



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

*Modelos de remoción y transformación de
compuestos nitrogenados en humedales
artificiales de flujo subsuperficial: panorama actual
y propuesta para generar nuevos modelos*

TRABAJO MONOGRÁFICO DE ACTUALIZACIÓN

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

INGENIERA QUÍMICA

PRESENTA

Laura Elena Rosado Lozano



MÉXICO, D.F.

2010



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Jurado asginado:

Presidente: Leticia Ma. González Arredondo

Vocal: Víctor Manuel Luna Pabello

Secretario: Alfonso Durán Moreno

1er. Suplente: Dulce Merari Cid León

2° Suplente: Sergio Adrián García González

Sitio donde se desarrolló el tema:

El presente trabajo fue elaborado en el Laboratorio de Microbiología Experimental del Departamento de Biología de la Facultad de Química de la UNAM

Asesor del tema

Sustentante

Dr. Víctor Manuel Luna Pabello

Laura Elena Rosado Lozano

RECONOCIMIENTOS

Se hace patente el apoyo recibido por parte del proyecto DGAPA PAPIIT IN-107209 “Desarrollo de un humedal artificial de alta eficiencia para remoción de contaminantes orgánicos y microorganismos patógenos”, así como del PAIP FQ-VMLP 6190-14 2009 y 2010

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Víctor Manuel Luna Pabello por la generosidad con la que me recibió en su equipo de trabajo, y la disposición que siempre mostró para enseñarme, asesorarme, y guiarme a lo largo de este complejo proceso.

A Héctor Faustino Ramírez Carrillo, quien fungió como asesor técnico, por el apoyo, la asesoría y los consejos que me permitieron mejorar la calidad tanto de la investigación desarrollada, como de la elaboración del trabajo escrito.

A Sergio Aburto Castañeda también por los consejos y la asesoría que me brindó durante mi estancia en el laboratorio y que permitieron desarrollar un mejor trabajo.

A todos mis compañeros del Laboratorio de Microbiología Experimental, con quienes tuve la fortuna de convivir, de recibir gestos de amistad y de aprender muchas cosas útiles para mi trabajo de titulación.

A mi familia, a la que amo profundamente y de quien obtengo la fortaleza con la que vivo a diario. Ustedes son mi más grande inspiración para emprender grandes proyectos. Gracias por el amor y el apoyo que siempre me han dado.

A Manuel Alejandro Cabrera Santacruz, cuyo amor y compañía han sido una experiencia hermosa y un gran soporte para enfrentar los momentos más tristes de mi vida.

Quisiera expresar mi más profunda gratitud a todas aquellas personas que nos brindaron, a mi familia y a mí, su cariño y apoyo en este año tan difícil y doloroso. A todos ellos debo, de alguna manera, el haber podido terminar este trabajo.

*La culminación de esta etapa de mi vida está
dedicada con todo mi amor a mi madre Laura Ruth
Lozano Treviño (1954-2010) y a mi padre Daffny
Jesús Rosado Moreno, mis más grandes ejemplos
de virtud y sabiduría*

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN	11
2. OBJETIVOS	13
2.1. Objetivo general	13
2.2. Objetivos particulares	13
3. METODOLOGÍA DE TRABAJO	14
4. MARCO TEÓRICO	15
4.1. Humedales artificiales	15
4.1.1. Definición y clasificación de humedales artificiales	15
4.1.2. Componentes de un humedal artificial	16
4.1.3. Mecanismos físicos y químicos de remoción de contaminantes en HA	20
5. EL NITRÓGENO	22
5.1. Formas de nitrógeno contenidas en aguas residuales	23
5.2. Procesos de biodegradación y transformación química de compuestos nitrogenados	25
5.3. Mecanismos fisicoquímicos de remoción de compuestos nitrogenados	28
5.4. Efectos de los componentes de un humedal artificial sobre los procesos de remoción y transformación de nitrógeno	31
5.5. Factores que promueven las reacciones de transformación de compuestos nitrogenados dentro de humedales artificiales	34
5.5.1. Parámetros físicos y químicos que intervienen en la transformación de compuestos nitrogenados	35
5.5.2. Criterios de diseño y variables de operación que intervienen en la remoción de contaminantes en HA	36
6. MODELOS MATEMÁTICOS	41
6.1. Breve descripción de los modelos matemáticos	41
6.2. Modelos matemáticos que simulan el funcionamiento de un HA	42
6.3. Clasificación de los modelos que simulan la transformación	

de contaminantes en HAFSS	43
7. ANÁLISIS DE LOS MODELOS EXISTENTES Y PROPUESTA DE METODOLOGÍA PARA LA ELABORACIÓN DE NUEVOS MODELOS MATEMÁTICOS QUE SIMULEN EL FLUJO DE NITRÓGENO EN HAFSS	48
7.1. Análisis y discusión de los modelos matemáticos existentes y remoción de compuestos nitrogenados dentro de humedales artificiales	48
7.1.1. Objetivos de los modelos propuestos	48
7.1.2. Régimen de flujo de HA simulados matemáticamente	51
7.1.3. Ecuaciones de los modelos matemáticos revisados	56
7.1.4. Discusión de los modelos revisados	63
7.2. Recomendación para generar nuevos modelos que simulen el ciclo del nitrógeno en HAFSS	65
8. CONCLUSIONES	69
9. BIBLIOGRAFÍA	71

Índice de tablas

Tabla 1. Clasificación de microorganismos por su fuente de energía y carbono	18
Tabla 2. Permeabilidad y conductividad hidráulica de diferentes materiales	20
Tabla 3. Mecanismos de remoción de los principales contaminantes encontrados en aguas residuales de tipo doméstico	21
Tabla 4. Fijación de nitrógeno en las especies más utilizadas en HA.....	31
Tabla 5. Condiciones óptimas para la sobrevivencia de diferentes microorganismos	33
Tabla 6. Ecuaciones de balance de masa para reactores ideales	45
Tabla 7. Objetivos, descripción de modelos y alcances propuestos por cada autor ...	49
Tabla 8. Características de los humedales artificiales utilizados para plantear los modelos.....	53
Tabla 9. Mecanismos de transformación de nitrógeno utilizados en las investigaciones.....	54
Tabla 10. Tasas de transformación de nitrógeno (gN/m ² d) para Mayo y Bigambo (2005).....	56
Tabla 11. Ecuaciones generales de los modelos matemáticos estudiados	57
Tabla 12. Porcentaje de remoción de NT para Wang <i>et al.</i> (2009).....	63

Índice de Figuras

Figura 1. Síntesis de la metodología de trabajo	14
Figura 2. Clasificación de los HA (Kadlec y Wallace, 2009).....	15
Figura 3. Ciclo biogeoquímico del nitrógeno con alteraciones antropogénicas.....	22
Figura 4. Procesos de transformación de compuestos nitrogenados en HA según Vymazal (2007).....	24
Figura 5. Propuesta de clasificación de modelos (Wainwright y Mulligan, 2004).....	41
Figura 6. Representación de un humedal artificial, mediante un modelo empírico simple.....	42
Figura 7. Representación de un humedal artificial mediante un modelo complejo (Mayo y Bigambo, 2005).....	42

Figura 8. Propuesta de algoritmo para generar modelos matemáticos que simulan el flujo del nitrógeno en HAFSS	65
---	----

Índice de ecuaciones

Ecuación 1. Desaminación oxidativa	25
Ecuación 2. Desaminación reductiva	25
Ecuación 3. Nitrificación.....	26
Ecuación 4. Nitrificación autótrofa.....	26
Ecuación 5. Desnitrificación.....	27
Ecuación 6. Fijación de nitrógeno	27
Ecuación 7. ANAMMOX con nitrito como aceptor de electrones	28
Ecuación 8. ANAMMOX con nitrato como aceptor de electrones	28
Ecuación 9. Volatilización del amonio	29
Ecuación 10. Adsorción del amonio.....	29
Ecuación 11. Tiempo hidráulico de residencia.....	39
Ecuación 12. Regresión multivariable	44
Ecuación 13. Regresión multivariable	44
Ecuación 14. Reacción cinética de primer orden respecto a la RCH.....	45
Ecuación 15. Reacción cinética de primer orden respecto al TRH	45

RESUMEN

Los humedales artificiales son sistemas para el tratamiento de aguas residuales que han sido diseñados y construidos para imitar la actividad depuradora de los humedales naturales, en los que intervienen procesos biológicos, físicos y químicos para la remoción de contaminantes.

El nitrógeno es un elemento considerarlo como el segundo contaminante más importante de las aguas residuales domésticas, dada las altas concentraciones que se puede encontrar de esta sustancia, así como la insuficiente remoción lograda a través de los métodos convencionales de tratamiento. Los humedales artificiales ofrecen una alternativa para incrementar la tasa de remoción de este contaminante, pero su eficiencia se ha visto limitada por un conocimiento insuficiente de las rutas de transformación de compuestos nitrogenados dentro de estos sistemas.

Los modelos que simulan el funcionamiento de humedales artificiales han evolucionado de reglas empíricas y modelos sencillos, al planteamiento de modelos más detallados que incluyen un mayor número de mecanismos involucrados en la remoción y transformación de contaminantes contenidos en aguas residuales. A través de estos modelos es posible profundizar en el conocimiento de los procesos de transformación, proponer ecuaciones de diseño y criterios de operación que incrementen las tasas de remoción de contaminantes. Sin embargo, la mayoría de los modelos desarrollados en los últimos años se centra en el estudio de los procesos de transformación de materia orgánica y pocos se han enfocado en poder representar el ciclo de nitrógeno dentro de estos sistemas.

Bajo las consideraciones anteriores, este trabajo: 1) Consolidó una semblanza de las investigaciones desarrolladas en los últimos cinco años, enfocadas en desarrollar modelos que simulan la remoción y transformación de compuestos nitrogenados en humedales artificiales de flujo subsuperficial. 2) Se definió una metodología para clasificar la información, detectar características comunes y particularidades de cada trabajo, así como los retos aún por superar en esta materia. 3) Se desarrolló una propuesta que busca facilitar el planteamiento, validación y uso de nuevos modelos conceptuales del flujo del nitrógeno en HA, que posteriormente puedan ser utilizados para profundizar en el conocimiento de las rutas de remoción y transformación de nitrógeno, así como en la construcción de humedales artificiales de mayor eficiencia.

1. INTRODUCCIÓN

El nitrógeno es uno de los contaminantes más comunes de las aguas residuales domésticas, y los métodos convencionales de tratamiento registran una insuficiente remoción de esta sustancia. Este contaminante clasificado como nutriente, está asociado al fenómeno de eutrofización de los cuerpos receptores naturales de agua y tiene como consecuencia un incremento prolífico de algas y cianobacterias provocando el incremento en la turbidez del agua; el surgimiento de condiciones anóxicas; la generación de malos olores; y la pérdida de biodiversidad (Scholten *et al.*, 2005). La comprensión de las diferentes rutas de remoción de nitrógeno de las aguas contaminadas es necesaria para modificar la operación de los humedales artificiales con el fin de favorecer aquellos mecanismos que permitan incrementar las tasas de remoción y así mejorar la calidad de los efluentes.

Los modelos que simulan la operación de humedales artificiales han evolucionado de reglas empíricas y modelos sencillos, al desarrollo de modelos complejos que incluyen una gran variedad de mecanismos involucrados en la remoción y transformación de los contaminantes contenidos en aguas residuales.

Uno de los propósitos que tiene el desarrollo de modelos de simulación es, justamente, la optimización en el diseño y operación de estos sistemas. En este sentido la construcción de modelos de simulación implica un desarrollo conceptual previo sobre los mecanismos que intervienen en la remoción y transformación de compuestos nitrogenados y, una vez que se ha esclarecido este ciclo, el desarrollo de las expresiones matemáticas de estos procesos.

Los últimos modelos propuestos y desarrollados recorren un amplio gradiente de complejidad: desde ecuaciones simples que conciben al HA como cajas negras que remueven nitrógeno, hasta aquellos que incluyen una gran cantidad de parámetros que pueden llegar a ser difíciles de estimar. En cualquiera de los casos, los modelos conceptuales que sustentan los modelos matemáticos no siempre se adecuan al modelo teórico que describe el ciclo del nitrógeno en HA. Advertir las consideraciones que sustentan cada modelo y evaluar las posibilidades de su aplicación, tomando en cuenta las condiciones para las que fueron diseñados, es una tarea necesaria para orientar las decisiones sobre la generación de nuevos

modelos que tengan como propósito el incremento en la eficiencia de los sistemas (Bunwong *et al.*, 2009; Sklarz *et al.*, 2010).

