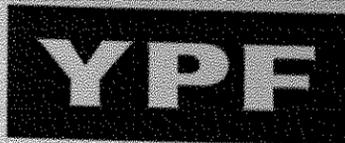


Patrocinantes especiales

Platino



Plata



Dow Argentina

MONSANTO

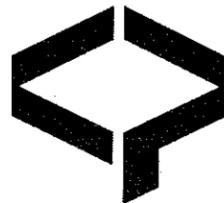


Auspiciantes



APLA

ASOCIACION
PETROQUIMICA Y QUIMICA
LATINOAMERICANA



CAMARA DE LA INDUSTRIA
QUIMICA Y PETROQUIMICA



CAIQ2013

ROSARIO - Patio de la Madera

Octubre 20 al 23 de 2013



CAIQ2013 -VII CONGRESO ARGENTINO DE INGENIERÍA QUÍMICA

"Energía - Sustentabilidad - Nanotecnologías - Bioprocesos - I&D, Desafíos del futuro"

2dasJASP - 2das. JORNADAS ARGENTINAS DE SEGURIDAD DE PROCESOS

"La Gestión del Riesgo y el Cambio en los Procesos Industriales"

**PROGRAMA DEL CAIQ2013
(Incluye las presentaciones de las 2dasJASP)**

ROSARIO - Patio de la Madera - Octubre 20 al 23 de 2013

ESTIMACIÓN DINÁMICA DE PARÁMETROS PARA UN MODELO ECOLÓGICO DEL EMBALSE LOS MOLINOS

S. B. Rodríguez Reartes^{1,*}, V. Estrada¹, R. Bazán^{2,3}, N. Larrosa³, A. Cossavella^{3,4}, A. López^{3,4}, F. Busso⁵ y M. S. Díaz¹

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

²ISEA, Instituto Sup de Estudios Ambientales.

³Dpto. Qca. Industrial y Aplicada, Fac. Cs. Exactas, Físicas y Naturales - UNC,
Av. Vélez Sarsfield 1611 - 5000 Córdoba - Argentina.

⁴ICTA, Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos

⁵Aguas Cordobesas S.A.

E-mail: brodriguez@plapiqui.edu.ar

Resumen. En este trabajo, presentamos y calibramos un modelo de calidad de agua basado en primeros principios, el cual representa los procesos ecológicos a través de un complejo set de ecuaciones algebraico-diferenciales. El modelo requiere la estimación de numerosos parámetros para ajustar a las condiciones ambientales específicas del sitio en estudio. Se consideran los gradientes de las variables de estado a lo largo de la columna de agua, resultando en un sistema de ecuaciones algebraicas y diferenciales a derivadas parciales. Luego, el sistema es transformado a un sistema ordinario diferencial-algebraico (EDA) por discretización espacial del cuerpo de agua en capas horizontales. Los principales parámetros biogeoquímicos del modelo son obtenidos por resolución de un problema de estimación dinámica de parámetros, sujeto al EDA formulado. Los parámetros calculados permiten una representación apropiada de la dinámica del cuerpo de agua, como se muestra en los resultados numéricos.

Palabras clave: Modelo Ecológico, Embalse Los Molinos, Calibración.

1. Introducción

La eutrofización de lagos, ríos y zonas costeras se ha intensificado recientemente por la creciente descarga de nutrientes a los cuerpos de agua. Las actividades humanas, como las industriales y agrícolas, son la principal causa de este problema ambiental que afecta directamente la biomasa de fitoplancton. En este contexto, la formulación de modelos de eutrofización capaces de describir los principales fenómenos físicos, químicos y biológicos relacionados con la biomasa de fitoplancton y la dinámica de nutrientes son esenciales para el manejo del recurso hídrico (Estrada et al., 2011). Este tipo de modelos representan los procesos ecológicos a través de un complejo set de ecuaciones algebraico-diferenciales que contienen coeficientes de velocidad que deben ser estimados para ajustar a las condiciones ambientales específicas del sitio en estudio. En consecuencia, el primer paso para el desarrollo de un modelo de eutrofización es resolver un problema de estimación dinámica de parámetros. Este problema puede ser resuelto a través de diferentes estrategias. Zhang et al. (2004) calibraron los parámetros físicos y químicos del modelo por prueba y error empleando un procedimiento secuencial para determinar los parámetros de fitoplancton y zooplancton usando la exergía como función objetivo. Shen y Kuo (1996) utilizaron un método variacional para estimar los parámetros cinéticos desconocidos. Shen (2006) propuso una función objetivo basada en mínimos cuadrados y aplicó un método de Gauss-Newton modificado para resolver el problema de estimación dinámica de parámetros. Más recientemente (Estrada, 2009) resolvieron el problema de estimación dinámica en un marco de optimización simultánea y utilizaron una función objetivo basada en mínimos cuadrados ponderados para determinar los valores de los parámetros más sensitivos del modelo establecidos en base a un análisis de sensibilidad global (Estrada y Díaz, 2010).

En este trabajo, formulamos un problema de estimación dinámica de parámetros con una función objetivo de cuadrados mínimos ponderados sujeto a un modelo de gran escala representado por un sistema complejo de ecuaciones diferenciales parciales algebraicas (EDPA) que resulta de los balances de masa dinámicos de los principales grupos de fitoplancton observados durante el año 2007 (dinófitas y criptófitas), nutrientes (nitrateo, nitrito, amonio, nitrógeno orgánico, fosfato y fósforo orgánico), oxígeno disuelto y demanda bioquímica de oxígeno. Las ecuaciones algebraicas

representan los perfiles de temperatura, radiación solar, precipitaciones, evaporación, caudal de los afluentes y sus concentraciones de nutrientes asociadas; así como las ecuaciones de velocidad. Luego, el sistema EDPA es transformado a un sistema ordinario diferencial-algebraico (EDA) por discretización espacial del cuerpo de agua en capas horizontales.

