. 773–781.

Mayo, A. (1996) 'BOD5 removal in facultative ponds: Experience in Tanzania', *Water Science and Technology*, 34(11 pt 7), pp. 107–117.

Mayo, A. and Abbas, M. (2014) 'Removal mechanisms of nitrogen in waste stabilization ponds', *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 72–75, pp. 77–82.

Mayo, A. and Mutamba, J. (2005) 'Modelling nitrogen removal in a coupled HRP and unplanted horizontal flow subsurface gravel bed constructed wetland', *Physics and Chemistry of the Earth*, 30(11–16 SPEC. ISS.), pp. 673–679.

McMahon, S. and Diez, J. (2007) 'Scales of association: Hierarchical linear models and the measurement of ecological systems', *Ecology Letters*, 10(6), pp. 437–452.

McMurry, J. (2008) Química Orgánica. 7th edn. Edited by C. Learning. Belmont, CA. USA.

Mejías, J. and Jerez, J. (2006) Guía para la toma de muestras de residuos de plaguicidas: Agua, sedimento y suelo. 1st edn. Edited by A. M. Lilian Avendaño, José Maria Peralta. Temuco, Chile.

Mesplé, F. et al. (1996) 'Modelling orthophosphate evolution in a high rate algal pond', Ecological Modelling, 89(1–3), pp. 13–21.

Møller, C. et al. (2016) 'Modelling antibiotics transport in a waste stabilization pond system in Tanzania', Ecological Modelling. Elsevier B.V., 319, pp. 137–146.

Montilla, L. and Sanabria, J. (2009) Estudio de la dinámica poblacional bacteriana en humedales construidos de flujo subsuperficiales para el tratamiento de aguas residuales domésticas. Universidad del Valle.

Moreno-Grau, S. et al. (1996) 'A mathematical model for waste water stabilization ponds with macrophytes and microphytes', Ecological Modelling, 91(1–3), pp. 77–103.

Morrissey, J., Hend, G. and Mary, M. (2008) Toxicological Review of BDE-99. Firts, epa.gov/iris. Firts. Edited by U.S Environmental Protection Agency. Washington, D.C USA: EPA.

Mouget, J. (1995) 'Algal growth enhancement by bacteria: Is consumption of photosynthetic oxygen involved?', FEMS Microbiology Ecology, 18(1), pp. 35–43.

Moura, A. et al. (2009) 'Characterization of bacterial diversity in two aerated lagoons of a wastewater treatment plant using PCR-DGGE analysis',

Microbiological Research, 164(5), pp. 560–569.

Mukherjee, B., Mukherjee, D. and Nivedita, M. (2008a) 'Modelling carbon and nutrient cycling in a simulated pond system at Ranchi', *Ecological Modelling*, 213(3–4), pp. 437–448.

Muñoz, R. and Guieysse, B. (2006) 'Algal-bacterial processes for the treatment of hazardous contaminants: A review', *Water Research*, 40(15), pp. 2799–2815.

Nameche, T. and Vassel, J. (1998) 'Hydrodynamic studies and modelization for aerated lagoons and waste stabilization ponds', *Water Research*, 32(10), pp. 3039–3045.

Norvill, Z., Shilton, A. and Guieysse, B. (2016) 'Emerging contaminant degradation and removal in algal wastewater treatment ponds: Identifying the research gaps', *Journal of Hazardous Materials*. Elsevier B.V., 313, pp. 291–309.

Olukanni, D. and Ducoste, J. (2011) 'Optimization of waste stabilization pond design for developing nations using computational fluid dynamics', *Ecological Engineering*, 37(11), pp. 1878–1888.

Ouedraogo, F. et al. (2016) 'Impact of sludge layer geometry on the hydraulic performance of a waste stabilization pond', *Water Research*. Elsevier Ltd, 99, pp. 253–262.

Pandey, R. et al. (2015) 'Studies on light intensity distribution inside an open pond photo-bioreactor', *Bioprocess and Biosystems Engineering*. Springer Berlin Heidelberg, 38, pp. 1547–1557.

Passos, R., Von Sperling, M. and Ribeiro, T. (2014) 'Performance evaluation and spatial sludge distribution at facultative and maturation ponds treating wastewater

from an international airport', *Water Science and Technology*, 70(2), pp. 226–233.

Peng, J. et al. (2007) 'Modeling N transformation and removal in a duckweed pond: Model application', *Ecological Modelling*, 206(3–4), pp. 294–300.

Pérez-Peláez, N., Peña-Varón, M. and Sanabria, J. (2011) 'Comunidades bacterianas involucradas en el ciclo del nitrógeno en humedales construidos.', *Ingeniería y Competitividad*, 11(2), pp. 83–92.

Pérez, A. and Torres, P. (2008) 'Evaluation of hydrodynamic behavior as a tool to optimize anaerobic reactors of attached growth', *Revista Facultad de Ingeniería. Universidad de Antioquia*, 45, pp. 27–40.

Pérez, J., Rincón, N. and Bracho, N. (2011) 'Evaluación de la adsorción de rodamina WT, litio y cloruro en reactores por carga inoculados con lodo anaerobio', *Revista Facultad de Ingeniería*, (58), pp. 74–84.

Persson, J. (2000) 'The hydraulic performance of ponds of various layouts', *Urban Water*, 2(3), pp. 243–250.

Pescod, M. (1996) 'The role and limitations of anaerobic pond systems', *Water Science and Technology*, 33(7), pp. 11–21.

Peterson, E., Harris, J. and Wadhwa, L. (2000) 'CFD modelling pond dynamic processes', *Aquacultural Engineering*, 23(1–3), pp. 61–93.

Pevere, A. et al. (2006) 'Viscosity evolution of anaerobic granular sludge', *Biochemical Engineering Journal*, 27(3), pp. 315–322.

Pham, D. et al. (2014) 'Algal community analysis in a waste stabilisation pond', *Ecological Engineering. Elsevier B.V.*, 73, pp. 302–306.

Pla, L. (2006) 'Biodiversidad: Inferencia basada en el índice de Shannon y la riqueza', *Interciencia*, 31(8), pp. 583–590.

Plasticbages. (2017). Plasticbages industrial, S.L. Salvador de Guardiola, España.: <http://www.plasticbages.com/caracteristicaspvc.html>.

Ponciano, J. et al. (2009) 'Hierarchical models in ecology: confidence intervals, hypothesis testing, and model selection using data cloning', *Ecological Society of America*, 90(2), pp. 356–362.