Bajo las consideraciones anteriores, este trabajo procura reunir y analizar desde un punto de vista descriptivo, la información sobre los modelos de humedales artificiales desarrollados hasta el momento, que simulan la remoción y transformación de compuestos nitrogenados en humedales artificiales de flujo subsuperficial, consolidando la información en matrices para lograr los siguientes propósitos:

- Esclarecer el panorama de los avances generados hasta el momento y los retos aún por superar en materia de modelos de transformación de nitrógeno en HA
- Caracterizar los criterios de diseño y operación más utilizados en estos trabajos
- Clasificar el tipo de modelos desarrollados de acuerdo con el objetivo para el cual fueron diseñados
- Orientar las decisiones que permitan innovar y/o mejorar la metodología para el desarrollo de los modelos

Con ello, se procura construir una referencia básica para orientar el desarrollo de nuevos modelos matemáticos, útiles para el diseño de HA que registren una alta eficiencia en la remoción de nitrógeno.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo general

Analizar la información en materia de modelos que simulan el flujo de nitrógeno en humedales artificiales subsuperficiales, y proponer una metodología para la elaboración de nuevos modelos.

2.2. Objetivos particulares

- Describir el ciclo de transformación del nitrógeno dentro de un HAFSS
- Clasificar de acuerdo con su complejidad y aplicación, los modelos matemáticos que simulan el flujo de nitrógeno dentro de humedales artificiales
- Identificar las principales variables y criterios que se utilizan en el modelado de las rutas de transformación y remoción de nitrógeno dentro de los HAFSS
- Resaltar los avances y retos por superar en materia del desarrollo de modelos matemáticos que simulan la transformación y remoción de nitrógeno en HA
- Proponer una metodología para la generación de modelos conceptuales que puedan ser utilizados para proponer modelos matemáticos que simulen el flujo de nitrógeno en HAFSS

3. METODOLOGÍA DE TRABAJO

Utilizando un método inductivo de investigación se partió de los conocimientos más generales en materia de humedales artificiales y remoción de contaminantes de aguas residuales, hasta llegar a los modelos de remoción y transformación de las diferentes formas de nitrógeno contenidas en aguas residuales de uso doméstico. Una vez aclarado el panorama de la situación actual en el desarrollo de estos modelos matemáticos, se generaron matrices informativas que permitieron integrar y sistematizar información diversa para analizar y comparar los modelos de transformación de compuestos nitrogenados reportados en la literatura en los últimos cinco años, tomando en cuenta los alcances, las limitaciones y los resultados obtenidos en cada uno. La metodología aplicada se representa en la siguiente figura.

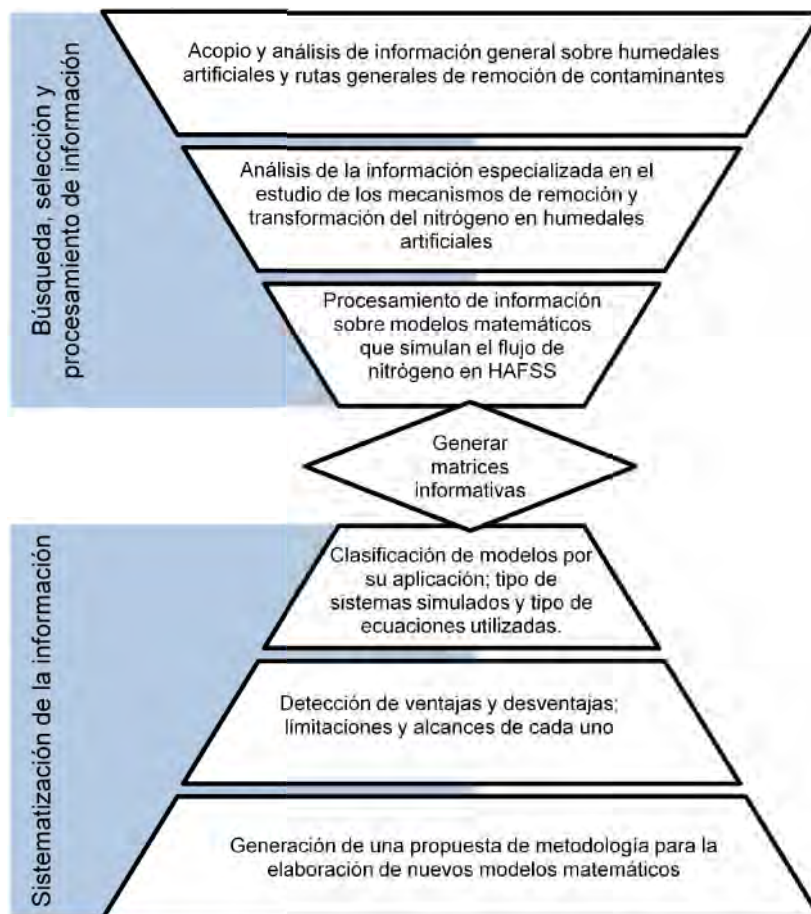


Figura 1. Síntesis de la metodología de trabajo

4. MARCO TEÓRICO

4.1. Humedales Artificiales

4.1.1. Definición y clasificación de humedales artificiales

Los humedales artificiales (HA) están definidos como sistemas especialmente diseñados y construidos para que los mecanismos físicos, químicos y biológicos de depuración de contaminantes que se llevan a cabo en humedales naturales, ocurran de manera más controlada y eficiente (Brix, 1996; Vymazal *et al.*, 2008).

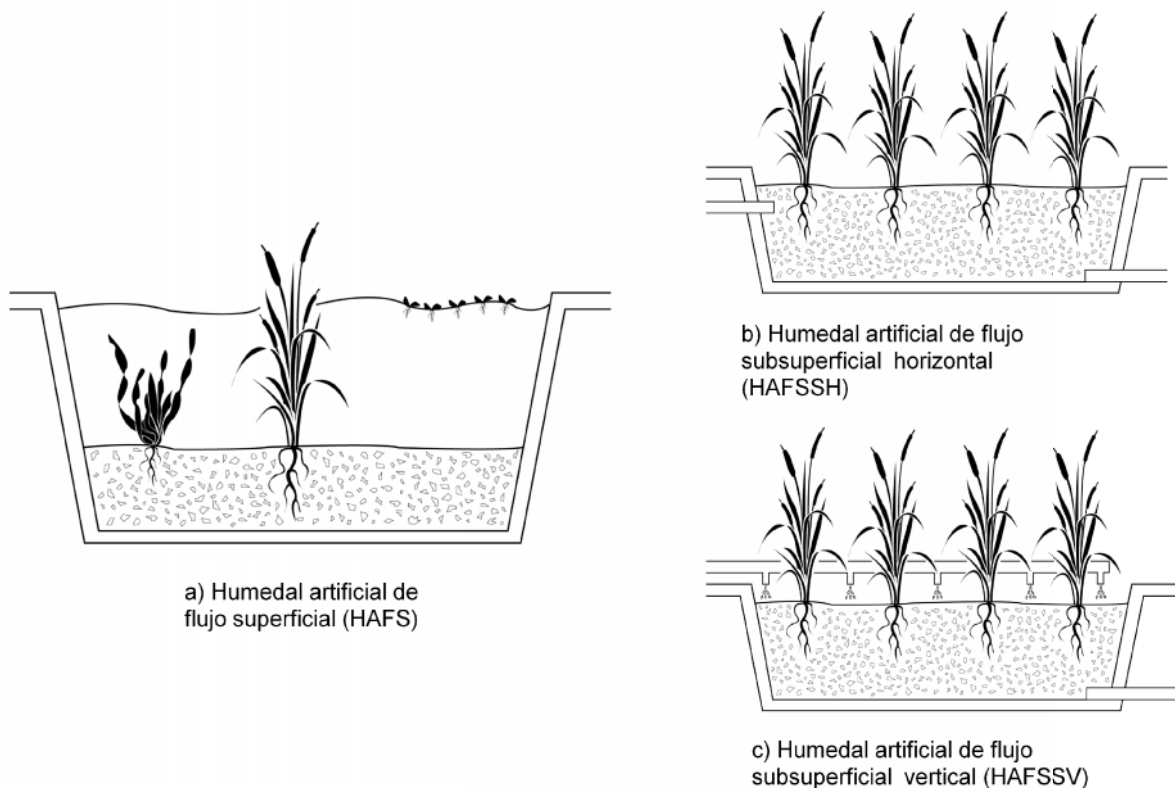


Figura 2. Clasificación de los HA (Kadlec y Wallace, 2009)

Hay dos tipos principales de HA: los de flujo superficial (HAFS) que son sistemas con un denso componente vegetal y una superficie de agua expuesta, con una profundidad de 0.4 m; y los de flujo subsuperficial (HAFSS) en los cuáles la

superficie del agua no es visible y se encuentra por debajo del sustrato (Kadlec *et al.*, 2000; Haberl *et al.*, 2003; Langergraber *et al.*, 2009). A su vez los HAFSS, de acuerdo con la dirección del flujo de agua a través del lecho, se dividen en humedales artificiales de flujo vertical (HAFV) y humedales artificiales de flujo horizontal (HAFH). En la Figura 2 que a continuación se muestra, presenta la clasificación de humedales artificiales.

Los HAFSS ofrecen una mayor superficie de contacto entre el agua, los microorganismos y el material de empaque, en comparación con los humedales de flujo superficial. Esto reduce el área específica de HA necesaria para tratar la misma calidad y volumen del influente (Langergraber *et al.*, 2009).

Por otro lado, la literatura reporta que por su régimen de flujo, los ambientes anóxicas-anaerobios se favorecen en los humedales artificiales de flujo horizontal (HAFH), mientras que el transporte de oxígeno se favorece en los humedales artificiales de flujo vertical (HAFV). Estas condiciones aerobias son las que promueven las reacciones de nitrificación y biodegradación de materia orgánica (Maltais-Landry *et al.*, 2009; Tam *et al.*, 2009; Zhang *et al.*, 2009).

4.1.2. Componentes de un humedal artificial

El componente vegetal

Los organismos macrófitos crecen de manera natural en humedales artificiales y se ha documentado la importancia que tienen dentro de estos sistemas, ya que su rol dentro de ellos están asociados a la asimilación y acumulación de nutrientes en los tejidos; al transporte de oxígeno del tallo a la raíz incrementando los valores de oxígeno disuelto dentro del sistema; al aporte de formas reducidas de carbono para el desarrollo de especies de microorganismos heterótrofos; y a la disposición de una mayor área superficial para la formación de una biopelícula en la zona del rizoma (Brisson *et al.*, 2009; Kadlec *et al.*, 2009; Brix y Arias, 2005).

Algunas características que deben reunir las especies de los organismos macrófitos seleccionados para incluirlas en un humedal artificial son las siguientes (Brisson y Chazarenc, 2009; Maltais-Landry *et al.*, 2009; Vymazal *et al.*, 2008):

- Rápida tasa de crecimiento
- Fácil propagación
- Generación de gran cantidad de biomasa
- Buen desarrollo de órganos subterráneos (rizoma)
- Tolerancia a las condiciones presentes en humedales artificiales, como altos índices de contaminantes orgánicos y nutrientes

Si las especies vegetales son de rápido crecimiento, al realizar las rutinas de mantenimiento de los humedales, es posible aprovechar la biomasa generada mediante la poda que permite producir material de construcción de cercas, o incluso de producción de biocombustibles (Vymazal, 2008).

Las especies más comunes en humedales artificiales de acuerdo a Brisson y Chazarenc (2009) son *Typha latifolia*, *Phragmites australis*, *Schoenoplectus validus* y *Typha angustifolia*. Sin embargo, se menciona que las condiciones asociadas a la ubicación geográfica de los humedales (temperatura, humedad, disponibilidad de luz solar, entre otras), así como la calidad del influente que se desea tratar, son factores que impiden generalizar la efectividad depuradora de contaminantes que tienen estas especies vegetales.

Lo anterior aunado a la posible contaminación biológica que puede representar traer especies no características de México para usarse en humedales artificiales, obliga a desarrollar investigaciones sobre la capacidad depuradora de especies nativas o endémicas de nuestro país. Al respecto cabe destacar el caso que menciona, Vymazal *et al.* (2008) sobre la *Phragmites australis*, ya que a pesar de ser una especie vegetal ampliamente utilizada en humedales artificiales de Europa, es considerada una especie vegetal invasiva tratada como plaga, en Norteamérica, Nueva Zelanda y algunas regiones de Australia.