El presente estudio ha sido realizado con base a datos observados para el embalse Los Molinos ubicado en la Provincia de Córdoba (Argentina), que provee de agua potable a medio millón de habitantes de la Ciudad de Córdoba. El problema de estimación de parámetros ha sido formulado en un entorno de optimización dinámica, y resuelto con una estrategia de parametrización del vector de variables de control (gPROMS, 2012). Los resultados permiten una representación adecuada de la dinámica observada en el cuerpo de agua en estudio.

2. Área de Estudio

El embalse Los Molinos es un cuerpo de agua multipropósito ubicado a 65 km al sudoeste de la ciudad de Córdoba capital. Las coordenadas geográficas del espejo de agua son 31° 43' 30" S y 64° 32' 20" W. Fue construido con el propósito del abastecimiento de agua potable, la generación de energía hidroeléctrica, el riego y la atenuación de crecidas. Actualmente, abastece de agua potable a medio millón de habitantes de la ciudad de Córdoba. Sus afluentes principales son los ríos San Pedro, Los Espinillos, Del Medio y Los Reartes. El efluente es el río Los Molinos. Su cuenca de alimentación se extiende a lo largo de un área de 978 km². El embalse posee una profundidad media de 14 m, una profundidad máxima de 52 m y su superficie a nivel de cota de labio de vertedero es de 21.1 km². Su tiempo de retención es de 288 días. Se tomaron datos físicos, químicos y biológicos del cuerpo de agua mensualmente en el período de enero a diciembre de 2007 en cinco estaciones de muestreo (Bazán, 2011). Se efectuaron análisis biológicos cualitativos y cuantitativos, así como físico químicos, que incluyen la determinación de concentraciones de nitrato, nitrito, amonio, nitrógeno total, fosfato, fósforo total, carbono orgánico y sales, oxígeno disuelto, temperatura del agua, pH y profundidad del disco de Secchi (profundidad a la cual puede observarse el disco desde afuera del agua). El embalse Los Molinos es un cuerpo de agua

multipropósito sometido a un gran impacto como consecuencia de prácticas agrícola-ganaderas y de un creciente desarrollo urbanístico en su cuenca. Estas actividades contribuyen al aporte de nutrientes al embalse, especialmente el fósforo, constituyendo éste uno de los factores esenciales para el crecimiento del fitoplancton. Entre las algas que han desarrollado florecimientos se destaca *Ceratium hirundinella* (perteneciente a la división *Pyrrhophyta* clase *Dinophyceae*) marcando su predominio durante el verano y principio de otoño. Los eventos de mortandad de peces en el embalse Los Molinos asociados a la presencia de *C. hirundinella* no son desconocidos, se han registrado tres sucesos similares en los años 1999, 2005 y 2006. Por otra parte, se conoce que el estado trófico actual del cuerpo de agua es mesotrófico, es decir que avanza hacia un estado eutrófico (con elevada concentración de nutrientes) a menos que se tomen medidas de gestión adecuadas (Cossavella, 2003; Estrada et al., 2009; Bazán, 2011). Aunque se ha realizado el monitoreo de este Embalse y existen estudios preliminares de sus parámetros físicos (Corral et al., 2002 y 2004), no se han desarrollado hasta el presente, modelos en entornos dinámicos, que permitan la formulación de problemas de control óptimo para la determinación estrategias de gestión adecuadas de este recurso hídrico.

El modelo planteado requiere datos de entrada de cuatro tipos: a) datos descriptivos del embalse; b) perfiles de temperatura, radiación solar, precipitaciones, evaporación y caudales de entrada de los tributarios y sus concentraciones de nutrientes asociadas; c) condiciones iniciales para las variables de estado diferenciales; d) cotas sobre los parámetros del modelo. Las entradas del modelo del punto b) fueron aproximadas con funciones sinusoidales, como se muestra en la Fig. 1 para la temperatura del agua.

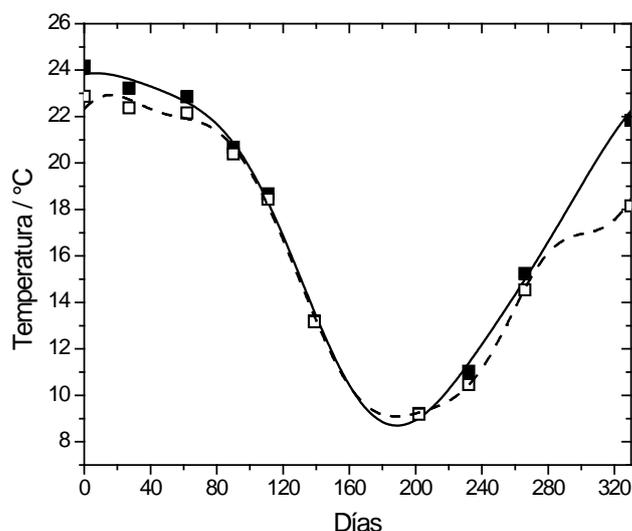


Fig. 1. Temperatura del agua en la capa superior (■, —) e inferior (□, ---) en función del tiempo.