Pougatch, K. et al. (2007) 'Computational modelling of large aerated lagoon hydraulics', *Water Research*, 41(10), pp. 2109–2116.

Ragush, C. et al. (2017) 'Environmental and operational factors affecting carbon removal in model arctic waste stabilization ponds', *Ecological Engineering*. Elsevier B.V., 98, pp. 91–97.

Rahimpour, M., Mottaghi, H. and Barmaki, M. (2010) 'Hydrogen production from urea wastewater using a combination of urea thermal hydrolyser–desorber loop and a hydrogen-permselective membrane reactor', *Fuel Processing Technology*. Elsevier B.V., 91(6), pp. 600–612.

Rajbhandari, B. and Annachatre, A. (2004) 'Anaerobic ponds treatment of starch wastewater: case study in Thailand.', *Bioresource technology*, 95(2), pp. 135–43.

Ramesh, B. and Nilesh, G. (2015) 'Modeling of Residence Time Distribution in FLUENT', *Ecological Modelling*, 35(4), pp. 1–3.

Rameshwaran, P. et al. (2013) 'Inter-comparison and validation of computational fluid dynamics codes in two-stage meandering channel flows', *Applied*

Mathematical Modelling, 37(20–21), pp. 8652–8672.

Rosero, E. et al. (2008) 'Consideración de los Efectos de Pérdidas en Trazadores Fluorescentes Empleados en la Modelación Hidrodinámica de Humedales Artificiales', Revista Colombiana de Física, 40(1), pp. 190–192.

Sah, L. et al. (2017) 'Microbial Succession and Nitrogen Cycling in Cultured Biofilms as Affected by the Inorganic Nitrogen Availability', Microbial Ecology, 73(1), pp. 1–15.

Sah, L., Rousseau, D., et al. (2011) '3D model for a secondary facultative pond', Ecological Modelling. Elsevier B.V., 222(9), pp. 1592–1603.

Sah, L., Rousseau, D. and Hooijmans, C. (2012) 'Numerical Modelling of Waste Stabilization Ponds: Where Do We Stand?', Water, Air, & Soil Pollution, 223(6), pp. 3155–3171.

Salter, H. et al. (2000) 'Three-dimensional computational fluid dynamic modelling of a facultative lagoon', Water Science and Technology, 42(10–11), pp. 335–342.

Sanapareddy, N. et al. (2009) 'Molecular diversity of a North Carolina Wastewater Treatment Plant as Revealed by Pyrosequencing', Applied and Environmental Microbiology, 75(6), pp. 1688–1696.

Sánchez, J. and Sanabria, J. (2009) 'Metabolismos microbianos involucrados en procesos avanzados para la remoción de Nitrógeno, una revisión prospectiva', Revista Colombiana de Biotecnología, 11(1), pp. 114–124.

Schmidt, T., Delong, E. and Pace, N. (1991) 'Analysis of a Marine Picoplankton Community by 16S rRNA Gene Cloning and Sequencing', Journal of Bacteriology, 173(14), pp. 4371–4378.

Senzia, M. et al. (2002) 'Modelling nitrogen transformation and removal in primary facultative ponds', *Ecological Modelling*, 154(3), pp. 207–215.

Seoane, J. (2014) '¿Modelos mixtos (lineales)? Una introducción para el usuario temeroso', *Etologuía*, 24(2014), pp. 15–37.

Shilton, A. (2001) *Studies into the hydraulics of waste stabilisation ponds*. Massey University.

Shilton, A. and Harrison, J. (2003) *Development of guidelines for improved hydraulic design of waste stabilisation ponds*, *Water Science and Technology*. Edited by M. University. Palmerston North, New Zealand.

Shilton, A. (2000) 'Potential application of computational fluid dynamics to pond design', *Water Science and Technology*, 42(10–11), pp. 327–334.

Shizas, I. and Bagley, D. (2004) 'Experimental Determination of Energy Content of Unknown Organics in Municipal Wastewater Streams', *Journal of Energy Engineering*, 130(2), pp. 45–53.

Smith, J., Van Ness, H. and Abbott, M. (1997) *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*. 5th edn. Davis, California, USA.

Song, K., Xenopoulos, M., et al. (2013) 'Thermal stratification patterns in urban ponds and their relationships with vertical nutrient gradients', *Journal of Environmental Management*. Elsevier Ltd, 127, pp. 317–323.

Song, S. et al. (2010) 'On the application of multilevel modeling in environmental and ecological studies', *Ecological Society of America*, 91(2), pp. 355–361.

Spachos, T. and Stamatis, A. (2011) 'Thermal analysis and optimization of an anaerobic treatment system of whey', *Renewable Energy*. Elsevier Ltd, 36(8), pp. 2097–2105.

Von-Sperling, M. and Lemos, C. (2006) *Biological Wastewater Treatment in Warm Climate Regions*. 1st edn. Minas Gerais, Brasil: IWA Publishing.

Stafford, D.; Hawkes, D.; Horton, R. (1981) *Methane production from waste organic matter*. Firts, Igarss 2014. Firts. Boca Raton, FL, United States: CRC Press, Inc., Boca Raton, FL.

Steinmeyer, C. et al. (2010) 'Variation in sleep behaviour in free-living blue tits, *Cyanistes caeruleus*: Effects of sex, age and environment', *Animal Behaviour*. Elsevier Ltd, 80(5), pp. 853–864.

Su, P., Hao, A. (2016) 'Laboratory study of the particle-size distribution of Decabromodiphenyl ether (BDE-209) in ambient air', *Chemosphere*. Elsevier Ltd, 144, pp. 241–248.

Suganya, T. et al. (2016) 'Macroalgae and microalgae as a potential source for commercial applications along with biofuels production: A biorefinery approach', *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. Elsevier, 55, pp. 909–941.

Sukias, J. et al. (2001) 'Algal abundance, organic matter, and physico-chemical characteristics of dairy farm facultative ponds: Implications for treatment performance', *New Zealand Journal of Agricultural Research*, 44(4), pp. 279–296.

Tamburini, A. et al. (2013) 'CFD simulations of dense solid-liquid suspensions in baffled stirred tanks: Prediction of solid particle distribution', *Chemical Engineering Journal*. Elsevier B.V., 223, pp. 875–890.