Los microorganismos

Los hongos y las bacterias son dos grupos de microorganismos sumamente importantes en el funcionamiento de un humedal artificial, en la medida que son los

responsables de la asimilación, transformación y reciclaje de varios constituyentes químicos de las aguas residuales (Kadlec y Wallace, 2009), emulando al mismo tiempo, la actividad de los humedales naturales (Truu *et al.*, 2009). Gracias a su actividad metabólica, remueven la mayor cantidad de compuestos orgánicos (Ramírez, 2001) que ocurre tanto a partir de la descomposición de sólidos suspendidos y del consumo de especies químicas disueltas como de la actividad simbiótica con otros organismos. Dentro de estos sistemas existen comunidades autóctonas de microorganismos, con capacidades adaptativas que les permiten sobrevivir y crecer bajo las condiciones usuales de los humedales artificiales; también existen comunidades externas (incluyendo microorganismos patógenos) que suelen entrar con las aguas residuales, pero frecuentemente no sobreviven a las nuevas condiciones presentes en los HA (Truu *et al.*, 2009).

En relación con la actividad bioquímica de los microorganismos, la principal fuente de energía proviene de la oxidación de compuestos del carbono, tanto del orgánico (que se realiza en los microorganismos heterótrofos) como del presente en el aire, en forma de CO₂ (en los microorganismos autótrofos). Así mismo, la fuente de energía para llevar a cabo esas reacciones metabólicas puede ser la luz solar (en el caso de los microorganismos fotótrofos), o las reacciones de óxido-reducción de compuestos inorgánicos como amoníaco, nitratos y nitritos (en los microorganismos quimiótrofos). En la Tabla 1 se resume la clasificación de microorganismos (Ramírez, 2001).

Tabla 1. Clasificación de microorganismos por su fuente de energía y carbono (Ramírez, 2001)

Clasificación	Fuentes de energías	Fuentes de carbono
Autótrofos		
Fotoautótrofos	Luz solar	CO ₂
Quimiautótrofos	Reacciones inorgánicas de óxido-reducción	CO ₂
Heterótrofos		
Fotoheterótrofos	Luz solar	Carbono orgánico
Quimiheterótrofos	Reacciones inorgánicas de óxido-reducción	Carbono orgánico

Las condiciones dentro del sistema tales como: el tipo de material de empaque, las condiciones hidráulicas, la presencia o ausencia de plantas, las características del influente a tratar, así como las condiciones ambientales bajo las que opera el humedal artificial, determinan en gran medida la dirección y magnitud de los procesos microbianos dentro de los HA.

El medio de Soporte

El medio de soporte o lecho filtrante tiene varias funciones, como son las siguientes: sirve como sustento para las plantas; permite la proliferación de microorganismos depuradores actuando como superficie en la que se puede formar biopelícula; promueve la retención de partículas sólidas suspendidas; y facilita la remoción de metales pesados, nitrógeno y fósforo a través de mecanismos de adsorción, absorción y precipitación (Ramírez, 1998).

Bajo las consideraciones precedentes, según Cooper (2005), las características más importantes del medio de soporte que se deben tomar en cuenta al diseñar una HAFV son los siguientes:

- Material de empaçado: que cuente con una permeabilidad y una conductividad hidráulica tal que permita el paso del agua residual a lo largo de toda la cama de sustrato y que a su vez, permita una retención de líquido que permita un adecuado contacto con las bacterias adheridas a su superficie, para favorecer una mayor depuración de los contaminantes contenidos en el influente (Tabla 2).
- Superficie de contacto: que sea suficiente para favorecer el transporte de oxígeno a lo largo de la columna empacada y que permita la formación de biopelícula.

Para ilustrar lo anterior, en la siguiente Tabla se presentan los datos relativos a permeabilidad y conductividad de cinco materiales de empaque.

Tabla 2. Permeabilidad y conductividad hidráulica de diferentes materiales (Ramírez, 2001)

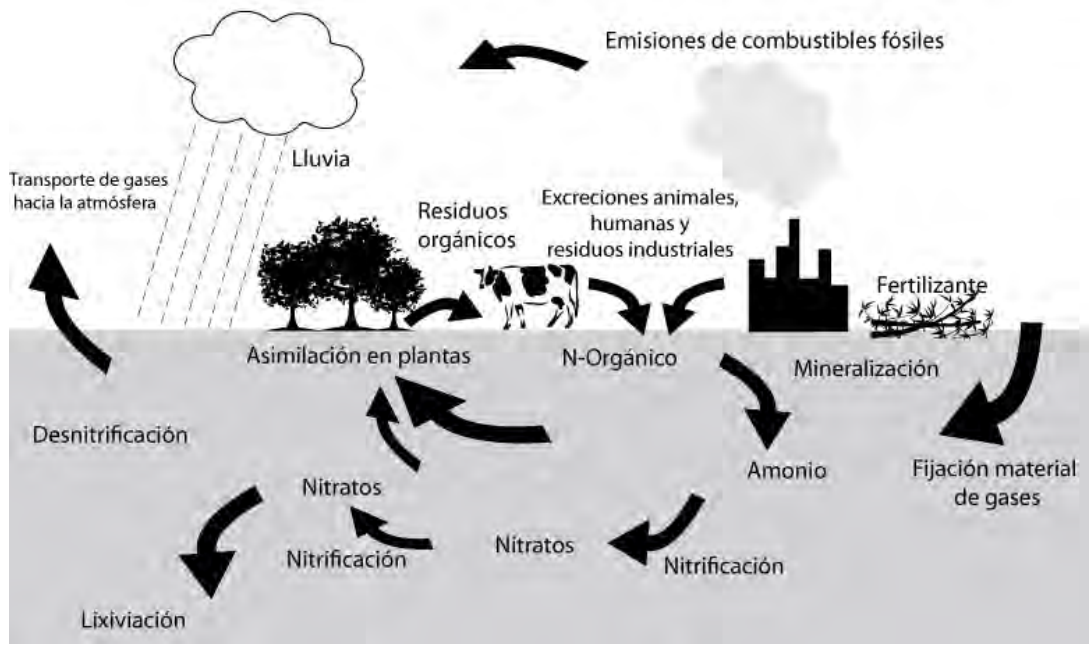
Tipo de material	Permeabilidad	Conductividad hidráulica ($m^3m^{-2}s^{-1}$)
Gravilla granular fina	Alta	$1.00 \times 10^{-4} - 1.00$
Arena granular fina	Pobre	$1.00 \times 10^{-8} - 1.00 \times 10^{-3}$
Caliza	Pobre	$1.00 \times 10^{-5} - 1.00 \times 10^{-3}$
Arenilla	Buena	$1.00 \times 10^{-9} - 1.00 \times 10^{-5}$
Cieno	Buena	$1.00 \times 10^{-10} - 1.00 \times 10^{-6}$

4.1.3. Mecanismos físicos y químicos de remoción de contaminantes en HA

La remoción de contaminantes de las aguas que entran a un humedal artificial se lleva a cabo a través de una combinación de procesos biológicos, físicos y químicos que ocurren entre los constituyentes principales de estos sistemas (De Feo *et al.*, 2005). Los procesos físicos son aquellos en los que no existe transformación de la materia, como es el caso de la sedimentación, la filtración, la adsorción al sustrato y la precipitación. Los procesos químicos son aquellos en los que se llevan a cabo reacciones que provocan la transformación de la materia en otros compuestos, como por ejemplo la volatilización amoniacal, el intercambio iónico, la oxidación de compuestos, la complejación, entre otros. Por último, los procesos biológicos son aquellos en los que interviene un ser vivo en la transformación de alguna sustancia; tal es el caso de la degradación aeróbica microbiana, la degradación anaeróbica microbiana, la fijación en el tejido vegetal, la nitrificación, la desnitrificación, entre otros. Estos tres tipos de procesos se llevan a cabo dentro de un HA y la magnitud con la que estos ocurren está estrechamente ligada a la concentración del agua residual, a los componentes del humedal artificial y a las condiciones, tanto ambientales como de operación, bajo la que éste sistema funciona. En la Tabla 3 se resumen los mecanismos que intervienen en la depuración de contaminantes dentro de HA, dependiendo del tipo de contaminante que se desee tratar.

Tabla 3. Mecanismos de remoción de los principales contaminantes encontrados en aguas residuales de tipo doméstico (Hiley, 1995)

Contaminante	Mecanismo de remoción
Sólidos suspendidos	Sedimentación Filtración
Compuestos orgánicos solubles	Degradación aeróbica microbiana Degradación anaeróbica microbiana
Nitrógeno	Amonificación/nitrificación Desnitrificación Fijación en tejido vegetal Absorción del sustrato Volatilización amoniacal
Fósforo	Adsorción al sustrato Fijación en tejido vegetal
Metales	Adsorción e intercambio iónico Complejación Precipitación Fijación en tejido vegetal Oxidación/reducción microbiana
Patógenos	Filtración Muerte natural Predación Secreción de antibióticos a través de las raíces



5.1. Formas de nitrógeno contenidas en aguas residuales

Dentro de un HAFV que trata aguas residuales domésticas, las especies de nitrógeno inorgánico más comunes son: el amonio (NH_4^+), los nitritos (NO_2^-), los nitratos (NO_3^-), el óxido nitroso (NO_2^-) y el nitrógeno elemental (N_2). Todos estos compuestos están estrechamente ligados por el ciclo biogeoquímico del nitrógeno en el que intervienen múltiples transformaciones bióticas y abióticas que involucran siete estados de valencia (de +5 a -3), a través de las cuales hay una constante y compleja transformación de unos compuestos para formar los otros (Lee *et al.*, 2009; Vymazal *et al.*, 2007; Kadlec *et al.*, 2009).

Si bien cada una de las rutas de transformación de las especies de nitrógeno se conocen por separado, aún no se han cuantificado adecuadamente como un sistema integrado dentro de los humedales artificiales (Kadlec *et al.*, 2009). Diversos autores proponen balances de masa que van desde un esquemas simples (que deja en incógnita los mecanismos a través de los cuales el nitrógeno es removido) hasta complejos diagramas que incluyen las múltiples entradas y salidas de las diferentes formas de nitrógeno dentro de un humedal artificial.

Los procesos de remoción de contaminantes en humedales artificiales son complejos y dinámicos, con una gran cantidad de variables asociadas. Es muy importante comprender los procesos químicos a través de los cuales se transforman las diferentes especies de nitrógeno, por cuanto, a través de la modificación de las condiciones de operación del sistema pueden ser favorecidas unas sobre las otras. En el la Figura 4 se pueden apreciar cómo es que los diferentes compuestos nitrogenados se transportan y se transforman dentro de los HA.

También es importante hacer notar que a pesar de las múltiples transformaciones que las especies nitrogenadas sufren dentro de un humedal artificial a través de los diferentes mecanismos que en él ocurren y que serán descritos a continuación- los mecanismos que realmente remueven nitrógeno del agua son pocos: la desnitrificación, la volatilización del amonio, la asimilación de nitrógeno en el tejido vegetal, la sedimentación de la materia orgánica muerta y la adsorción del amonio al

sustrato. Lo anterior obliga a realizar un balance de masa de nitrógeno total para evaluar la remoción real de este contaminante del agua residual.

En el caso de la cuantificación del cambio en la concentración de diferentes especies de nitrógeno a la entrada y salida del HA, se pueden obtener indicadores sobre el predominio de algunos mecanismos de transformación dentro del sistema.