3. Modelo de Calidad de Agua y Estimación Dinámica de Parámetros

Los modelos de eutrofización están representados por un sistema de ecuaciones diferenciales parciales algebraicas (EDPA), que se obtiene al formular los balances de masa para los principales componentes del ecosistema del embalse. En este caso se consideraron balances dinámicos para los dos principales grupos de fitoplancton observados (dinófitas y criptófitas), nutrientes (nitrato, nitrito, amonio, nitrógeno orgánico, fosfato y fósforo orgánico), así como para oxígeno disuelto y demanda bioquímica de oxígeno. Luego, el sistema es transformado a un sistema ordinario diferencial-algebraico (DAE) por discretización espacial del cuerpo de agua en capas horizontales. El embalse Los Molinos es un cuerpo de agua monomóctico, estratificado térmicamente en verano. La segmentación física definida es consistente con las profundidades epilimnética e hipolimnética observadas. Así mismo, se consideraron temperaturas diferenciadas para ambas capas. Las principales hipótesis simplificadoras que se han asumido en el modelo son: densidad del agua constante, área transversal de la capa superior constante, el fósforo como nutriente limitante, y concentraciones

horizontales promedio (se consideran los gradientes de concentración espaciales sólo en la dirección vertical).

Los balances dinámicos en cada capa incluyen los ingresos (de agua y nutrientes) a partir de los tributarios, las lluvias, la evaporación, las salidas para potabilización y del río Los Molinos, los términos de generación y consumo, la transferencia entre capas, y la variabilidad de volumen del embalse (a través del cambio en la altura de la capa superior). Los parámetros estimados forman parte de los términos de generación y consumo. Los dos grupos de fitoplancton considerados se diferencian en sus tasas máximas de crecimiento y mortalidad, la cinética del fósforo y del nitrógeno y sus requerimientos de luz.

Además de las ecuaciones diferenciales, el modelo posee ecuaciones algebraicas que consideran los perfiles de temperatura (para cada capa), radiación solar, precipitaciones, evaporación y tributarios (caudales y concentraciones de nutrientes). Se formularon ecuaciones adicionales para el cálculo de la generación y consumo de cada componente.

Se consideró una función objetivo de mínimos cuadrados ponderados. El problema de estimación de parámetros EDA restringido se formuló dentro en un entorno de optimización dinámica y resuelto con una estrategia de parametrización del vector de variables de control (gPROMS, 2012).

La Tabla 1 presenta las ecuaciones del modelo ecológico formulado, con base en el modelo de (Estrada et al., 2009).

Tabla 1. Ecuaciones del modelo de calidad de agua formulado para el Embalse Los Molinos. i = capa superior (U) e inferior (L). $j = Dy, Crip$ (Dinófito y Criptófito).

Balance de masa total

$$\frac{dh_T}{dt} = \frac{1}{\rho A} [\sum_{k=1}^{NIN} QIN_k - \sum_{m=1}^{NOU} QOUT_m + Q_{prec} - Q_{evap}] \quad (1)$$

m = ingresos por tributarios (ríos San Pedro, Los Espinillos, Del Medio y Los Reartes).

k = salidas por potabilización y río Los Molinos.

Balances de masa para las capas horizontales

Capa superior:

$$\frac{dC_{Uj}}{dt} = \sum_{k=1}^{NIN} \frac{QIN_{U,k}}{V_U} C_{IN_{Ujk}} - \sum_{m=1}^{NOU} \frac{QOUT_{U,m}}{V_U} C_{Uj} + r_{Uj} - \frac{k_d A}{\Delta h_U h_U} (C_{Uj} - C_{Lj}) - \frac{C_{Uj}}{h_U} \frac{dh_U}{dt} \quad (2)$$

Capa inferior:

$$\frac{dC_{Lj}}{dt} = \sum_{m=1}^{NOUT} \frac{Q_{OUTL,m}}{V_L} C_{Lj} + r_{Lj} + \frac{k_d A}{\Delta h_L h_L} (C_{Lj} - C_{Uj}) - \frac{C_{Lj}}{h_L} \frac{dh_L}{dt} \quad (3)$$

Ecuaciones de Generación/Consumo:

Ecuaciones de velocidad para fitoplancton

$$r_{ij} = R_{ij,growth} - R_{ij,resp} - R_{ij,death} - R_{ij,settling} \quad (4)$$

Tasa específica de crecimiento del fitoplancton $R_{ij,growth} = k_{i,growth} f(T)_{ij} f(I)_{ij} f(N)_{ij} C_{ij}$ (5)

Limitación de temperatura $f(T)_{ij} = \frac{T_i}{T_{opt_j}} \exp\left(1 - \frac{T_i}{T_{opt_j}}\right)$ (6)

Limitación de luz $f(I)_{ij} = \frac{I_{0i}}{I_{opt_j}} \exp\left(1 - \frac{I_{0i}}{I_{opt_j}}\right)$ (7)

Limitación de nutrientes $f(N)_{ij} = \frac{C_{i,PO_4}}{C_{i,PO_4} + K_{Pj}}$ (8)

Respiración $R_{ij,resp} = k_{j,resp} \theta_r^{(T-20)} C_{ij}$ (9)

Muerte $R_{ij,death} = k_{j,death} \theta_m^{(T-20)} C_{ij}$ (10)

Sedimentación $R_{ij,settling} = k_{j,settling} \frac{C_{ij}}{h_i}$ (11)

Tasa de cambio para los compuestos del ciclo de fósforo (fósforo orgánico –OP, ortofosfato –PO₄)

$$r_{i,OP} = R_{i,OP,death} + R_{i,OP,miner} - R_{i,ON,settling} \quad (12)$$

$$r_{i,PO_4} = \begin{cases} -R_{i,PO_4,uptake} + R_{i,PO_4,death} + R_{i,OP,miner} & i = U \\ -R_{i,PO_4,uptake} + R_{i,PO_4,death} + R_{i,OP,miner} + R_{i,PO_4,sed} & i = L \end{cases} \quad (13)$$