Tamburini, A. et al. (2014) 'Influence of drag and turbulence modelling on CFD predictions of solid liquid suspensions in stirred vessels', Chemical Engineering Research and Design. Institution of Chemical Engineers, 92(6), pp. 1045–1063.

Tay, N., Bruno, F. and Belusko, M. (2012) 'Experimental validation of a CFD model for tubes in a phase change thermal energy storage system', International Journal of Heat and Mass Transfer. Elsevier Ltd, 55(4), pp. 574–585.

Torres, J. et al. (1999) 'Study of the internal hydrodynamics in three facultative ponds of two municipal WSPS in Spain', Water Research, 33(5), pp. 1133–1140.

Ukpong, E. (2013a) 'Model for Vertical Temperature Profile in Waste Stabilization Ponds By', The International Journal of Engineering And Science, 2(7), pp. 58–74.

Ukpong, E. (2013b) 'Modeling Wind Effect on Waste Stabilization Pond Performance', International Journal of Applied Science and Technology, 3(4), pp. 13–26.

Universitat de Barcelona. (2017). Materials, polietileno de baja densidad. Barcelona, España.: <http://www.ub.edu/cmematerials/es/content/polietileno-de-baja-densidad>

USEPA (1998) Fate, Transport and Transformation Test Guidelines. Edited by U. S. E. P. A. Office of Prevention, Pesticides and Toxic Substances. Washington, D.C USA.

Villamizar, A. (2014) Aplicación de un modelo turbulento bidimensional para la simulación de flujo a superficie libre en un canal horizontal. Universidad Nacional de Colombia.

Waaaijers, S. and Parsons, J. (2016) 'Biodegradation of brominated and

organophosphorus flame retardants', *Current Opinion in Biotechnology*. Elsevier Ltd, 38, pp. 14–23.

Wadnerkar, D. et al. (2012) 'CFD simulation of solid-liquid stirred tanks', *Advanced Powder Technology*, 23(4), pp. 445–453.

Wang, X. et al. (2012) 'Pyrosequencing analysis of bacterial diversity in 14 wastewater treatment systems in china', *Applied and Environmental Microbiology*, 78(19), pp. 7042–7047.

Wang, X. and Veizer, J. (2000) 'Respiration-photosynthesis balance of terrestrial aquatic ecosystems, Ottawa area, Canada', *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 64(22), pp. 3775–3786.

Wang, Y., Waite, T. and Leslie, G. (2013) *Handbook of Membrane Reactors*, Elsevier.

Warakomski, A, Kempen, R. and Kos, P. (2007) 'Microbiology/Biochemistry of the Nitrogen Cycle', *Proceedings on Moving Forward Wastewater Biosolids Sustainability: Technical, Managerial, and Public Synergy*. GMSC., pp. 277–285.

Willford, H. and Middlebrooks, E. (1997) 'Performance of Field-Scale Facultative Wastewater Treatment Lagoons', *Journal of the Sanitary Engineering Division*, 39 (12, Dec.), pp. 2009–2019.

Wu, B. (2013) 'Advances in the use of CFD to characterize, design and optimize bioenergy systems', *Computers and Electronics in Agriculture*. Elsevier B.V., 93, pp. 195–208.

Yáñez, C. (1993) *Lagunas de estabilización, Teoría, Diseño, Evaluación y Mantenimiento*. 1st edn. Edited by Imprenta Monsalve. Cuenca, Ecuador.

Yi, Q., Hur, C. and Kim, Y. (2009) 'Modeling nitrogen removal in water Hyacinth ponds receiving effluent from waste stabilization ponds', *Ecological Engineering*, 35(1), pp. 75–84.

Yuan, E., et al (2007) 'Development of an integrated model for assessing the impact of diffuse and point source pollution on coastal waters', *Environmental Modelling & Software*, 22(6), pp. 871–879.

Zhang, J. et al. (2003) 'A structurally dynamic modelling—Lake Mogan, Turkey as a case study', *Ecological Modelling*, 164(2–3), pp. 103–120.

Zhang, J., Gurkan, Z. and Jørgensen, S. (2010) 'Application of eco-exergy for assessment of ecosystem health and development of structurally dynamic models', *Ecological Modelling*, 221(4), pp. 693–702.

Zhang, J., Tejada-Martínez, A. and Zhang, Q. (2014) 'Developments in computational fluid dynamics-based modeling for disinfection technologies over the last two decades: A review', *Environmental Modelling & Software*, 58, pp. 71–85.

Zhao, J. et al. (2008) 'Plankton community patterns across a trophic gradient: The role of zooplankton functional groups', *Ecological Modelling*, 213(3–4), pp. 417–436.

Zhao, X. et al. (2015) 'Environmental factors influencing the distribution of ammonifying and denitrifying bacteria and water qualities in 10 lakes and reservoirs of the Northeast, China', *Microbial Biotechnology*, 8(3), pp. 541–548.

Zinder, S., Anguish, T. and Cardwell, S. (1984) 'Effects of Temperature on Methanogenesis in a Thermophilic (58-Degrees-C) Anaerobic Digester', *Applied and Environmental Microbiology*, 47(4), pp. 808–813.

9. ANEXOS

9.1. Anexo 1. Estadísticos descriptivos de la base de datos, puntos L/3, L/2 y 2L/3.

Tabla 35. Estadísticos descriptivos base de datos punto L/3. P = 0,2 y 0,5m

Variable	Prof. (m)	Min.	Prom.	Max.	Desv. Est	Coef. Var	Normalida d Shapiro- Wilks
pH	0,2	6,08	8,17	9,52	0,82	0,10	0,714 NR
	0,5	6,78	7,21	8,14	0,32	0,04	0,001 R
T	0,2	19,20	27,45	32,40	2,81	0,10	0,124 NR
	0,5	19,10	25,23	29,70	2,64	0,10	0,242 NR
OD	0,2	1,25	10,04	29,50	8,18	0,81	0,011 R
	0,5	0,05	1,42	8,83	1,93	1,35	0,001 R
ORP	0,2	47,00	409,50	767,00	250,60	24,90	0,028 R
	0,5	16,00	383,90	768,00	278,20	0,70	0,011 R
Clor-A	0,2	272,30	1364,0	3573,0	774,91	0,57	0,023 R
	0,5	238,90	1218,0	2229,0	508,17	0,42	0,860 NR
DQO Total	0,2	142,50	317,20	439,30	84,88	0,27	0,380 NR
	0,5	68,00	323,90	664,30	138,55	0,43	0,464 NR
SST	0,2	6,00	70,49	300,00	70,67	0,22	0,001 R
	0,5	2,00	59,66	185,00	48,95	0,82	0,032 R
NO ₃ ⁻	0,2	0,440	3,066	14,800	3,96	1,29	0,950 NR
	0,5	0,320	2,624	6,030	2,06	0,78	0,550 NR
NTK	0,2	18,060	25,870	33,870	4,65	0,18	0,734 NR
	0,5	18,060	26,180	42,900	5,64	0,22	0,857 NR
NH ₄ ⁺	0,2	9,600	18,530	25,400	3,64	0,20	0,816 NR
	0,5	9,310	19,100	28,220	4,21	0,22	0,074 NR
Alcalinidad	0,2	86,0	146,8	216,0	47,57	0,32	0,691 NR
	0,5	136,0	171,7	216,0	30,86	0,18	0,242 NR