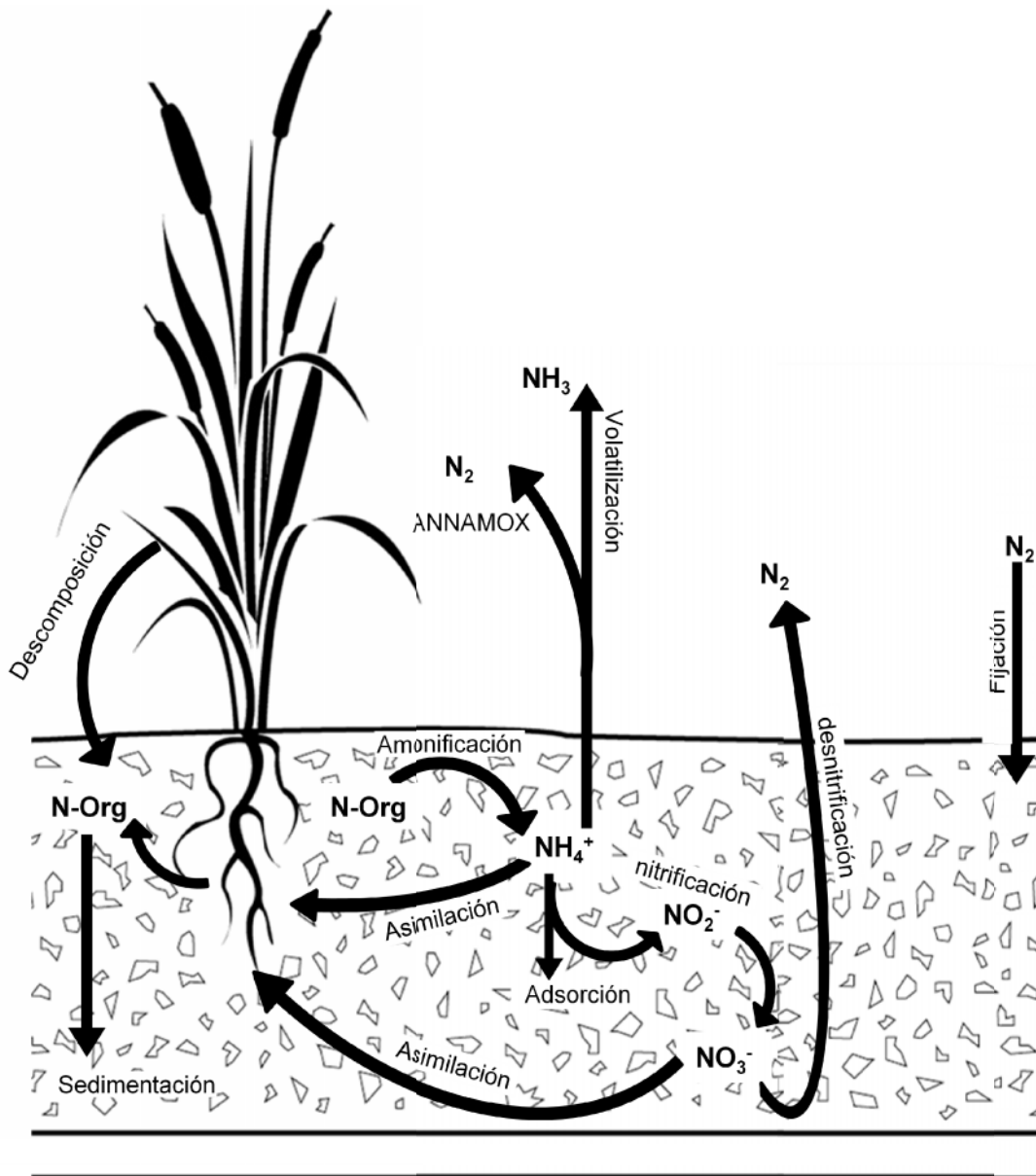


Figura 4. Procesos de transformación de compuestos nitrogenados en HA según Vymazal (2007)

5.2. Procesos de biodegradación y transformación química de compuestos nitrogenados

Amonificación

Este proceso biológico también conocido como mineralización consiste en la conversión de nitrógeno orgánico (nitrógeno Kjeldal) en amonio. Por lo general, dentro de humedales artificiales, la conversión de nitrógeno orgánico a amonio es cercana al 100% y hay dos mecanismos principales a través de los cuales se lleva a cabo esta transformación: la desaminación oxidativa (Ec. 2) y la desaminación reductiva (Ec. 3) (Lee *et al.*, 2009; Vymazal, 2007).

Ecuación 1. Desaminación oxidativa



Ecuación 2. Desaminación reductiva

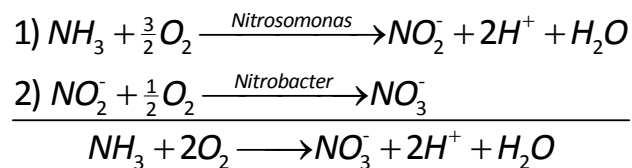


En general, la amonificación es una reacción rápida con tasas de transformación de nitrógeno orgánico a amonio que van de 0.004- 0.53 g N m⁻²d⁻¹.

Nitrificación

La nitrificación del amonio es el principal mecanismo a través del cual es posible reducir la concentración de esta especie en un humedal artificial. Este proceso tiene dos etapas: en la primera el nitrógeno es oxidado de su especie más reducida que es el amonio (N³⁻) para formarlos en nitritos (N³⁺) por bacterias oxidantes de amonio (BOA); posteriormente se somete a una segunda reacción de oxidación a partir de la cual los nitritos (N³⁺) son oxidados a nitratos (N⁵⁺) por las bacterias oxidantes de nitritos (BON) (Faulwetter *et al.*, 2009; Kadlec *et al.*, 2009; Lee *et al.*, 2009; Pérez *et al.*, 2005; Schmidt *et al.*, 2003; Vymazal, 2007). Esta reacción es biológica, y en ella intervienen bacterias autótrofas a través de las siguientes reacciones (ecuación 4):

Ecuación 3. Nitrificación



En las ecuaciones anteriores es posible apreciar que el oxígeno es un reactivo indispensable para que la reacción pueda llevarse a cabo: se necesitan aproximadamente 4.6g de oxígeno disuelto por cada gramo de nitrógeno amoniacal transformado. Faulwetter *et al.* (2009) mencionan que a partir de concentraciones de oxígeno por debajo de los 2.5 mgO/L, el proceso de nitrificación se inhibe causando la acumulación de amonio en el sistema. Esto hace del oxígeno un reactivo limitante en el proceso de nitrificación y por lo tanto, se constituye en un criterio de operación para asegurar la mayor remoción de nitrógeno amoniacal del influente.

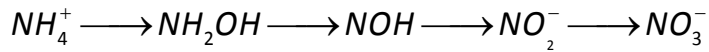
Otra variable que limita la nitrificación es el bajo rendimiento energético que caracteriza a los quimioautótrofos -aproximadamente cuatro veces menor al de los organismos heterótrofos- que determina una capacidad muy lenta de desarrollo dentro del sistema.

Maltais *et al.* (2009) resaltan la importancia de la presencia de plantas dentro del humedal artificial como un factor que incrementa la capacidad de nitrificación del amonio de las aguas residuales al aumentar la concentración de oxígeno disuelto dentro del sistema, a través del transporte pasivo y activo de este elemento desde la atmósfera hasta la zona del rizoma.

En cuanto a la capacidad de remoción de nitrógeno amoniacal en un HAFV por metro cúbico, Cooper (1997) reporta valores cercanos a 8.13 g NH⁴⁺N/m³.

Por otro lado, a pesar de que durante muchos años se ha asociado a la nitrificación con organismos autótrofos, en los últimos años adquiere relevancia la investigación de la nitrificación heterótrofa en la que existen los mismos intermediarios que en la nitrificación autótrofa (ec. 5) (Vymazal, 2005):

Ecuación 4. Nitrificación autótrofa

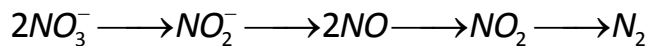


Vymazal plantea que la nitrificación heterótrofa y la desnitrificación aerobia pueden llevarse a cabo por el mismo organismo. Una potencial desventaja de los organismos heterótrofos es que requieren energía externa para poder sobrevivir; pero una ventaja es que tienen una tasa de crecimiento mayor que las bacterias nitrificantes autótrofas. Ejemplos de organismos que llevan a cabo esta transformación de los compuestos amoniacales son: *Arthrobacter globiformis*, *Pseudomonas sp.*, y *Aspergillus flavus*.

Desnitrificación

La desnitrificación es el proceso a través del cual el nitrato es convertido en nitrógeno gaseoso y cuyos intermediarios son el nitrito, el óxido nítrico y el óxido nitroso (Ec. 6) (Lee *et al.*, 2009; Vymazal, 2007; Wang *et al.*, 2009).

Ecuación 5. Desnitrificación

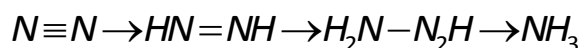


Esta reacción de carácter irreversible puede llevarse a cabo en condiciones anaerobias o anóxicas menores a $10 \mu\text{molO}_2/\text{L}^{-1}$ y en condiciones aerobias con una concentración de oxígeno equivalente al 80% de la saturación del aire; necesariamente debe haber presencia de algún sustrato de carbono del que estos organismos heterótrofos puedan obtener energía.

Fijación

La fijación es el mecanismo a través del cual el nitrógeno gaseoso (N_2) es transformado en amonio. Las condiciones a las que esta reacción ocurre suelen ser anaerobias, pero también hay organismos que pueden llevarla a cabo bajo condiciones completamente aerobias. La Ecuación 7 refiere la fijación de nitrógeno gaseoso (Kadlec *et al.*, 2009):

Ecuación 6. Fijación de nitrógeno

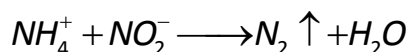


El tipo de organismos asociados con la transformación del N₂ son actinomicetos simbióticos, bacterias heterótrofas y algas verde-azules conocidas como cianobacterias. Debido a la gran cantidad de energía requerida para llevar a cabo esta reacción, muchos autores consideran a la fijación del nitrógeno como un proceso prácticamente despreciable en ambientes ricos en nitrógeno disuelto.

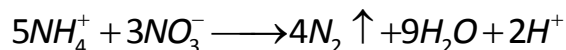
Oxidación anaerobia de amonio (ANAMMOX)

La oxidación anaerobia de amonio se define como la conversión de NO₂⁻ y NH₄⁺ a N₂ (Lee *et al.*, 2009). Existen dos reacciones de transformación del amonio propuestas, una en la que agente aceptor de electrones es el nitrito (Ec. 8) y otra en la que es el nitrato (Ec. 9). En ambos casos, debido a que se trata de una reacción autótrofa, no es necesario aportar una fuente externa de carbono, contrario a la desnitrificación, y es posible producir nitrógeno gaseoso (Vymazal, 2007).

Ecuación 7. ANAMMOX con nitrito como aceptor de electrones



Ecuación 8. ANAMMOX con nitrato como aceptor de electrones



Hasta el momento se han detectado cuatro especies de bacterias quimiolitotróficas que son capaces de llevar a cabo el proceso ANAMMOX: Candidatus "*Brocadia Anammoxidans*", Candidatus "*Kuenenia stuttgartiensis*", Candidatus "*Scalindua wagneri*" y Candidatus "*Scalindua brodae*".

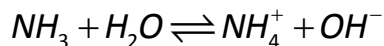
5.3. Mecanismos fisicoquímicos de remoción de compuestos nitrogenados

Volatilización

La volatilización del amonio es el proceso fisicoquímico a través del cual el nitrógeno amoniacal se encuentra en equilibrio entre su forma gaseosa y acuosa (Ec.10). El factor más determinante para favorecer este mecanismo de remoción de nitrógeno amoniacal es el pH: para valores menores a 8.0 la cantidad de amonio que se pierde

de forma gaseosa es muy reducida; pero para valores mayores a 9.3, la relación entre las especies gaseosas y acuosas es 1:1 (Vymazal, 2007; Wang *et al.*, 2009).

Ecuación 9. Volatilización del amonio

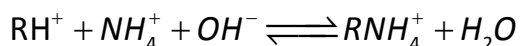


Adsorción del amonio

El amonio en forma iónica es un catión que puede adsorberse al sustrato, sedimentos inorgánicos y materia húmica a través de enlaces débiles que se rompen cuando cambian las condiciones del sistema. La cantidad de amonio que puede ser adsorbida a partículas sólidas depende de los lugares disponibles para que las moléculas puedan colocarse en la superficie.

La ecuación que describe el intercambio de iones entre el agua y el sustrato es la siguiente (Ec.11):

Ecuación 10. Adsorción del amonio



Donde R es el ligando al que el amonio se puede adsorber y que forma parte de la estructura del sustrato. En el caso de las zeolitas, los iones que se pueden intercambiar por el amonio suelen ser iones de sodio (Na^+), Calcio (Ca^{2+}) y Magnesio (Mg^{2+}).

El principal factor que mantiene el equilibrio entre la cantidad de amonio adsorbido al sustrato y la cantidad disuelta en el agua es la concentración de esta especie en el agua: cuando la cantidad de amonio disuelto es transformado a otras especies inorgánicas, el amonio adsorbido regresa al medio acuoso (Kadlec *et al.*, 2009; Lee *et al.*, 2009; Vymazal, 2005).

Sedimentación

Las partículas más grandes con un importante contenido de nitrógeno orgánico suelen ser removidas de las aguas residuales al asentarse en el material de empaque, y posteriormente ser transformadas por microorganismos o plantas. Lee

et al. (2009) mencionan que si además se añaden compuestos floculantes, es posible incrementar la tasa de remoción de contaminantes a través de este medio.