Liberación de OP por muerte del fitoplancton $R_{i,OP,uptake} = \sum_j (C_{ij} k_{j,death} \alpha_{pc}(f_{OP}))$ (14)

Mineralización de OP $R_{i,OP,miner} = k_{mp} \theta_{mp}^{(T-20)} \frac{\sum_j C_{ij}}{K_{mpc} + \sum_j C_{ij}} C_{i,OP}$ (15)

Sedimentación de OP $R_{i,OP,settling} = \frac{k_{OP,settling} (1 - f_{DOP})}{h_i} C_{i,OP}$ (16)

Captación de PO₄ por el fitoplancton $R_{i,PO_4,uptake} = \sum_j (\alpha_{pc} R_{j,growth})$ (17)

Liberación de PO₄ por muerte del fitoplancton $R_{i,PO_4,death} = \sum_j (C_{ij} k_{j,death} \alpha_{pc} (1 - f_{OP}))$ (18)

Liberación de PO₄ desde los sedimentos $R_{L,PO_4,sed} = S_p \left(1 - \frac{C_{L,DO}}{K_{DOS} + C_{L,DO}}\right) A$ (19)

Tasa de cambio para los compuestos del ciclo de nitrógeno (nitrógeno orgánico –ON, nitrato –NO₃, amonio- NH₄)

$$r_{i,ON} = R_{i,ON,death} + R_{i,ON,miner} - R_{i,ON,settling} \quad (20)$$

$$r_{i,NO_3} = -R_{i,NO_3,uptake} + R_{i,NH_4,nit} - R_{i,NO_3,denit} \quad (21)$$

$$r_{i,NH_4} = \begin{cases} -R_{i,NH_4,uptake} - R_{i,NH_4,nit} + R_{i,NH_4,death} + R_{i,ON,miner} & i = U \\ -R_{i,NH_4,uptake} - R_{i,NH_4,nit} + R_{i,NH_4,death} + R_{i,ON,miner} + R_{i,NH_4,sed} & i = L \end{cases} \quad (22)$$

$$\text{Tasa de mineralización de ON} \quad R_{i,ON,miner} = k_{mn} \theta_{mn}^{(T-20)} \frac{\sum_j C_{ij}}{K_{mpc} + \sum_j C_{ij}} C_{i,ON} \quad (23)$$

$$\text{Liberación de ON por muerte del fitoplancton} \quad R_{i,ON,uptake} = \sum_j (C_{ij} k_{j,death} \alpha_{nc} (f_{ON})) \quad (24)$$

$$\text{Tasa de sedimentación de ON} \quad R_{i,ON,settling} = \frac{k_{ON,settling} (1-f_{DON})}{h_i} C_{i,ON} \quad (25)$$

$$\text{Captación de } NO_3 \text{ por el fitoplancton} \quad R_{i,NO_3,uptake} = \sum_j (\alpha_{nc} R_{j,growth} (1 - P_{NH_4})) \quad (26)$$

$$\text{Tasa de desnitrificación} \quad R_{i,NO_3,denit} = k_{denit} \theta_{denit}^{(T-20)} \frac{K_{denit}}{K_{denit} + C_{i,DO}} C_{i,NO_3} \quad (27)$$

$$\text{Captación de } NH_4 \text{ por el fitoplancton} \quad R_{i,NH_4,uptake} = \sum_j (\alpha_{nc} R_{j,growth} P_{NH_4}) \quad (28)$$

$$\text{Factor de preferencia de } NH_4 \quad P_{NH_4,j} = \frac{C_{i,NH_4} C_{i,NO_3} + C_{i,NH_4} k_{Nj}}{(k_{Nj} + C_{i,NH_4})(k_{Nj} + C_{i,NO_3})} \quad (29)$$

$$\text{Liberación de } NH_4 \text{ por muerte del fitoplancton} \quad R_{i,NH_4,death} = \sum_j (C_{ij} k_{j,death} \alpha_{nc} (1 - f_{ON})) \quad (30)$$

$$\text{Tasa de nitrificación} \quad R_{i,NH_4,nit} = k_{nit} \theta_{nit}^{(T-20)} \frac{C_{i,DO}}{K_{nit} + C_{i,DO}} C_{i,NH_4} \quad (31)$$

$$\text{Liberación de } NH_4 \text{ desde el sedimento} \quad R_{L,NH_4,sed} = S_N \left(1 - \frac{C_{L,DO}}{K_{DOS} + C_{L,DO}} \right) A \quad (32)$$

Tasa de cambio para la concentración de la demanda bioquímica de oxígeno (BOD)

$$r_{i,BOD} = R_{i,BOD,death} - R_{i,BOD,oxid} - R_{i,BOD,settling} \quad (33)$$

$$\text{Generación de BOD por el fitoplancton} \quad R_{i,BOD,death} = \sum_j (R_{j,death} \alpha_{oc}) \quad (34)$$

Demanda de DO para oxidación de la materia orgánica

$$R_{i,BOD,oxid} = k_{bod} \theta_{bod}^{(T-20)} \frac{C_{i,DO}}{K_{bod} + C_{i,DO}} C_{i,BOD} \quad (35)$$

$$\text{Tasa de sedimentación de BOD} \quad R_{i,BOD,settling} = \frac{k_{BOD,settling} (1-f_{DBOD})}{h_i} C_{i,BOD} \quad (36)$$