NR: No Rechaza, R: Rechaza

Tabla 36. Estadísticos descriptivos base de datos punto L/2. P = 0,2, 0,5 y 1,4m

Variable	Prof. (m)	Min.	Prom.	Max.	Desv. Est	Coef. Var	Normalidad Shapiro- Wilks
pH	0,2	6,89	7,45	8,28	0,39	0,052	0,671 NR
	0,5	6,87	7,10	7,30	0,14	0,020	0,236 NR
	1,4	6,87	7,15	7,90	0,26	0,036	0,002 R
T	0,2	24,30	25,80	28,70	1,60	0,062	0,023 R
	0,5	23,00	25,10	28,20	1,31	0,052	0,363 NR
	1,4	21,40	24,12	24,80	0,88	0,036	0,003 R
OD	0,2	0,10	3,12	8,80	3,06	0,978	0,078 NR
	0,5	0,06	1,41	6,22	1,88	1,334	0,004 R
	1,4	0,05	1,01	4,40	1,36	1,352	0,002 R
Clor-A	0,2	22,90	80,65	130,30	33,63	0,417	0,246 NR
	0,5	17,95	97,95	280,60	76,61	0,782	0,027 R
	1,4	87,00	148,50	294,20	54,86	0,370	0,007 R
DBO Total	0,2	50,00	82,29	120,00	20,87	0,254	0,977 NR
	0,5	80,00	183,50	275,00	54,66	0,300	0,379 NR
	1,4	250,00	1473,0	3500,0	1267,1	0,860	0,003 R
DQO Total	0,2	126,00	175,20	217,00	27,03	0,154	0,734 NR
	0,5	217,00	386,50	496,00	81,50	0,211	0,084 NR
	1,4	450,00	3509,0	8650,0	3349,2	0,955	0,008 R
SST	0,2	81,00	112,40	166,00	22,39	0,199	0,163 NR
	0,5	46,00	97,75	159,00	31,58	0,323	0,853 NR
	1,4	107,00	2979,0	9740,0	2832,9	0,951	0,074 NR
NO₃⁻	0,2	2,61	8,02	11,70	2,70	0,336	0,212 NR
	0,5	3,29	6,41	10,00	2,24	0,350	0,373 NR
	1,4	2,73	4,92	7,65	1,52	0,309	0,650 NR
NTK	0,2	43,27	46,31	50,53	2,32	0,050	0,501 NR
	0,5	35,99	49,08	68,75	8,74	0,178	0,500 NR
	1,4	188,60	309,40	436,30	96,67	0,312	0,084 NR

NH₄⁺	0,2	3,79	25,30	35,15	9,65	0,382	0,034 R
	0,5	18,21	31,87	41,00	8,27	0,259	0,050 NR
	1,4	17,53	67,04	138,40	41,36	0,617	0,155 NR
Alcalinidad	0,2	212,00	227,40	243,00	7,31	0,032	0,217 NR
	0,5	204,00	223,90	245,00	11,63	0,052	0,193 NR
	1,4	215,00	229,20	246,00	11,53	0,050	0,057 NR

NR: No Rechaza, R: Rechaza

Tabla 37. Estadísticos descriptivos base de datos punto 2L/3, P = 0,2 y 0,50m

Variable	Prof. (m)	Min.	Prom.	Max.	Desv. Est	Coef. Var	Normalidad Shapiro- Wilks
pH	0,2	7,24	8,26	9,30	0,71	0,09	0,066 NR
	0,5	6,78	7,21	8,14	0,32	0,04	0,001 R
T	0,2	24,60	28,24	34,20	2,38	0,08	0,333 NR
	0,5	19,10	25,23	29,70	2,64	0,10	0,518 NR
OD	0,2	0,40	10,11	26,10	8,02	0,79	0,033 R
	0,5	0,05	1,42	8,83	1,93	1,35	0,001 R
ORP	0,2	55,00	402,30	767,00	248,67	0,62	0,025 R
	0,5	16,00	383,90	768,00	278,16	0,72	0,010 R
Clor-A	0,2	118,90	1376,0	3453,0	884,91	0,64	0,515 NR
	0,5	238,90	1218,0	2229,0	508,17	0,42	0,267 NR
DQO Total	0,2	135,00	361,60	681,00	143,53	0,40	0,716 NR
	0,5	68,00	323,90	664,30	138,55	0,43	0,256 NR
SST	0,2	2,00	58,80	182,50	52,85	0,90	0,020 R
	0,5	2,00	59,70	185,00	48,95	0,82	0,056 NR
NO₃⁻	0,2	0,40	2,40	9,20	2,36	0,99	0,001 R
	0,5	0,30	2,60	6,00	2,06	0,78	0,010 R
NTK	0,2	16,90	24,90	39,50	5,18	0,21	0,165 NR
	0,5	18,10	26,20	42,90	5,64	0,22	0,043 R
NH₄⁺	0,2	9,90	17,70	26,50	4,08	0,23	0,842 NR

	0,5	9,30	19,10	28,20	4,21	0,22	0,592 NR
Alcalinidad	0,2	92,00	139,20	198,00	39,43	0,28	0,546 NR
	0,5	136,00	171,70	216,00	30,86	0,18	0,258 NR

NR: No Rechaza, R: Rechaza

9.2. Anexo 2. Estadísticos comparativos

Tabla 38. Pruebas U-Mann_ y_Whitney y Test de Levene para determinar diferencias significativas en las profundidades (0,2 y 0,5m) del punto L/3