Asimilación de nitrógeno en tejidos

El nitrógeno es un nutriente indispensable para la vida pues forma parte de la estructura celular de los organismos. De manera particular, el mecanismo de asimilación se refiere a los procesos a través de los cuales formas inorgánicas de nitrógeno, en especial amonio y nitratos, son incorporadas a las células de microorganismos y algas, y a los tejidos de las plantas. Las macrófitas emergentes obtienen estos nutrientes inorgánicos del sustrato, mientras que las de libre flotación los obtienen del agua (Kadlec *et al.*, 2009; Zhang *et al.*, 2010)

La asimilación de nutrientes en el tejido vegetal es un componente más del ciclo natural del nitrógeno. Ligado al ciclo de vida de las plantas está el transporte y transformación del nitrógeno asimilado en el tejido vegetal: nuevos organismos crecen rápidamente durante la primavera y el verano aumentando la tasa asimilación, mientras que durante el otoño e invierno esta tasa alcanza niveles muy bajos pues los organismos maduran y algunos mueren. Además, la concentración de nitrógeno en los tejidos se clasifica por la zona en la que están acumulados: subterráneos y por arriba del sustrato. En general se buscan organismos que almacenen la mayor cantidad en los órganos que se ubican por arriba del sustrato pues a través de la poda pueden ser removidos del sistema. Hay reportes variados de la capacidad de almacenamiento de nitrógeno que va desde 0.6 a 250 gNm⁻² de tejido vegetal y varía entre especies. En general, uno de los factores que influyen en la selección del componente vegetal utilizado en HA, es la tasa de crecimiento que tienen y por lo tanto la capacidad de asimilar nitrógeno en sus tejidos. Estas tasas varían entre especies vegetales y zonas geográficas (Brisson y Chazarenc, 2009; Vymazal, 2007; Zhang *et al.*, 2010).

Descomposición

Una vez que los organismos mueren, el destino del nitrógeno que forma parte de sus tejidos puede variar. En el caso del componente vegetal, una parte de su tejido se descompone afuera del HA liberando el nitrógeno al ambiente, y otra regresa al sistema añadiendo depósitos de nitrógeno orgánico en el sustrato (Kadlec *et al.*,

2009; Vymazal 2007) que a través del proceso de mineralización ese nitrógeno orgánico es reincorporado al agua en forma de amonio. Los microorganismos que mueren, también se reincorporan al sistema en forma de nitrógeno orgánico suspendido.

5.4. Efectos de los componentes de un humedal artificial sobre los procesos de remoción y transformación de nitrógeno

El material de empaque

El material de empaque afecta directamente la tasa de retención hidráulica (TRH) y la tasa de transferencia de oxígeno (TTO) dentro de un HA (Cooper, 2005), por lo tanto es de vital importancia la adecuada selección del tipo de material y del tamaño de partícula.

En el caso de la remoción de nitrógeno, el amonio puede adsorberse en la superficie de ciertos sustratos a través de interacciones de intercambio catiónico con el sustrato tanto de origen orgánico como inorgánico (Kadlec y Wallace, 2009). A pesar de que su capacidad de adsorción es relativamente pequeña en comparación con otros cationes, el sustrato puede representar un depósito potencial de amonio dentro de un HA.

El componente vegetal

Las plantas utilizan compuestos nitrogenados en sus actividades metabólicas. De acuerdo con Kadlec (2009) las plantas pueden llegar a representar hasta el 8% del nitrógeno removido de aguas contaminadas. La Tabla 5 reporta valores de remoción de nitrógeno para tres especies vegetales que se utilizan en HA.

Tabla 4. Fijación de nitrógeno en las especies más utilizadas en HA (modificado de Ramírez, 2001)

Especie	g N/m ² /año
Cyperus papyrus	122
Typha latifolia	116.4
Phragmites australis	231.3

Además de fijar nitrógeno en sus tejidos, las plantas aportan mecanismos adicionales que favorecen la correcta operación del sistema para que la degradación microbiológica de compuestos nitrogenados pueda llevarse a cabo (Maltais-Landry *et al.*, 2009; Brisson y Chazarenc, 2009), éstos son los siguientes:

- Aportan una mayor cantidad de oxígeno al sistema transportándolo del tallo a la zona del rizoma.
- Permiten la proliferación de microorganismos en sus raíces al aportar una mayor superficie de contacto.

Los microorganismos

Para la remoción del nitrógeno total en humedales artificiales, Faulwetter *et al.* (2009) señalan que la actividad microbiana es la principal ruta de remoción y transformación de compuestos nitrogenados dentro de los HA. No obstante lo anterior, hasta hace muy poco se comenzó realmente a investigar a fondo el tipo de microorganismos presentes dentro de en estos sistemas, las reacciones de transformación de nitrógeno en las que intervienen, así como las condiciones a las que se pueden lograr mayores tasas de remoción.

La forma convencional en la que se puede asegurar que los microorganismos desplieguen su mejor capacidad depuradora, es garantizando que las condiciones del sistema como el pH, la temperatura, la concentración de oxígeno disuelto, la concentración de carbono orgánico y la concentración de compuestos inhibidores de la actividad metabólica de los microorganismos estén en los valores más adecuados para su bienestar.

En la Tabla7 se resumen los principales microorganismos que intervienen en las diferentes rutas de transformación de nitrógeno y se incluyen las condiciones óptimas a las que éstos pueden vivir, así como los compuestos que inhiben su actividad (Tanner *et al.*, 2002; Schmidt *et al.*, 2003; Vymazal, 2007; Wang *et al.*, 2009). Conocer estos valores más recomendados permite establecer lineamientos de operación que permiten promover la proliferación de ciertos microorganismos.

Tabla 5. Condiciones óptimas para la sobrevivencia de diferentes microorganismos (Tanner et al., 2002; Schmidt et al., 2003; Vymazal, 2007; Wang et al., 2009)

Reacción	Microorganismo	Tipo de organismo	Géneros	Ambiente	Temp. Óptima [°C]	pH	Potencial Redox [mV]	fuelle de carbono	Tasa de remoción [gNm ⁻² d ⁻¹]	Inhibidores
Amonificación	Protobacterias oxidantes de amonio	Quimiolitótrofo	<i>N. europaea</i> , <i>Nitrosolobus multiformis</i>	Aerobio	40-60	6.5 - 8.5	Eh > 100	CO ₂	0.004 - 0.53	Acetileno
Nitrificación	Bacterias oxidantes de amonio	Quimiolitótrofo	<i>Nitrospira</i> , <i>Nitrosovibrio</i> , <i>Nitrosolobus</i>	Aerobio	30-40	6.7-8.3	Eh > 100	CO ₂	0.01 - 2.15	Temperaturas menores a 4°C, algunos compuestos orgánicos de carbono, en condiciones aerobias son inhibidas por acetileno
	Oxidantes aerobios de nitrito	Quimiolitótrofo facultativo	<i>Nitrobacter</i> , <i>Nitrospira</i> , <i>Nitrococcus</i>	Facultativo		6.6. - 8-0		CO ₂		hidroxilamina, amonio,
Amonificación del nitrato	Bacterias amonificantes de nitrato, bacterias fermentativas	Quimioheterótrofo facultativo	<i>Bacillus</i> , <i>Citrobacter</i> , <i>Aeromonas</i>	Facultativo, anaerobio		pH>7	Eh<100	Carbono orgánico		N gaseoso
Desnitrificación	Bacterias desnitrificantes	Quimioheterótrofo facultativo	<i>Bacillus</i> , <i>Micrococcus</i> , <i>Pseudomonas</i>	Facultativo anaerobio	60 - 75	6.0 - 8.0	100 - 350	Carbono orgánico	0.003 - 1.02	Temperaturas menores a 4°C
Fijación de nitrógeno	Actinomicetos, bacterias heterótrofas, cianobacterias	Quimioheterótrofos y quimioautótrofos facultativos	<i>Bacillus</i> , <i>Klebisella</i> , <i>Clostridium</i>	Anaerobio		5.0-8.0	-260 a - 200	Carbono orgánico	0.12	Altas concentraciones de oxígeno, baja intensidad de luz
Anammox	Oxidantes anaerobios de amonio	Quimiolitoautótrofo	<i>Candidatus Brocadia anammoxidans</i>	Anaerobio			-260 a - 200	CO ₂		concentración de nitrito >70 mgN/L y de fosfato >60 mgP/L

Se han descubierto nuevos mecanismos microbiológicos a través de los cuales es posible transformar nitrógeno, como la oxidación anaerobia del amonio, la nitrificación aerobia, la nitrificación parcial, y la nitrificación/desnitrificación en presencia de óxidos de nitrógeno (NO_x) (Vymazal *et al.*, 2008; Schmidt *et al.*, 2003). En este sentido, se abren nuevas rutas a través de las cuales es posible modificar el diseño o la operación de humedales artificiales para aumentar las tasas de transformación y remoción de nitrógeno de aguas residuales.

Nitrificación Parcial

Schmidt *et al.* (2003) señalan que la nitrificación parcial es una reacción a través de la cual se logra la conversión de amonio a nitrito pero se inhibe la segunda reacción en la que éste se convierte a nitrato. Al combinarse con ANAMMOX, o con la nitrificación anaerobia, es posible reducir el consumo de recursos: menos oxígeno requerido pues no es necesario llevar a cabo la reacción para reducir el nitrito a nitrato; hay un menor aporte a la DQO al sistema pues no hay nitrato que oxidar a nitrógeno molecular; y no es necesario añadir una fuente externa de carbono orgánico necesario para el bienestar de los microorganismos heterótrofos.

Procesos con NO_x

La adición de óxido nítrico (NO₂) y/o nitroso (NO) en concentraciones de trazas a los sistemas de tratamiento de aguas en presencia de bacterias como *Nitrosomonas sp.*, permite que éstos organismos nitrifiquen y desnitrifiquen en condiciones totalmente aerobias dando como resultado la producción de nitrógeno molecular. Lo anterior permite reducir 50% el consumo de oxígeno en el sistema y reducir la DQO del influente (Schmidt *et al.*, 2003).

5.5. Factores que promueven los mecanismos de transformación de compuestos nitrogenados dentro de humedales artificiales

Un HA puede ser considerado un complejo biorreactor en el cual ocurren los procesos físicos, químicos y biológicos, entre los componentes del sistema; procesos cuyas características, estarán asociadas a las variables y criterios de diseño que buscarán aumentar la eficiencia de depuración de los sistemas (Lee *et al.*, 2009; García, 2007).

La optimización de procesos de remoción de compuestos nitrogenados recae principalmente en comprender y manipular los factores que influyen de manera más determinante en ellos; a partir de ello, es posible plantear las características requeridas para la construcción del humedal artificial y las variables de operación que se pueden modificar para promoverlas (Lee *et al.*, 2009).

5.5.1. Parámetros físicos y químicos que intervienen en la transformación de compuestos nitrogenados en HA

Concentraciones de oxígeno disuelto

El oxígeno es una variable principal que limita o promueve ciertos mecanismos de transformación de contaminantes. Las transformaciones biológicas de compuestos nitrogenados son las que más dependen de las condiciones de saturación de oxígeno dentro de estos sistemas. De acuerdo con las reacciones que se deseen promover, tanto el diseño de los humedales artificiales como el control de sus variables de operación, permiten modificar las rutas de transformación del nitrógeno.

Potencial redox

Los humedales artificiales están caracterizados por la presencia de zonas aerobias y anaerobias que permiten la existencia de formas oxidadas y reducidas de especies predominantes como nitrógeno, oxígeno, fósforo, hierro y manganeso. El estado de reducción y oxidación de estos iones determina su disponibilidad como nutrientes, así como su potencial toxicidad (Truu *et al.*, 2009). Las condiciones con altos potenciales redox promueven procesos aerobios como la nitrificación (de 300mV a 750mV); mientras que las condiciones de bajos niveles de potencial redox (de 100mV a 350mV) favorecen procesos anaerobios como la desnitrificación (Faulwetter *et al.*, 2005). Por lo anterior, las condiciones del agua en un humedal artificial, determinan la distribución espacial y abundancia de diferentes comunidades microbianas (Paredes *et al.*, 2007).

El diseño de los HA puede favorecer ciertas condiciones de potencial redox para la proliferación de colonias de bacterias asociadas a la remoción de contaminantes, en este caso, del nitrógeno. Esta variación de los valores de potencial redox dentro de los humedales artificiales, se puede lograr alterando la carga de materia orgánica del

influyente; con la implementación de un sistema de aireación artificial; modificando el flujo hidráulico del sistema (flujo horizontal o vertical) y/o los regímenes de flujo (intermitente, flujo saturado, no saturado, etc.); o incluso, a través de la selección de ciertas especies vegetales (Faulwetter *et al.*, 2009).