Tasa de cambio para la concentración de oxígeno disuelto (OD)

$$r_{i,DO} = \begin{cases} R_{i,DO,reair} - R_{i,DO,nit} + R_{i,DO,resp/photo} - R_{i,BDO,oxid} & i = U \\ -R_{i,DO,nit} + R_{i,DO,resp/photo} - R_{i,DO,bod} - R_{i,BDO,oxid} & i = L \end{cases} \quad (37)$$

$$\text{Tasa de re-aireación} \quad R_{U,DO,reair} = \frac{k_a \theta_a^{(T-20)}}{h_U} (C^* - C_{U,DO}) \quad (38)$$

$$\text{Concentración de saturación de } DO^a \quad C^* = 16.5 - \frac{8}{12} T \quad (39)$$

$$\text{DO consumido en la nitrificación} \quad R_{i,DO,nit} = k_{nit} \theta_{nit}^{(T-20)} \frac{C_{i,DO}}{K_{nit} + C_{i,DO}} C_{i,NH_4} \alpha_{on} \quad (40)$$

Producción neta de oxígeno por respiración/fotosíntesis

$$R_{i,DO,resp/phot} = \left(\sum_j (R_{ij,growth} - R_{ij,resp}) \right) \alpha_{oc} \quad (41)$$

$$\text{Demanda de oxígeno del sedimento} \quad R_{i,DO,sed} = \frac{k_{sod} \theta_{sod}^{(T-20)}}{h_L} \frac{C_{L,DO}}{K_{sod} + C_{L,DO}} \quad (42)$$

^a Zhang et al., 2004.

4. Resultados

El problema de optimización para estimar los valores de 10 parámetros en el modelo de calidad de agua formulado para el embalse Los Molinos tiene 19 ecuaciones diferenciales y 51 algebraicas, luego de la discretización espacial en dos capas. Se consideró un horizonte de 330 días ya que para este período se conocían los datos de entrada necesarios para el modelo. Los parámetros estimados se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2. Parámetros óptimos obtenidos para el modelo de calidad de agua formulado (ver Tabla 1).

Símbolo	Descripción	Valor
$k_{Crip, growth}$	Tasa máxima de crecimiento de criptófitas (d^{-1})	0.833528
$k_{Dy, growth}$	Tasa máxima de crecimiento de dinófitas (d^{-1})	1.0851
k_{mp}	Tasa de mineralización de fósforo orgánico (d^{-1})	0.099
K_{nit}	Constante a la mitad de saturación para la limitación por O_2 de la nitrificación ($mg.l^{-1}$)	0.148665
K_{PCrip}	Constante a la mitad de saturación para la captación de P por criptófitas ($mgP.l^{-1}$)	0.0170722
K_{PDy}	Constante a la mitad de saturación para la captación de P por dinófitas ($mgP.l^{-1}$)	0.00447164
$I_{opt Crip}$	Intensidad de luz óptima de crecimiento de criptófitas ($ly.d^{-1}$)	50
$I_{opt Dy}$	Intensidad de luz óptima de crecimiento de dinófitas ($ly.d^{-1}$)	197.3
$T_{opt Crip}$	Temperatura óptima de crecimiento de criptófita ($^{\circ}C$)	33
$T_{opt Dy}$	Temperatura óptima de crecimiento de dinófita ($^{\circ}C$)	18

Los valores obtenidos permiten el cálculo de los perfiles de las variables de estado, los cuales representan satisfactoriamente los datos obtenidos para el embalse (ver Fig. 2). La Fig. 2 muestra los perfiles de dinófitas, criptófitas, nitrato, fosfato, amonio y oxígeno disuelto comparados con los datos experimentales para 330 de simulación (el día 0 corresponde al 16 de enero de 2007 y el día 330 al 12 de diciembre de 2007).