Variable	Prueba	Valor P	Interpretación
pH	U-Mann y Whitney	0.001	Rechaza
	Test de Levene	0.041	Rechaza
T	U-Mann y Whitney	0,008	Rechaza
	Test de Levene	0,573	No Rechaza
OD	U-Mann y Whitney	2.33e-7	Rechaza
	Test de Levene	9.90e-5	Rechaza
ORP	U-Mann y Whitney	0,489	No Rechaza
	Test de Levene	0,683	No Rechaza
Clor-A	U-Mann y Whitney	0,636	No Rechaza
	Test de Levene	0,107	No Rechaza
DQO Total	U-Mann y Whitney	0,687	No Rechaza
	Test de Levene	0,306	No Rechaza
SST	U-Mann y Whitney	0,860	No Rechaza
	Test de Levene	0,480	No Rechaza
NO₃⁻	U-Mann y Whitney	0,950	No Rechaza
	Test de Levene	0,550	No Rechaza
NTK	U-Mann y Whitney	0,734	No Rechaza
	Test de Levene	0,857	No Rechaza
NH₄⁺	U-Mann y Whitney	0,772	No Rechaza
	Test de Levene	0,122	No Rechaza
Alcalinidad	U-Mann y Whitney	0,316	No Rechaza
	Test de Levene	0,122	No Rechaza

Tabla 39. Prueba Kruskal Wallis para determinar diferencias significativas en las profundidades (0,2, 0,5 y 1,4m) del punto L/2

Variable	Prueba	Valor P	Interpretación
pH	Kruskal Wallis	0,010	Rechaza
T	Kruskal Wallis	0,003	Rechaza
OD	Kruskal Wallis	0,162	No rechaza
Clor-A	Kruskal Wallis	0,003	Rechaza
DBO Total	Kruskal Wallis	5,23E-7	Rechaza
DQO Total	Kruskal Wallis	2,49E-7	Rechaza
SST	Kruskal Wallis	6,40E-9	Rechaza
NO₃⁻	Kruskal Wallis	0,018	Rechaza
NTK	Kruskal Wallis	5,80E-8	Rechaza
NH₄⁺	Kruskal Wallis	0,007	Rechaza
Alcalinidad	Kruskal Wallis	0,688	No rechaza

Tabla 40. Pruebas U-Mann_ y_Whitney y Test de Levene para determinar diferencias significativas en las profundidades (0,2 y 0,5m) del punto 2L/3

Variable	Prueba	Valor P	Interpretación
pH	U-Mann y Whitney	2,87E-08	Rechaza
	Test de Levene	6,09E-09	Rechaza
T	U-Mann y Whitney	0,001	Rechaza
	Test de Levene	0,831	No Rechaza
OD	U-Mann y Whitney	3,25E-08	Rechaza
	Test de Levene	4,89E-09	Rechaza
ORP	U-Mann y Whitney	0,660	No Rechaza
	Test de Levene	0,591	No Rechaza
Clor-A	U-Mann y Whitney	0,618	No Rechaza
	Test de Levene	0,032	Rechaza
DQO Total	U-Mann y Whitney	0,372	No Rechaza
	Test de Levene	0,582	No Rechaza
SST	U-Mann y Whitney	0,940	No Rechaza

	Test de Levene	0,992	No Rechaza
NO₃⁻	U-Mann y Whitney	0,801	No Rechaza
	Test de Levene	0,525	No Rechaza
NTK	U-Mann y Whitney	0,428	No Rechaza
	Test de Levene	0,884	No Rechaza
NH₄⁺	U-Mann y Whitney	0,173	No Rechaza
	Test de Levene	0,918	No Rechaza
Alcalinidad	U-Mann y Whitney	0,271	No Rechaza
	Test de Levene	0,629	No Rechaza

Tabla 41. Pruebas U-Mann_ y_Whitney y Test de Levene para determinar diferencias significativas en la profundidad 0,2m puntos L/3 y 2L/3, (Longitudinal)

Variable	Prueba	Valor P	Interpretación
pH	U-Mann y Whitney	0,428	No rechaza
	Test de Levene	0,656	No rechaza
T	U-Mann y Whitney	0,980	No rechaza
	Test de Levene	0,865	No rechaza
OD	U-Mann y Whitney	1.000	No rechaza
	Test de Levene	0,951	No rechaza
ORP	U-Mann y Whitney	0,862	No rechaza
	Test de Levene	0,357	No rechaza
Clor-A	U-Mann y Whitney	0,268	No rechaza
	Test de Levene	0,024	Rechaza
DQO Total	U-Mann y Whitney	0,678	No rechaza
	Test de Levene	0,556	No rechaza
SST	U-Mann y Whitney	0,678	No rechaza
	Test de Levene	0,467	No rechaza
NO₃⁻	U-Mann y Whitney	0,358	No rechaza
	Test de Levene	0,999	No rechaza
NTK	U-Mann y Whitney	0,413	No rechaza
	Test de Levene	0,751	No rechaza

NH₄⁺	U-Mann y Whitney	0,413	No rechaza
	Test de Levene	0,751	No rechaza
Alcalinidad	U-Mann y Whitney	0,524	No rechaza
	Test de Levene	0,802	No rechaza

Tabla 42. Pruebas U-Mann_ y_Whitney y Test de Levene para determinar diferencias significativas en la profundidad 0,5m puntos L/3 y 2L/3, (Longitudinal)

Variable	Prueba	Valor P	Interpretación
pH	U-Mann y Whitney	0,930	No rechaza
	Test de Levene	0,267	No rechaza
T	U-Mann y Whitney	0,650	No rechaza
	Test de Levene	0,729	No rechaza
OD	U-Mann y Whitney	0,505	No rechaza
	Test de Levene	0,377	No rechaza
ORP	U-Mann y Whitney	0,850	No rechaza
	Test de Levene	0,950	No rechaza
Clor-A	U-Mann y Whitney	0,672	No rechaza
	Test de Levene	0,328	No rechaza
DQO Total	U-Mann y Whitney	0,850	No rechaza
	Test de Levene	0,585	No rechaza
SST	U-Mann y Whitney	0,890	No rechaza
	Test de Levene	0,886	No rechaza
NO₃⁻	U-Mann y Whitney	0,821	No rechaza
	Test de Levene	0,278	No rechaza
NTK	U-Mann y Whitney	0,734	No rechaza
	Test de Levene	0,776	No rechaza
NH₄⁺	U-Mann y Whitney	0,850	No rechaza
	Test de Levene	0,141	No rechaza
Alcalinidad	U-Mann y Whitney	0,771	No rechaza
	Test de Levene	0,767	No rechaza