Temperatura de operación

La temperatura juega un importante papel como regulador de la activación/desactivación de procesos microbiológicos dentro de humedales artificiales (Truu *et al.*, 2009). En general, la influencia de la temperatura es mucho mayor en los sistemas que se encuentran al aire libre y que son directamente afectados por las estaciones del año. La nitrificación por ejemplo, es una reacción sensible a la temperatura, en la cual el intervalo óptimo para la actividad microbiana asociada a ésta, oscila entre los 28°C y los 36°C; asimismo, por debajo de los 10°C esta reacción se inhibe (Faulwetter *et al.*, 2009).

pH

El crecimiento de los microorganismos en general y ciertos procesos microbianos en particular son sensibles al pH de las aguas residuales. Al respecto, cabe destacar que un pH óptimo para la nitrificación se ubica entre 7.0 y 8.0 (Paredes *et al.*, 2007).

Concentración de carbono orgánico

Para los organismos heterótrofos que necesitan una fuente externa de energía, es de vital importancia contar con la cantidad de carbono orgánico que permita mantener la más alta tasa de remoción de contaminantes.

5.5.2. Criterios de diseño y variables de operación que intervienen en la remoción de compuestos nitrogenados en HA

Una vez que se conocen los factores que afectan las rutas de transformación de compuestos nitrogenados, es importante tener en cuenta los criterios de diseño para construir un humedal artificial y establecer las variables de operación que pueden incrementar su eficiencia. La adecuada operación de un humedal artificial no sólo permite incrementar las tasas de remoción de contaminantes, sino también

prolongar el tiempo de vida de los sistemas, al evitar el taponamiento temprano y la extinción de las colonias microbianas en el sustrato (Lee *et al.*, 2009).

Concentración de contaminantes

El diseño de los humedales artificiales depende en gran medida de la calidad del influente que se desea tratar y, de manera particular, es importante conocer la cantidad de nitrógeno que los humedales artificiales suelen ser capaces de remover. Cooper (1997) menciona que la remoción promedio de nitrógeno de un humedal artificial de flujo vertical es de 8 a 13 gN/m³. Por tanto, en la medida en la que se conoce la cantidad de nitrógeno que contienen las aguas residuales que se desean tratar, es posible estimar las dimensiones que los sistemas deberán tener.

Dimensiones

Las dimensiones de los reactores empacados experimentales están sujetas al volumen de agua residual a tratar, al área mínima indispensable por organismo vegetal, así como a la conductividad hidráulica del material de empaque. Brix y Arias (2005) plantean que se requieren cerca de 3 m² de un HAFV por persona y refiere que el máximo número de plantas que puede haber por metro cuadrado de HAFV son cuatro.

Régimen de flujo en la alimentación

Cooper (2005); Brix y Arias (2005); Kadlec *et al.* (2008); Forquet *et al.* (2009); y Yalkuc y Ugurlu (2009), señalan que los arreglos de flujo vertical promueven condiciones aeróbicas que favorecen las reacciones de nitrificación en humedales artificiales. Dentro del modo de operación de flujo vertical, existen más variantes en el régimen de flujo (Kadlec *et al.*, 2009); como son las siguientes:

- Flujo descendente intermitente. La entrada del influente se lleva a cabo sobre la parte superior del material de empaque por intervalos limitados de tiempo, y esto favorece el ingreso de aire dentro del sistema, manteniendo condiciones aerobias y propiciando la remoción de nitrógeno a través de reacciones de nitrificación.

- Flujo descendente no saturado. Implica una alimentación continua del agua residual sobre la cama de material de empaque, con una relación de carga hidráulica tal que no se produce acumulación de agua dentro del sistema.
- Flujo descendente saturado. Implica una alimentación continua del agua residual sobre la cama del material de empaque en condiciones saturadas. Este tipo de operación favorece condiciones anaerobias y con valores de potencial redox bajos dentro del sistema, pues se limita el flujo convectivo de aire hacia su interior. En este sentido, las reacciones de remoción de compuestos nitrogenados asociadas a organismos facultativos o anóxicas pueden ser favorecidas.
- Flujo descendente con ciclos saturados y no saturados (tidal flow). Este tipo de régimen de flujo implica intervalos de tiempo en los que los HAFV están inundados y vacíos: cuando la corriente de alimentación ha llenado por completo el sistema, la bomba se detiene y el agua permanece en contacto con el material de empaque y los microorganismos por un intervalo de tiempo determinado. Posteriormente se vacía el sistema y el aire llena los espacios vacíos del material poroso. En éste caso el régimen de flujo permite que ocurran ciclos de condiciones aerobias y anaerobias en un mismo sistema (Kadlec *et al.*, 2009). El desarrollo de este tipo de régimen de flujo fue realizado por Leonard *et al.* en el 2003 y busca aprovechar al máximo periodos aerobios y anóxicas dentro del mismo sistema, para favorecer una mayor cantidad de mecanismos de transformación de nitrógeno (Tam *et al.*, 2009).

Tiempo hidráulico de residencia

Está definido como el tiempo promedio en el que una fracción de volumen de agua recorre toda la longitud del sistema desde la entrada hasta la salida y se expresa en unidades de tiempo a través de la siguiente ecuación (USEPA, 2000):

Ecuación 11. Tiempo hidráulico de residencia

$$TRH = \frac{nV_{reactor}}{Q}$$

TRH	tiempo de residencia hidráulico (t)
n	porosidad del material de empaque (%)
Vreactor	Volumen del reactor (V)
Q	Flujo volumétrico de salida (V/t)

La elección del tiempo de residencia hidráulico debe tomar en cuenta los siguientes aspectos:

- Asegurar que el agua esté en contacto con los microorganismos para que éstos puedan llevar a cabo la remoción de contaminantes.
- Prevenir que el oxígeno dentro del sistema se acabe y límite las reacciones de nitrificación.

Lee *et al.* (2009) recomiendan tiempos hidráulicos de residencia cercanos a 8 días para lograr remociones óptimas de nitrógeno total en aguas residuales.

Razón de carga hidráulica

La razón de carga hidráulica se define como la cantidad de flujo de agua que atraviesa un metro cuadrado y cuyas unidades son $m^3m^{-2}h^{-1}$. Forquet *et al.* (2009) encontraron que la importancia de seleccionar una razón de carga hidráulica (RCH) adecuada es la correcta distribución del influente sobre la superficie del material de empaque y la prevención de la formación de caminos preferenciales para el agua, pero no tiene un impacto directo en la cantidad de oxígeno que puede entrar al sistema por convección. La RCH que ellos recomiendan es $0.5 m^3m^{-2}h^{-1}$.

Además, la razón de carga hidráulica debe considerar la concentración de contaminantes que el influente contendrá, ya que la capacidad depuradora de los microorganismos que forman parte de la biopelícula adherida al sustrato tiene un límite. Wang *et al.* (2009) mencionan que para una misma razón de carga hidráulica con concentraciones de contaminantes diferentes, la capacidad depuradora del

humedal artificial con la menor concentración de compuestos nitrogenados fue mayor.

Número de dosificaciones

De acuerdo con Forquet *et al.* (2009), el número de dosificaciones que son alimentadas a un HAFV por día tiene un impacto directo en la cantidad de oxígeno que ingresa al sistema por efectos convectivos. Entre más frecuentes son las dosificaciones, hay menos tiempo disponible para que el material de empaque pueda purgar el agua del sistema. Al mismo tiempo, entre más mojado está el material de empaque, menos cantidad de aire puede adsorberse en su superficie. Sin embargo, también mencionan que al aumentar la razón de carga diaria y la razón de carga hidráulica, este efecto se compensa y es posible incluso aumentar la cantidad de oxígeno que entra al sistema.

6. MODELOS MATEMÁTICOS

6.1. Breve descripción de los modelos matemáticos

Un modelo matemático es una abstracción de la realidad. El modelamiento de sistemas está basado en la conceptualización y exploración del comportamiento o funcionamiento de los mecanismos que en ellos ocurren, así como de las interacciones que entre estos existen. Para las investigaciones ambientales, el uso de modelos matemáticos permite fragmentar complejos sistemas en sus diferentes componentes, haciendo más accesible su comprensión (Wainwright y Mulligan, 2004).

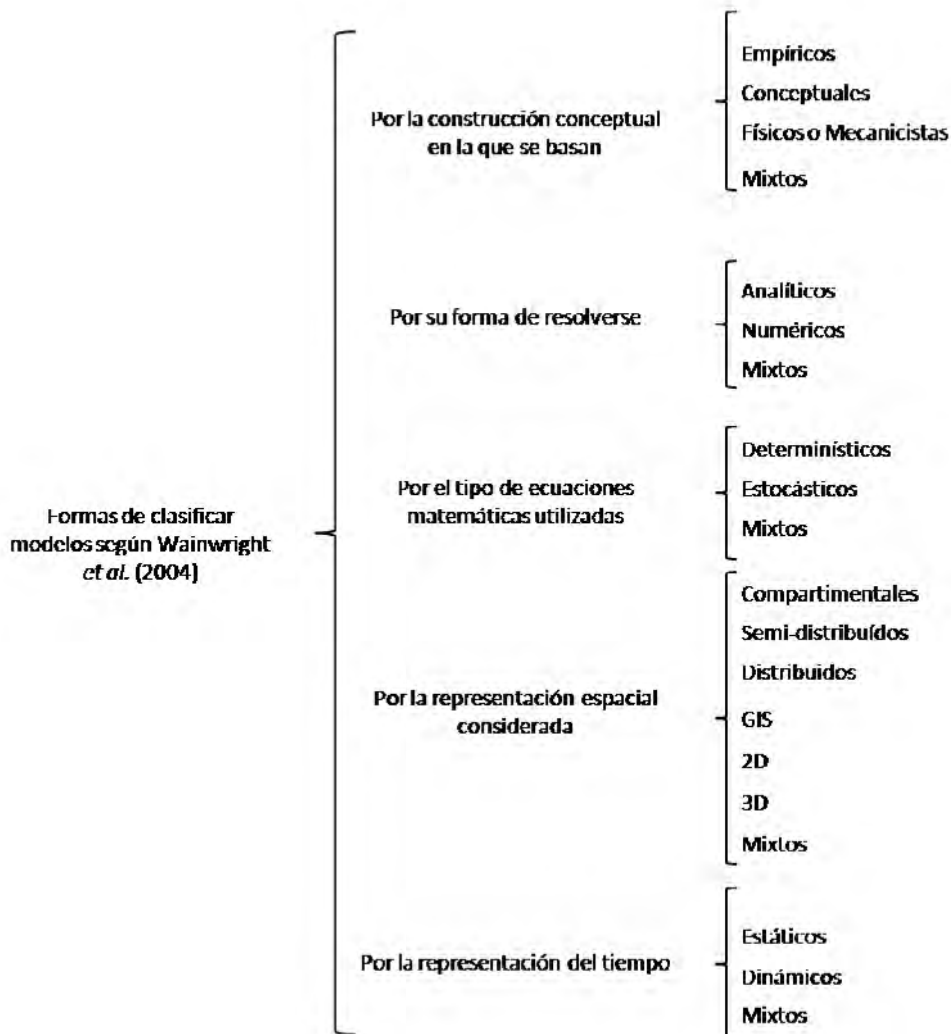


Figura 5. Propuesta de clasificación de modelos (Wainwright y Mulligan, 2004)

Las formas de clasificar los modelos matemáticos propuesta por Wainwright *et al.* (2004) están basadas en características variadas: por la profundidad del contexto en el que se fundamenta el modelo; por la forma en la que se puede obtener una solución numérica o analítica; por el tipo de ecuaciones que componen el modelo; por la representación espacial en la que éstos se construyen; y por el marco temporal en el que se desarrollan.