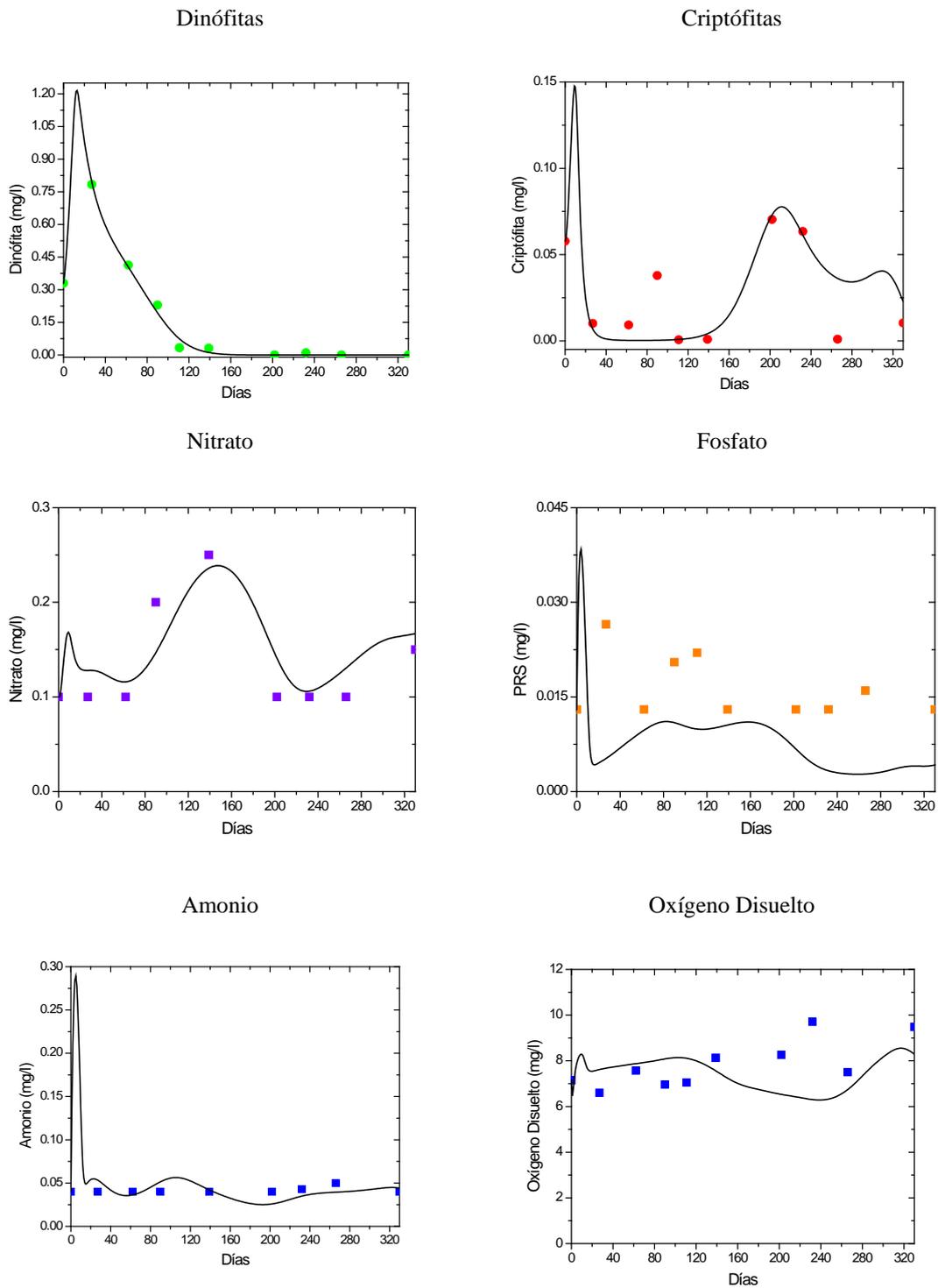


Fig. 2. Datos experimentales (marcadores) y perfiles simulados (líneas) con los parámetros estimados para el modelo formulado (ver Tabla 2).

Actualmente, el modelo está siendo validado con datos adicionales obtenidos para el embalse. La validación permitirá conocer si el modelo, con los parámetros establecidos aquí, es capaz de representar el patrón del comportamiento biológico del embalse en otros períodos (Arhonditsis y Brett, 2005; Estrada et al., 2010).

5. Conclusiones

En este trabajo se formuló un modelo de calidad de agua para el embalse Los Molinos, y se resolvió un problema de estimación dinámica para establecer los parámetros óptimos del modelo con una estrategia de parametrización del vector de variables de control. Esta técnica ya ha sido empleada para resolver, en forma rigurosa y satisfactoria, problemas de este tipo (Estrada et al., 2009). En este trabajo se ajustaron los parámetros cinéticos del modelo en base a los datos experimentales obtenidos para el embalse Los Molinos mensualmente durante el año 2007. Los resultados numéricos presentados muestran que los parámetros calculados permiten una representación apropiada de la dinámica del cuerpo de agua. Actualmente, se está trabajando en la validación del modelo con un set independiente de datos experimentales. La validación es un paso previo al empleo de este modelo como herramienta para la determinación de estrategias de manejo del recurso hídrico, especialmente en lo referido a la determinación de los perfiles de nutrientes óptimos que permitan controlar las floraciones algales y de cianobacterias.

Reconocimientos

Los autores agradecen el soporte financiero de CONICET, Universidad Nacional del Sur, Universidad Nacional de Córdoba y ANPCYT, Argentina.

Referencias

- Arhonditsis, G. B.; Brett, M. T. (2005). Eutrophication model for Lake Washington (USA): Part II—model calibration and system dynamics analysis. *Ecological Modelling* 187 (2–3): 179-200.

- Bazán, R. (2011). Evaluación de la calidad del agua, nivel de eutrofización y sus consecuencias en el Embalse Los Molinos (Córdoba). Fac. Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. Master.
- Corral M.; Helmbrecht J.; Rodríguez A.; Avena M.; Rodríguez M.I.; Cossavella A.; Alonso F. (2002). Modelado de parámetros físicos en el Embalse los Molinos, Córdoba, Argentina. *XIX Congreso Argentino del Agua*.
- Corral M.; Rodríguez A.; Oroná C.; Bazán R.; Cossavella A.; Del Olmo S.; Rodríguez M.I.; Larrosa N.; Bonfanti E.; Busso F. (2004). Simulación numérica de procesos de transporte y de calidad del agua en el Embalse los Molinos. *Mecánica Computacional* Vol. XXIII.
- Cossavella, A. (2003). Influencia de efectos antrópicos y naturales en el proceso de eutrofización de las aguas del embalse Los Molinos, Universidad Tecnológica, Córdoba. Master.
- Estrada, V. (2010). Modelamiento y optimización dinámica de procesos de eutrofización. Departamento de Biología. Bahía Blanca, Universidad Nacional del sur. PhD.
- Estrada, V.; Díaz, M.S. (2010). Global sensitivity analysis in the development of first principle-based eutrophication models. *Environmental Modelling & Software* 25(12): 1539-1551.
- Estrada, V., Parodi, E.R.; Díaz, M.S. (2009). Determination of biogeochemical parameters in eutrophication models with simultaneous dynamic optimization approaches. *Computers & Chemical Engineering* 33(10): 1760-1769.
- Estrada, V., Rodriguez Reartes, S.B. Díaz, M.S. (2011). Determination of biorecovery strategies in eutrophic water bodies through the formulation of an optimal control problem based on a 3D ecological model. *Computer Aided Chemical Engineering*. M. C. G. E.N. Pistikopoulos and A. C. Kokossis, Elsevier. Volume 29: 1281-1285.
- gPROMS (2012). *Process Systems Enterprise*, www.psenterprise.com/gproms.
- Shen, J. (2006). Optimal estimation of parameters for a estuarine eutrophication model. *Ecological Modelling* 191(3-4): 521-537.
- Shen, J.; Kuo, A. (1996). Inverse Estimation of Parameters for an Estuarine Eutrophication Model. *Journal of Environmental Engineering* 122(11): 1031-1040.