9.3. Anexo 3. Ensayos de trazadores

Tabla 43. Estudio de trazadores 1

Tiempo (h)	Caudal de entrada (L.s⁻¹)	Caudal de salida (L.s⁻¹)	Concentración centrifugada + background (µg.L⁻¹)
0,000	0,279	0,270	0,060
2,000	0,154	0,245	3,110
4,000	0,166	0,196	37,320
6,000	0,166	0,201	33,500
8,000	0,221	0,253	32,420
10,000	0,276	0,226	32,160
12,000	0,270	0,259	29,970
16,000	0,261	0,260	25,120
20,000	0,252	0,255	23,160
24,000	0,240	0,256	26,290
28,000	0,246	0,084	26,730
32,000	0,166	0,045	29,280
36,000	0,085	0,181	26,090
40,000	0,195	0,193	20,090
44,000	0,263	0,250	18,910
48,000	0,192	0,255	18,240
52,000	0,233	0,245	21,230
54,000	0,253	0,261	22,170
56,000	0,256	0,258	18,650
58,000	0,265	0,263	19,180
60,000	0,223	0,272	16,010
62,000	0,264	0,258	16,030
64,000	0,266	0,254	15,370
66,000	0,282	0,264	13,120
68,000	0,253	0,256	16,160
70,000	0,247	0,253	13,630
72,000	0,249	0,249	14,910

74,000	0,272	0,259	13,960
76,000	0,254	0,252	14,670
78,000	0,246	0,251	13,120
80,000	0,220	0,236	13,230
82,000	0,271	0,287	12,850
84,000	0,283	0,276	13,260
88,000	0,268	0,280	9,460
92,000	0,277	0,277	8,130
96,000	0,251	0,269	9,180
100,000	0,253	0,275	8,980
104,000	0,229	0,259	9,600
108,000	0,268	0,287	8,330
112,000	0,296	0,278	9,700
116,000	0,265	0,264	9,170
120,000	0,266	0,264	9,530
124,000	0,238	0,258	6,730
128,000	0,253	0,254	6,770
132,000	0,245	0,241	5,320
136,000	0,280	0,260	6,070
144,000	0,183	0,190	4,750
152,000	0,232	0,225	4,450
164,000	0,216	0,222	3,970
176,000	0,201	0,218	3,210
188,000	0,249	0,301	3,490
200,000	0,201	0,277	1,290
212,000	0,271	0,253	0,290
224,000	0,232	0,235	0,580
236,000	0,201	0,195	1,580
248,000	0,236	0,232	1,670
260,000	0,317	0,307	1,660
276,000	0,255	0,250	6,120

Tabla 44. Estudio de trazadores 2

Tiempo (h)	Caudal de entrada (L.s⁻¹)	Caudal de salida (L.s⁻¹)	Concentración centrifugada + background (µg.L⁻¹)
0	0,230	0,221	0
2	0,314	0,209	35,98
4	0,231	0,266	26,26
6	0,265	0,272	23,69
8	0,258	0,284	25,58
10	0,220	0,259	25,91
12	0,266	0,207	23,56
16	0,235	0,257	12,45
20	0,228	0,240	22,11
24	0,300	0,230	21,95
28	0,239	0,265	21,29
32	0,181	0,223	19,24
36	0,278	0,293	18,05
40	0,051	0,264	19,61
44	0,039	0,101	18,83
48	0,028	0,133	18,89
52	0,252	0,277	18,6
54	0,318	0,278	17,68
56	0,254	0,272	15,82
58	0,277	0,281	17,21
60	0,249	0,271	16,64
62	0,245	0,260	15
64	0,239	0,266	14,99
66	0,227	0,232	16,12
68	0,125	0,199	15,89
70	0,257	0,257	15,61
72	0,283	0,283	15,12
74	0,132	0,206	16,25

76	0,244	0,251	13,77
78	0,226	0,234	15,39
80	0,266	0,297	13,17
82	0,223	0,241	12,95
84	0,222	0,256	11,56
86	0,230	0,278	11,15
88	0,219	0,246	12,71
92	0,225	0,231	12,4
96	0,223	0,231	12,16
100	0,302	0,327	10,67
104	0,240	0,238	11,08
108	0,260	0,217	9,38
112	0,117	0,158	11,11
116	0,145	0,149	9,74
120	0,159	0,195	11,05
124	0,241	0,239	9,39
128	0,195	0,237	8,29
132	0,165	0,198	7,87
136	0,136	0,082	8,65
140	0,146	0,255	8,78
148	0,079	0,090	9,05
156	0,165	0,157	8,16
168	0,143	0,150	6,56
180	0,147	0,115	6,33
192	0,098	0,137	4,83
204	0,156	0,045	4,91
216	0,190	0,195	4,87
228	0,214	0,242	5,05
240	0,300	0,250	5,22
252	0,049	0,069	3,68
264	0,139	0,016	4,52

276	0,258	0,264	5,06
288	0,283	0,281	2,24
300	0,180	0,240	1,89
312	0,299	0,312	5,67
324	0,270	0,298	2,46
336	0,180	0,198	2,19
348	0,213	0,269	2,56