6.2. Modelos matemáticos que simulan el funcionamiento de un HA

Los modelos matemáticos utilizados para representar el funcionamiento de HA, han evolucionado los modelos empíricos más simples (abordados como “cajas negras”), (Diag. 3) a otros más detallados que incluyen una gran variedad de mecanismos involucrados en la remoción y transformación de contaminantes dentro del sistema (Diag. 4) (Langergraber *et al.*, 2009)

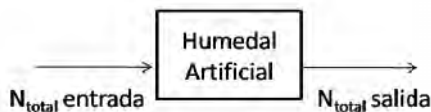


Figura 6. Representación de un humedal artificial, mediante un modelo empírico simple

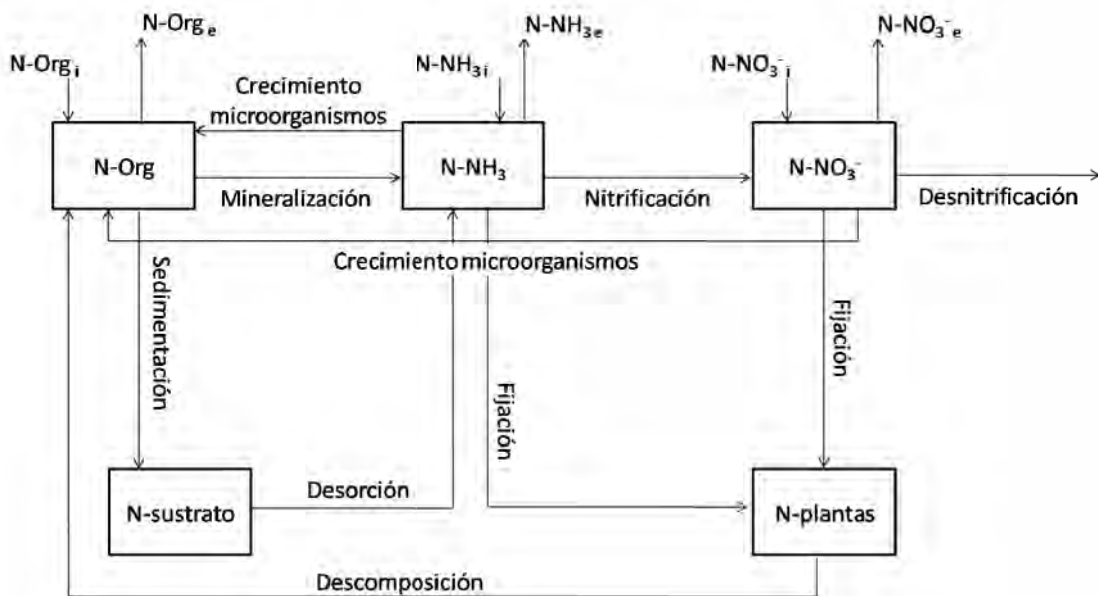


Figura 7. Representación de un humedal artificial mediante un modelo complejo (Mayo y Bigambo, 2005)

En el desarrollo de modelos matemáticos que simulan el funcionamiento de los HA, destacan tres propósitos principales:

- Profundizar el entendimiento de los procesos físicos, químicos y biológicos que tienen lugar dentro de estos sistemas y que están involucrados en la transformación y degradación de contaminantes de las aguas residuales.
- Predecir la calidad de los efluentes a partir de las características del HA, la calidad del agua a tratar y los criterios de operación con los que se desea operar el sistema.
- Generar ecuaciones de diseño que permitan adecuar las características del humedal al sitio geográfico donde será construido, a la calidad del agua que deba tratar, y al porcentaje de remoción requerido.

Una vez desarrollados, estos modelos matemáticos deben ser validados con datos experimentales; y una vez comprobada su confiabilidad es posible utilizarlos como una herramienta que permita ensayar los cambios para incrementar las tasas de remoción de contaminantes (Kincanon y McAnally, 2004; Langergraber *et al.*, 2009).

Muchos de los últimos modelos propuestos y desarrollados incluyen una gran cantidad de parámetros, entre los cuáles algunos pueden llegar a ser difíciles de estimar; así como muchas presunciones que no es posible generalizar en todos los casos de humedales artificiales. Lo anterior obliga a realizar un balance entre lo detallado de los modelos y lo práctico de su operación, de acuerdo con los objetivos para los cuales fueron diseñados (Bunwong *et al.*, 2009; Sklarz *et al.*, 2010).

6.3. Clasificación de los modelos que simulan la transformación de contaminantes en HAFSS

Langergraber *et al.* (2009) mencionan que la mayoría de los modelos matemáticos desarrollados en los últimos años son modelos de transporte simplificados con reacciones de primer orden para explicar la transformación de los contaminantes. También señalan que el desarrollo de modelos más complejos implica la consideración de distintos procesos de transformación -físicos, químicos y biológicos- simultáneamente, así como la hidráulica del sistema. En el estudio que

realizaron en el 2009, los autores clasifican los modelos matemáticos revisados en tres tipos: modelos de transporte simplificados y ecuaciones cinéticas de primer orden; modelos mecanicistas complejos; y modelos simplificados utilizados para el diseño de HA.

Modelos de transporte simplificados y ecuaciones cinéticas de primer orden

Langergraber *et al.* (2009) refieren que estos modelos se consideran empíricos, ya que requieren estimar de forma experimental parámetros de ajuste y no necesariamente reflejan los mecanismos que realmente ocurren dentro del HA.

Rousseau *et al.* (2004) describe modelos matemáticos que forman parte de esta primer clasificación:

- Modelos de “Reglas de dedo”. Están basados en los resultados de diferentes humedales artificiales, a través de los años, a partir de cuya construcción se fue generando experiencia posteriormente traducida en recomendaciones de diseño y de operación.
- Modelos de regresión multivariable. Se basan en datos experimentales de entrada y salida del HA, y donde la eficiencia de remoción de contaminantes se asocia a pocos parámetros. Algunas veces, estos parámetros son asignados a partir de un análisis de sensibilidad, y otras a partir de información encontrada en la literatura. Algunos ejemplos de regresiones multivariables generadas antes del 2005 y recopiladas por Rousseau *et al.* (2004) para nitrógeno total son las siguientes:

Ecuación 12. Regresión multivariable

$$N_{out} = 2.5 + 0.46N_{in} + 0.12Q$$

Ecuación 13. Regresión multivariable

$$N_{out} = 0.52N_{in} + 3.1$$

- Modelos cinéticos de primer orden. Consisten en la propuesta de ecuaciones que representan alguna reacción química que siga una cinética de primer

$$\frac{C_{out}}{C_{in}} = e^{\frac{-k_A}{q}}$$

$$\frac{C_{out}}{C_{in}} = e^{-tk_v}$$

Tipo de reactor idea	Ecuación
Reactor por lotes	$\frac{dC_i}{dt} = V_i r_i$
Reactor completamente agitado	$\frac{dC_i}{dt} = Q - Q + V_i r_i$
Reactor de flujo pistón	$u \frac{dC_i}{dx} = V_i r_i$

Debido a que la capacidad de los HA para procesar influentes varía en relación con una serie de factores específicos del lugar donde se desea instalarlos, estos modelos resultan útiles y prácticos para predecir la calidad del efluente que se desea tratar en el HA del cual se obtuvieron datos experimentales iniciales, y se pueden encontrar criterios de operación que promuevan la eficiencia del sistema (Kincanon y McAnally, 2005).

Por otro lado, el carácter individual de estos modelos limita tanto la posibilidad de utilizarlos para humedales diferentes como la comprensión de los mecanismos que intervienen en la remoción y transformación de contaminantes en los HA (Hafner y Jewel, 2006).

Modelos mecanicistas complejos

Este tipo de modelos buscan profundizar en el conocimiento de las rutas de transformación y remoción de contaminantes que se llevan a cabo dentro del sistema. Según Howell *et al.*, (2005) estos modelos dinámicos permiten simular con mayor detalle la variabilidad en el funcionamiento de los humedales artificiales, ya que incluyen funciones matemáticas y parámetros que representan las condiciones climáticas donde se encuentren los sistemas; los cambios en las concentraciones de contaminantes en el influente; así como cambios en la actividad microbiana, vegetal y animal.

Para plantear este tipo de modelos matemáticos es necesario contar con un sólido marco conceptual del ciclo del nitrógeno dentro de los humedales artificiales, lo que exige la comprensión de las variables que afectan a cada uno de los mecanismos que intervienen en el ciclo. En general, los modelos mecanicistas complejos son los menos comunes en materia de HA (Langergraber *et al.*, 2009) y a la vez resultan los más útiles para comprender los fenómenos que ocurren dentro de ellos. Sin embargo, el número de parámetros asociados a este tipo de modelos suele ser elevado, además de difíciles de estimar, reduciendo la posibilidad de aplicar el modelo para el diseño de HA (Hafner y Jewel, 2006).

Modelos simplificados utilizados para el diseño de HA

Este tipo de modelos matemáticos son desarrollados específicamente para encontrar los criterios de diseño y las variables de operación más recomendables para tratar aguas residuales que han sido previamente caracterizadas.

En este sentido, el desarrollo de ecuaciones de diseño suele partir de datos experimentales previos. A partir del tratamiento estadístico que se da a esos resultados, así como de la definición de los parámetros que pueden ser manipulados (como por ejemplo el tiempo de residencia hidráulico dentro del sistema) es que se determinan las características de construcción y operación del HA.

Se puede afirmar que debido a que la ecuación de diseño ha sido ajustada a experimentación previa, estas ecuaciones suelen ser individualizadas y pocas veces es posible utilizarlas en otros HA.

7. ANÁLISIS DE LOS MODELOS EXISTENTES Y PROPUESTA DE METODOLOGÍA PARA LA ELABORACIÓN DE NUEVOS MODELOS MATEMÁTICOS QUE SIMULEN EL FLUJO DE NITRÓGENO EN HAFSS

7.1. Análisis y discusión de los modelos matemáticos existentes

Tomando en cuenta los antecedentes de la investigación de Langergraber *et al.* (2009) que se enfocó en la descripción de los avances en el desarrollo de modelos matemáticos que simulan la operación de HA en general, en este trabajo se decidió avanzar en el nivel de detalle con el que se estudian estos modelos y explorar aquellos desarrollados específicamente para abordar la deficiente remoción de nitrógeno de las aguas residuales, en sus diferentes aplicaciones: descriptiva, predictiva y de diseño.

De esta manera, en el trabajo de revisión monográfica que aquí se desarrolla, se estudiaron los modelos matemáticos especializados en el estudio de las transformaciones y remoción de compuestos nitrogenados en humedales artificiales desarrollados en los últimos cinco años.

La búsqueda abarcó diez trabajos de desarrollo de modelos matemáticos en los que se encontraron coincidencias y singularidades, avances y retos por superar. A través de la construcción de matrices informativas se procuró sistematizar la información, para estar en condiciones de trazar un panorama actual en este rubro del tratamiento de aguas residuales por medio de HA.

7.1.1. Objetivos de los modelos propuestos

Un aspecto importante para poder comparar los modelos fue comprender los objetivos definidos por los autores y posteriormente analizar los alcances logrados en cada trabajo.

En términos generales, cada trabajo presentó alcances diferentes, estrechamente ligados a los objetivos que los autores definieron. En la Tabla 8 se resumen los objetivos de cada trabajo, el alcance logrado, el tipo de modelo utilizado -de acuerdo

con las clasificaciones planteadas previamente (Wainwright y Mulligan, (2005); Rousseau *et al.*, (2004); y Langergraber *et al.*, (2009)), una vez analizada esta etapa de delimitación de los modelos, fue posible adentrarse en el conocimiento del tipo de sistemas simulados, es decir, de las características de los HA de los cuales se obtuvieron datos para calibrar o validar los modelos.

Tabla 7. Objetivos, descripción de modelos y alcances propuestos por cada autor

	Objetivo del desarrollo del modelo	Tipo de modelo	Alcances
Howell <i>et al.</i> , 2005	Desarrollar una herramienta de simulación que permita estimar el potencial de remoción a corto y largo plazo a partir de datos locales; así como proveer información sobre los procesos críticos de transformación dentro del sistema	Balance de masa para un conjunto de tanques completamente agitados en serie	Se desarrolló la herramienta de simulación para HAFS en la que se destaca la inclusión de componentes que representan la actividad de las algas dentro del sistema.
McGehan <i>et al.</i> , 2005	Desarrollar un modelo que permita la optimización de parámetros de diseño	Balance de masa para reactor de flujo pistón con cinética de primer orden sin difusión y con difusión	Se probó la capacidad predictiva del modelo con y sin factor de difusión. No se reportan resultados de la estimación de parámetros de diseño.
Mayo y Bigambo, 2005	Desarrollar un modelo que prediga la transformación y remoción de nitrógeno en HAFSSH	Balance de masa para reactor de flujo pistón	Se validó la capacidad predictiva del modelo y se estimaron valores de tasas de transformación para diferentes mecanismos
Liu <i>et al.</i> , 2005	Desarrollar un modelo matemático que describa transformaciones de nitrógeno y prediga el desempeño del humedal	Balance de masa con reacción cinética de primer orden para reactores agitados en serie	Se validó el modelo desarrollado en el que se estimaron tasas de remoción y transformación de nitrógeno
Tunçsiper <i>et al.</i> , 2006	Comprobar la eficiencia de los HA para mejorar la calidad del efluente de una sistema de tratamiento terciario; comparar la capacidad de predicción de dos modelos diferentes	Cinética de primer orden Regresión multivariable	Se desarrollaron dos modelos en los que se comparó la correlación de los datos teóricos con los experimentales. También se estimaron experimentalmente las constantes cinéticas
Hafner y Jewel, 2006	Desarrollar un modelo predictivo de remoción de nitrógeno a partir de las tasas de asimilación y descomposición de biomasa microbiana y vegetal.	Ecuación de descomposición de algas	Se desarrolló el modelo de remoción y transformación de nutrientes basado en tasas de asimilación, crecimiento y remoción de biomasa.