Zhang, J., Jørgensen, S.E. Mahler, H. (2004). Examination of structurally dynamic eutrophication model. *Ecological Modelling* 173(4): 313-333.

ESTIMACIÓN DINÁMICA DE PARÁMETROS

PARA UN MODELO ECOLÓGICO DEL EMBALSE LOS MOLINOS



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

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

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

¹Planta Piloto de Ingeniería Química (UNS - CONICET). Camino La Carrindanga km. 7 - 8000 Bahía Blanca - Argentina
²ISEA, Instituto Sup de Estudios Ambientales. ³Dpto. Qca. Industrial y Aplicada, Fac. Cs. Exactas, Físicas y Naturales - UNC.
⁴ICTA, Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos. ⁵Aguas Cordobesas S.A.



INTRODUCCIÓN

- Eutrofización: causada por la creciente descarga de nutrientes asociada a las actividades industriales, domésticas y agrícolas (Fuentes Difusas y Puntuales).
- Eutrofización: promueve el crecimiento acelerado y la acumulación del fitoplancton (blooms).
- Algunas especies de cianobacterias presentes en los blooms pueden producir hepato- y neurotoxinas (peligrosas para la salud).
- La aplicación de estrategias de restauración requiere del *modelado sistemático de los procesos de eutrofización* en un marco de optimización dinámica (gPROMS, 2012).

Embalse Los Molinos

31° 43' 30" S y 64° 32' 20" W, 65 km SO de la Ciudad de Córdoba

Características del cuerpo de agua (Bazán, 2011)	
Área de la cuenca (km ²)	978
Superficie (km ²)	21.1
Profundidad máxima (m)	52
Profundidad media (m)	14
Volumen máximo (hm ³)	400
Tiempo de retención (días)	288
Estado Trófico	MESOTRÓFICO
Usos	Agua potable (0.5 millón hab.) Generación de energía Riego Control de crecidas Esparcimiento



OBJETIVOS

- Formulación de un modelo de eutrofización basado en primeros principios para el Embalse Los Molinos considerando los gradientes de las variables de estado a lo largo de la columna de agua (Estrada *et al.* 2009).
- Estimación dinámica de los parámetros del modelo para ajustar a las condiciones ambientales específicas del sitio en estudio - se consideraron datos observados para el cuerpo de agua del año 2007 - (Estrada y Díaz, 2010).

Modelo Ecológico

Balances de Masa:

$$\rho A \frac{dh_i}{dt} = \sum_{j=1}^{iN} Q_{IN_j} - \sum_{j=1}^{iN} Q_{OUT_j} + Q_{rain} - Q_{evap}$$

Capa superior

$$\frac{dC_{Uj}}{dt} = \sum_{k=1}^{iN} \frac{Q_{IN_k}}{V_U} C_{IN_k} - \sum_{m=1}^{iN} \frac{Q_{OUT_m}}{V_U} C_{Uj} + \nu_{Uj} \frac{\partial C_{Uj}}{\partial h_U} (C_{Uj} - C_{Lj}) - \frac{C_{Uj}}{h_U} \frac{dh_U}{dt}$$

Capa inferior

$$\frac{dC_{Lj}}{dt} = \sum_{k=1}^{iN} \frac{Q_{IN_k}}{V_L} C_{Lj} + \nu_{Lj} \frac{\partial C_{Lj}}{\partial h_L} (C_{Uj} - C_{Lj}) - \frac{C_{Lj}}{h_L} \frac{dh_L}{dt}$$

k = Ingresos por tributarios (ríos San Pedro, Los Espinillos, del Medio y Los Reartes)
 m = Salidas para potabilización y río Los Molinos

Fitoplancton:

i = capa superior (U), capa inferior (L); j = Dinofita y Criptofita

$$r_{ij} = R_{ij, growth} - R_{ij, resp} - R_{ij, death} - R_{ij, settling}$$

$$R_{ij, growth} = k_{ij, growth} \cdot I(T) \cdot f(N) \cdot C_{ij}$$

$$f(T) = \frac{1}{1 + \exp(-\frac{T - T_{opt}}{T_{width}})}$$

$$f(N) = \frac{C_{ij}}{C_{ij} + K_{ij}}$$

$$R_{ij, death} = k_{ij, death} \cdot C_{ij}$$

$$R_{ij, resp} = k_{ij, resp} \cdot C_{ij}$$

$$R_{ij, settling} = k_{ij, settling} \cdot C_{ij}$$

Nutrientes:

$$r_{i, P} = -R_{i, P, uptake} + R_{i, P, death} + R_{i, P, miner}$$

$$r_{i, PO_4} = -R_{i, PO_4, uptake} + R_{i, PO_4, death} + R_{i, PO_4, miner} + R_{i, PO_4, sed}$$