9.4. Anexo 4. User Define Function (UDF) construida para la variación temporal de la concentración de sólidos en el afluente

```
#include "udf.h"
```

```
DEFINE_PROFILE(volume_fraction,t,i)
```

```
{
```

```
real concentration_data[93]={
```

```
0.004379879999999999,    0.00478125,0.00669987,    0.007420969200000002,
0.0031650141,  0.003412002000000228,  0.003771297,  0.00537864359999543,
0.006425836799999999,0.0056807319, 0.0063574713, 0.010785531, 0.04083315,
0.0100164,  0.025857,  0.0067036797,  0.0236411622,  0.006623217000000001,
0.003812760000000001,    0.006189359999999998,    0.011085564,
0.009772110000000001,    0.0095361228,    0.010469943,    0.011776971,
0.0035476365,  0.0360718665,  0.0094048386,  0.0114188286,  0.0061000692,
0.0061217884,  0.001092567899999999,  0.0138878865,  0.008627557800000005,
0.005055517800000002,  0.005586937799999999,  0.0044476148,  0.001224833,
0.002396082000000002,    0.001424419800000002,    0.001873418700000001,
0.000982320471428569,    0.0021982326,    0.00511843285714285,
0.006922739999999998,    0.001174422899999999,    0.004025123999999999,
0.005121216,  0.004269618000000002,  0.0046111038,  0.004804454999999999,
0.004095810000000004,    0.005481245400000003,    0.00254519580001099,
0.00972611819999435,    0.0041536031999893,    0.00184732199999525,
0.0078006539999991,    0.00507861060000504,    0.00830986859999791,
```

```

0.0209541966000044,      0.0207335400000044,      0.0260300531999925,
0.00288984360000133,    0.00716800410000029,    0.00514981679999599,
0.00949371629999494,    0.0100572713999932,    0.00462025830000564,
0.0114198078,           0.00976276679999999,    0.00487130579999999,
0.006154323,0.003949185,  0.00413135699999999,    0.00587774999999998,
0.00834105000000001,    0.00436492,0.00582914699999998,
0.005473778999999998,   0.00565538999999999,    0.00596144100000003,
0.004897173,  0.00639172800000002,  0.00492813,  0.00667131000000002,
0.0108834,  0.00673505999999999,  0.00915093000000001,  0.01134852,
0.00694364999999999, 0.00382245, 0.00525708000000002
};

```

```

int temp,BASE_T,CERO=0;
real Y,T2;
face_t f;
BASE_T=9290;//BASE DE TIEMPO PARA NUMERO DE DIAS 9290
CERO=CURRENT_TIME;

```

```

if(CURRENT_TIME>BASE_T){
CERO=CURRENT_TIME-BASE_T;
printf("TIME OUT\n");
}

```

```

T2=CERO;
temp=(T2/BASE_T);

```

```

if(temp>92){temp=92;}

```

```

begin_f_loop(f,t)
{
Y = concentration_data [temp];

```

```

F_PROFILE(f,t,i) = Y;
}
printf("TIME: %f n_data: %d mi concentration_data: %f\n", T2,temp,Y);
end_f_loop(f,t)
}

```

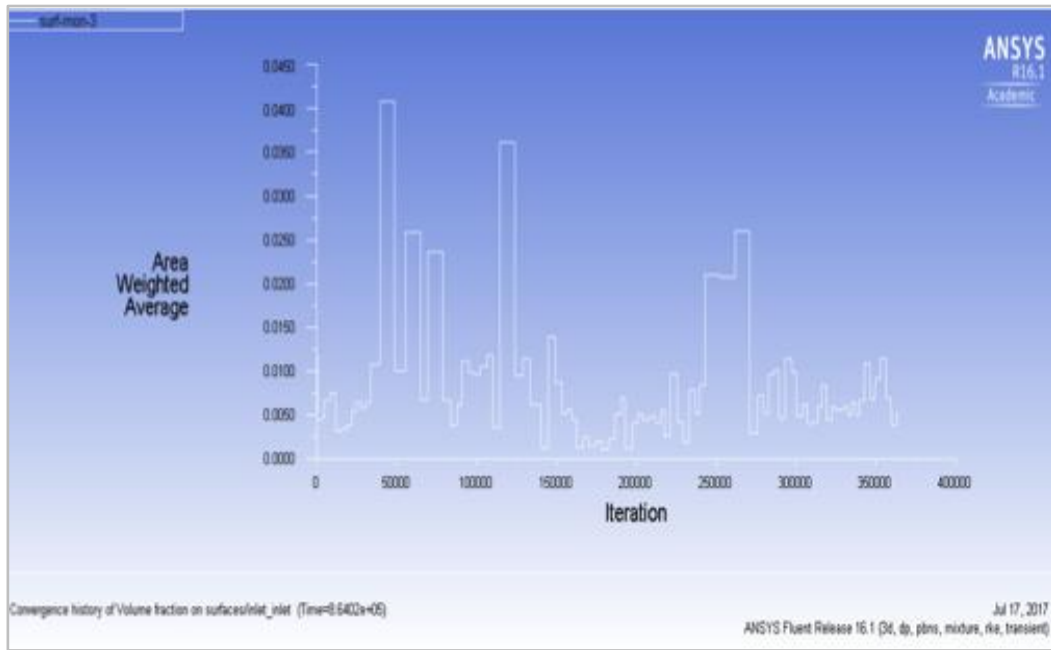


Figura 33. Monitor del tipo “area-weighted averaged concentration” para la UDF

9.5. Anexo 5. Parámetros de los modelos lineales mixtos

Tabla 45. Parámetros modelo lineal mixto Oxígeno disuelto

Parámetro	Valor	Varianza
Intercepto	-8.8617	3.7914
Error	1.1370	N.A
Hora 2	-0.0165	4.3614
Hora 3	1.4715	5.1989
Profundidad 2	2.9372	5.0469
Lugar 2	-1.7985	1.5164
Lugar 3	0.6644	1.4918
Clorofila	0.0002	0.0003

Temperatura del agua	0.0206	0.1256
pH	1.2617	0.4530
Hora 2 – profundidad 2	0.5383	0.7165
Hora 3 – profundidad 2	-0.2420	0.6805
Lugar 2 – Clorofila	0.0165	0.0042
Lugar 3 – Clorofila	-0.0006	0.0004
Profundidad 2 – Temperatura del agua	0.0590	0.1100
Hora 2 – Temperatura del agua	0.0559	0.1250
Hora 3 – Temperatura del agua	0.1694	0.1473
Profundidad 2 – pH	-0.7990	0.6182
Hora 2 – pH	0.1878	0.5545
Hora 3 – pH	-0.8509	0.5416

Tabla 46. Parámetros modelo lineal mixto pH

Parámetro	Valor	Varianza
Intercepto	4.4073	1.5596
Error	0.5187	N.A
Hora 2	0.3666	1.4957
Hora 3	1.4729	1.7527
Profundidad 2	2.7277	1.3672
Lugar 2	-0.2298	0.8227
Lugar 3	0.0017	0.7874
Nitrógeno total	-0.0099	0.0121
Temperatura del agua	0.1388	0.0520
Hora 2 – profundidad 2	-0.3410	0.2833
Hora 3 – profundidad 2	-0.4492	0.2732
Profundidad 2 – nitrógeno total	0.0138	0.0010
Profundidad 2 – temperatura agua	-0.1375	0.0470
Hora 2 – temperatura del agua	-0.0055	0.0534
Hora 3 – temperatura del agua	-0.0441	0.0647