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

$$R_{i, P, uptake} = \sum_j (k_{ij, P, uptake} \cdot C_{ij})$$

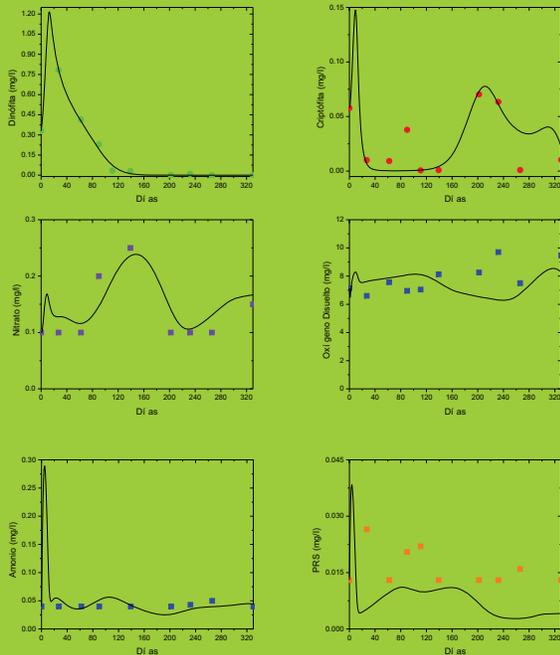
$$R_{i, PO_4, uptake} = \sum_j (k_{ij, PO_4, uptake} \cdot C_{ij})$$

$$R_{i, DP, death} = \sum_j (k_{ij, DP, death} \cdot C_{ij} \cdot (U - f_{sed}))$$

$$R_{i, DP, miner} = k_{i, DP, miner} \cdot \frac{C_{i, DP}}{K_{i, DP} + C_{i, DP}}$$

$$R_{i, DP, settling} = \frac{k_{i, DP, settling} \cdot C_{i, DP} \cdot (U - f_{sed})}{k_{i, DP, settling} + C_{i, DP}}$$

RESULTADOS



Datos experimentales (marcadores) y perfiles simulados (líneas) con los parámetros estimados para el modelo formulado.

Hipótesis simplificatorias:

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



El problema de estimación dinámica de parámetros es:

$$\min \left[\Phi = \frac{1}{2} \sum_{t=1}^{M_t} \sum_{j=1}^{M_j} (C_{jk}^M - C_{jk}^E) \cdot V^{-1} \cdot (C_{jk}^M - C_{jk}^E) \right]$$

s.t. Modelo de eutrofización EDA

$$C(0) = c^0$$

$$C_i \leq C \leq C_u$$

$$p_i \leq p \leq p_u$$

Parámetros óptimos obtenidos para el modelo de calidad de agua formulado.		
Símbolo	Descripción	Valor
$k_{i, P, uptake}$	Tasa máxima de crecimiento de criptofitas (d ⁻¹)	0.833528
$k_{i, PO_4, uptake}$	Tasa máxima de crecimiento de dinofitas (d ⁻¹)	1.0851
$k_{i, DP}$	Tasa de mineralización de fósforo orgánico (d ⁻¹)	0.099
$K_{i, P}$	Constante a la mitad de sat. para limitación por O ₂ de la nitrificación (mg.l ⁻¹)	0.148665
K_{i, PO_4}	Constante a la mitad de sat para captación de P por criptofitas (mg.P.l ⁻¹)	0.0170722
$K_{i, DP}$	Constante a la mitad de sat. para captación de P por dinofitas (mg.P.l ⁻¹)	0.00447164
$I_{opt, DP}$	Intensidad de luz óptima de crecimiento de criptofitas (ly.d ⁻¹)	50
$I_{opt, DP}$	Intensidad de luz óptima de crecimiento de dinofitas (ly.d ⁻¹)	197.3
$T_{opt, DP}$	Temperatura óptima de crecimiento de criptofita (°C)	33
$T_{opt, DP}$	Temperatura óptima de crecimiento de dinofita (°C)	18

Actualmente, se está trabajando en la validación del modelo con un set independiente de datos experimentales. La validación es un paso previo al empleo de este modelo como herramienta para la determinación de estrategias de manejo del recurso hídrico.

CONCLUSIONES

- Se formuló un modelo de calidad de agua para el Embalse Los Molinos, y se resolvió un problema de estimación dinámica para establecer los parámetros óptimos del modelo con una estrategia de parametrización del vector de variables de control en gPROMS (2012).
- Se ajustaron los parámetros cinéticos del modelo en base a los datos experimentales obtenidos mensualmente para el embalse Los Molinos durante el año 2007.
- Los resultados presentados muestran que los parámetros calculados permiten una representación apropiada de la dinámica del cuerpo de agua.

REFERENCIAS

Bazán, R. (2011). Evaluación de la calidad del agua, nivel de eutrofización y sus consecuencias en el Embalse Los Molinos (Córdoba).
 Fac. Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba. Master.
 Estrada, V.; Díaz, M.S. (2010). Global sensitivity analysis in the development of first principle-based eutrophication models. *Environm. Model. & Software* 25(12): 1539-1551.
 Estrada, V., Parodi, E.R.; Díaz, M.S. (2009). Determination of biogeochemical parameters in eutrophication models with simultaneous dynamic optimization approaches. *Computers & Chem. Eng.* 33(10): 1760-1769.
 gPROMS (2012). *Process Systems Enterprise*, www.pseenterprise.com/gproms.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el soporte financiero de CONICET, ANPCYT, Universidad Nacional del Sur y Universidad Nacional de Córdoba.