Tabla 47. Parámetros modelo lineal mixto temperatura

Parámetro	Valor	Varianza
Intercepto	27.4442	6.1240
Error	2.3167	N.A
Hora 2	-6.9173	7.9336
Hora 3	3.6138	8.8863
Profundidad 2	-2.2000	0.8852
Lugar 2	-3.1802	4.1863
Lugar 3	1.2030	4.0470
Radiación solar	-0.0004	0.0021
Temperatura ambiente	0.0341	0.2499
Hora 2 – profundidad 2	-0.3888	1.1515
Hora 3 – profundidad 2	1.1213	1.1198
Hora 2 – radiación solar	-0.0004	0.0027
Hora 3 – radiación solar	0.0170	0.0152
Hora 2 – Temperatura ambiente	0.2953	0.3508
Hora 3 – Temperatura ambiente	-0.2351	0.4084

Tabla 48. Parámetros modelo lineal mixto clorofila

Parámetro	Valor	Varianza
Intercepto	994.40	1998.4
Error	566.90	N.A
Hora 2	-4197.61	2919.3
Hora 3	-1769.23	2680.9
Profundidad 2	-4290.78	2554.35
Lugar 2	-1166.42	773.50
Lugar 3	-114.99	764.66
pH	-193.08	272.95
Temperatura del agua	71.46	63.820
Oxígeno disuelto	-20.59	26.750
Hora 2 – profundidad 2	275.29	372.88

Hora 3 – profundidad 2	174.38	364.08
Hora 2 – pH	647.65	378.50
Hora 3 – pH	228.24	307.35
Profundidad 2 – pH	818.98	317.39
Profundidad 2 – Temperatura del agua	-62.73	55.090
Hora 2 – Temperatura del agua	--27.97	63.340
Hora 3 – Temperatura del agua	-14.07	75.410
Profundidad 2 – Oxígeno disuelto	-34.62	57.240
Hora 2 – Oxígeno disuelto	-12.86	37.060
Hora 3 – Oxígeno disuelto	73.64	39.350
Lugar 2 – Oxígeno disuelto	3.57	51.100
Lugar 3 – Oxígeno disuelto	21.76	19.020

Tabla 49. Parámetros modelo lineal mixto nitrógeno total

Parámetro	Valor	Varianza
Intercepto	9.8287	7.2660
Error	2.0420	N.A
Hora 2	-6.1483	10.6548
Hora 3	-25.8055	9.7912
Profundidad 2	-1.3165	9.2531
Lugar 2	3.7645	3.0219
Lugar 3	0.5859	2.9905
pH	-1.3484	0.9961
Temperatura del agua	0.1029	0.2360
Oxígeno disuelto	-0.0220	0.0969
Hora 2 – profundidad 2	-0.0320	1.4445
Hora 3 – profundidad 2	1.4592	1.3620
Hora 2 – pH	0.2969	1.3778
Hora 3 – pH	1.4725	1.1235
Profundidad 2 – pH	0.3022	1.1638
Profundidad 2 – Temperatura del agua	-0.0410	0.2075

Hora 2 – Temperatura del agua	0.1377	0.2295
Hora 3 – Temperatura del agua	0.5389	0.2905
Profundidad 2 – Oxígeno disuelto	-0.1546	0.2086
Hora 2 – Oxígeno disuelto	0.0697	0.1351
Hora 3 – Oxígeno disuelto	-0.0180	0.1424
Lugar 2 – Oxígeno disuelto	0.4458	0.1872
Lugar 3 – Oxígeno disuelto	-0.0128	0.0691

Tabla 50. Parámetros modelo lineal mixto nitrógeno amoniacal

Parámetro	Valor	Varianza
Intercepto	0.2189	14.6861
Error	4.1050	N.A
Hora 2	3.7252	21.417
Hora 3	48.3961	19.681
Profundidad 2	-3.3991	18.600
Lugar 2	14.7800	6.4515
Lugar 3	-0.0883	6.3920
pH	1.6752	2.0022
Temperatura del agua	0.3195	0.4744
Oxígeno disuelto	-0.3053	0.1947
Hora 2 – profundidad 2	2.4347	2.9036
Hora 3 – profundidad 2	2.0460	2.7379
Hora 2 – pH	0.3408	2.7696
Hora 3 – pH	-0.9362	2.2584
Profundidad 2 – pH	1.2528	2.3393
Profundidad 2 – Temperatura del agua	-0.2285	0.4171
Hora 2 – Temperatura del agua	-0.3510	0.4613
Hora 3 – Temperatura del agua	-1.7573	0.5839
Profundidad 2 – Oxígeno disuelto	-0.3680	0.4194
Hora 2 – Oxígeno disuelto	0.2179	0.2715
Hora 3 – Oxígeno disuelto	0.5382	0.2863

Lugar 2 – Oxígeno disuelto	-1.8885	0.3763
Lugar 3 – Oxígeno disuelto	-0.0837	0.1389

Tabla 51. Parámetros modelo lineal mixto nitrógeno orgánico

Parámetro	Valor	Varianza
Intercepto	-25.9143	18.294
Error	5.1440	N.A
Hora 2	43.4088	26.833
Hora 3	19.2791	24.659
Profundidad 2	30.2522	23.303
Lugar 2	4.2273	7.5876
Lugar 3	-0.8688	7.5082
pH	0.7551	2.5086
Temperatura del agua	0.8298	0.5944
Oxígeno disuelto	0.0713	0.2439
Hora 2 – profundidad 2	-1.5077	3.6379
Hora 3 – profundidad 2	-3.6201	3.4302
Hora 2 – pH	-2.0941	3.4700
Hora 3 – pH	-0.1935	2.8295
Profundidad 2 – pH	-1.4871	2.9309
Profundidad 2 – Temperatura del agua	-0.7075	0.5226
Hora 2 – Temperatura del agua	-0.9421	0.5779
Hora 3 – Temperatura del agua	-0.4663	0.7315
Profundidad 2 – Oxígeno disuelto	0.6709	0.5254
Hora 2 – Oxígeno disuelto	-0.0233	0.3402
Hora 3 – Oxígeno disuelto	-0.3126	0.3587
Lugar 2 – Oxígeno disuelto	1.2065	0.4715
Lugar 3 – Oxígeno disuelto	0.0523	0.1740