	Objetivo del desarrollo del modelo	Tipo de modelo	Alcances
Chan <i>et al.</i> , 2008	Encontrar la temperatura y tiempo de residencia hidráulico óptimos para lograr la máxima remoción de nitrógeno amoniacal	Regresión multivariable	Se probó la capacidad predictiva de tres modelos, y se elaboraron curvas de respuesta del tiempo de residencia hidráulico recomendado en función de la concentración de amonio en el influente.
		Cinética de primer orden	
		Balance de masa	
Akratos <i>et al.</i> , 2009	Probar la aplicación de redes neuronales artificiales para predecir la remoción de nitrógeno total del sistema y proponer una ecuación de diseño para remoción de nitrógeno	red neuronal artificial y ecuación de diseño	Desarrollo de dos redes neuronales con diferente número de variables incluidas. Desarrollo de una ecuación de diseño para la remoción de nitrógeno total y nitrógeno amoniacal.
Wang <i>et al.</i> , 2009	Desarrollar un modelo descriptivo de los procesos de remoción y transformación en HA, calibrar el modelo para predicción de remoción de nitrógeno total y para modificar parámetros de diseño en HA que incrementen la eficiencia en la remoción de este contaminante	Sistema dinámico no lineal de 5 dimensiones	Se reportaron datos de remoción de nitrógeno total y se evaluó la predictividad del modelo para las cuatro estaciones del año
Sklarz <i>et al.</i> , 2010	Desarrollar un modelo para HAFV con recirculación, probar la sensibilidad del modelo a la variación de parámetros, encontrar el tiempo de residencia hidráulico óptimo para la remoción de nitrógeno y probar lo predictivo del modelo	Balance de masa para un tanque completamente agitado	Se desarrolló un modelo para HAFVR así como un análisis de sensibilidad para la tasas de recirculación

Se puede apreciar que la mayoría de los trabajos estudiados están orientados hacia predecir tasas de remoción de diferentes componentes nitrogenados. En total existen pocos trabajos tanto para describir los procesos que se llevan a cabo dentro de los HA, como para proponer ecuaciones de diseño. Langergraber *et al.* (2009) encontraron resultados semejantes y plantearon que para lograr avanzar en el entendimiento de los procesos que se llevan a cabo dentro de los humedales artificiales, es necesario desarrollar modelos descriptivos de estos sistemas en los que se vayan incorporando en mayor medida, más parámetros y variables que enriquezcan el modelo y lo aproximen más a la realidad. También resulta necesario

desarrollar ecuaciones de diseño que permitan construir nuevos HA de alta eficiencia.

7.1.2. Régimen de flujo de humedales artificiales simulados matemáticamente

Como parte de esta investigación se concentró información sobre el tipo de sistemas estudiados. En la Tabla 11 se resume la información general sobre los humedales artificiales en los cuales los autores basaron el desarrollo de los modelos matemáticos.

El régimen de flujo más estudiado fue el horizontal subsuperficial (HAFSSH) y en algunos casos se realizaron comparaciones de resultados entre regímenes de flujo diferentes. Sin embargo, sería recomendable incrementar el número de estudios dedicados a la simulación de HA de flujo vertical, pues como se mencionó en capítulos anteriores, la literatura reporta valores mayores de remoción de compuestos nitrogenados en humedales de este tipo, al promover mecanismos aerobios como la nitrificación, y también anaerobios como la desnitrificación.

Como parte del desarrollo experimental, algunos estudios utilizaron aguas residuales domésticas con y sin tratamiento previo, y en otros se utilizó agua residual artificial. Cualquiera de los dos casos presentan ventajas y desventajas, por un lado el uso de agua residual artificial permite mantener condiciones más controladas de operación y se reducen la cantidad de factores que pudieran llegar a provocar variaciones no esperadas durante la etapa experimental; pero al mismo tiempo se puede perder conocimiento del comportamiento real del sistema, como por ejemplo sustancias que inhiban los mecanismos biológicos de transformación. En el otro extremo tenemos que las aguas residuales domésticas registran una variabilidad de concentraciones y número de compuestos contenidos en el agua, que puede acarrear una mayor incertidumbre sobre la magnitud y características de los procesos de remoción y transformación de contaminantes que ocurren en el sistema. De las situaciones anteriores puede plantearse una tercera opción, en la que el estudio inicial de los procesos se haga utilizando agua residual artificial y se pueda cuantificar mejor la contribución de cada mecanismo a la remoción o transformación total de nitrógeno, y una vez que se ha generado un modelo que represente de forma cercana los resultados experimentales, robustecerlo para que incorpore nuevas características

del agua residual y evaluar de forma cuantitativa cómo es que los resultados teóricos se desvían de los reales.

Como se mencionó previamente, el material de empaque puede ser un factor importante en el funcionamiento de los HA. En los estudios revisados, el material predominante fue la grava, y en un solo estudio se utilizó sustrato (tierra); la porosidad del medio se mantuvo en el intervalo de 40% a 50%, a excepción del trabajo de Sklarz *et al.* (2010) quienes reportaron valores del 80%, además de utilizar cuentas de plástico.

El componente vegetal utilizado por los diferentes trabajos fue muy variable, sin embargo las familias que se utilizaron en un mayor número estudios fueron *Typha sp.* y *Phragmites sp.* Para algunos estudios que incluyeron un sistema de control sin plantas, se mencionó que no fue clara la influencia del componente vegetal en los procesos de transformación de compuestos nitrogenados. Sin embargo, para los estudios que incluyeron análisis para determinar el contenido de nitrógeno en el componente vegetal a través del tiempo, o bien que realizaron actividades de poda donde se removía el componente vegetal crecido en exceso, sí se menciona una contribución cercana al 8% de la remoción del nitrógeno contenido en aguas residuales.

Tabla 8. Características de los humedales artificiales utilizados para plantear los modelos

Autor	Mayo y Bigambo, 2005	Liu <i>et al.</i> , 2005	McGehan <i>et al.</i> , 2005	Howell <i>et al.</i> , 2005	Tunçsiper <i>et al.</i> , 2006	Chan <i>et al.</i> , 2008	Akratos <i>et al.</i> , 2009	Wang <i>et al.</i> , 2009	Sklarz <i>et al.</i> , 2010	
Tipo de influente	Agua residual doméstica	Agua residual pre tratada	Agua residual pre tratada	Agua residual pre tratada	Agua residual doméstica pre tratada	Agua residual doméstica	Agua residual artificial	agua residual artificial	agua residual doméstica	
Tipo de humedal	HAFH	HAFH	Híbrido HAFH y HAFV	HAFSH	HAFH y HAHFS	HAFH	HAFH	HAFV	HAFV	
Número de HA	4	4	1 HAFH y 3 HAFV	1	14 HAFH y 5 HAFS	3	5	2	2	
Control	sí	no	no	no	sí	sí	sí	sí	sí	
Material de empaque	Material	grava	NE	NE	Sustrato	grava	Restos de carbón	grava media y grava fina	grava, arena	canicas plásticas
	diámetro [mm]	06 - 25	NE	NE	NE	10 - 25	50-100	4-25; 0.25-16 y 30-180	1.5 - 4	10
	porosidad [%]	44	NE	30	NE	40	50	NE	NE	80
Especies vegetales	<i>Typha domingensis</i> <i>Phragmites mauritanus</i>	<i>Typha latifolia</i> , <i>Typha domingensis</i> <i>Scriptus acutus</i> <i>Phragmites communis</i>	NE	<i>Schenoplectus californicus</i>	<i>Canna</i> , <i>Cyperus</i> , <i>Typhia</i> , <i>Juncus</i> , <i>Poaceae</i> , <i>Paspalum e Iris</i>	<i>Cyperus alternifolius</i>	<i>Typha latifolia</i>	<i>Phragmites australis</i>	<i>Juncus alpigenus</i> <i>Cyperus haspen</i>	

Por otro lado, utilizando como base el marco teórico de este trabajo, en el que se describieron las diferentes rutas tanto fisicoquímicas como biológicas a través de las cuales el nitrógeno se transforma dentro de un humedal artificial, se construyó una matriz (Tabla 12) en la cual se reflejan las rutas incluidas en los modelos matemáticos revisados. En general es posible apreciar que los tres mecanismos que predominan son la amonificación, nitrificación y desnitrificación. En ningún caso existen propuestas de modelos que incluyan la fijación de nitrógeno gaseoso, la oxidación anaerobia de amonio (ANAMMOX), ni la adsorción de especies al material de empaque. Lo anterior puede estar relacionado con la falta de información cuantitativa en la literatura sobre estos últimos mecanismos de transformación, o bien a las bajas tasas de transformación que se han registrado experimentalmente en comparación con otros mecanismos de transformación, y que para efectos prácticos los investigadores deciden despreciar.

Esto refleja que a pesar de que las diferentes rutas de transformación y remoción de nitrógeno son comprendidas de forma aislada, aún no hay un entendimiento integral del ciclo del nitrógeno dentro de humedales artificiales; ni sobre cómo es que estos mecanismos se llevan a cabo de forma simultánea; ni cómo es que las diferentes especies de microorganismos coexisten.

Tabla 9. Mecanismos de transformación de nitrógeno utilizados en las investigaciones

Autor	Mayo y Bigambo, 2005	Howell et al., 2005	McGehan et al., 2005	Howell et al., 2005	Liu et al., 2005	Hafner y Jewel, 2006	Tunçsiper et al., 2006	Chan et al., 2008	Akratos et al., 2009	Wang et al., 2009	Sklarz et al., 2010
Amonificación											
Nitrificación											
Desnitrificación											
Fijación											
ANAMMOX											
Volatilización											
Adsorción											
Sedimentación											
Asimilación											
Descomposición											
Regeneración											

Es importante destacar que en el caso de Akratos *et al.* (2009), no se describe en ningún momento las rutas de transformación consideradas para generar su modelo, pues entrenan a la RNA a partir de datos experimentales y posteriormente, las ecuaciones de diseño propuestas se centran en la remoción de nitrógeno total y en la búsqueda de una relación numérica con la remoción de amonio. A pesar de que los resultados de los modelos sugieren que es un modelo útil para el sistema estudiado, no se hace mención del marco conceptual del cual partieron para desarrollar las ecuaciones de diseño.

El trabajo con el mayor número de mecanismos de transformación involucrados en el modelo ha sido el de Mayo *et al.* (2005), quienes además sustentaron la inclusión de estos mecanismos a través de un complejo modelo conceptual que describe las transformaciones del nitrógeno dentro del humedal artificial en el que basaron su modelo (Diagrama 3). A través de pruebas experimentales estimaron las tasas de transformación de cada mecanismo (Tabla 12). Al respecto, es importante destacar que estas tasas de transformación no reflejan la tasa total de nitrógeno removido. Con base en el modelo conceptual previamente citado es posible ejemplificar el valor real de nitrógeno acumulado en el material de empaque, esto es: por un lado la sedimentación actúa como un mecanismo de remoción de nitrógeno orgánico a través del cual las partículas más pesadas se depositan en el sustrato, pero de manera simultánea los microorganismos que conforman la bio película adherida al sustrato, se encargan de transformar parte del nitrógeno orgánico depositado, en nitrógeno amoniacal -descrito en el modelo como desorción-. Basta hacer un balance de masa sencillo únicamente para la cantidad de nitrógeno que permanece en el sustrato y es posible estimar que la tasa real de remoción de nitrógeno del agua para el mecanismo de sedimentación $0.12 \text{ gN/m}^2\text{d}$.

En contraste Tunçsiper *et al.* (2006) se concentraron en representar la nitrificación como el mecanismo principal para reducir la concentración de nitrógeno amoniacal en las aguas residuales. A pesar de que la remoción de nitrógeno total puede no ser tan alta para este modelo matemático, algunos autores se concentran en transformar especies tóxicas en otras menos nocivas para la vida.

Tabla 10. Tasas de transformación de nitrógeno (gN/m²d) para Mayo y Bigambo (2005)

Mecanismo de transformación	Tasa de transformación [gN/m ² d]
Sedimentación	0.872
Regeneración	0.752
Desnitrificación	0.436
Nitrificación	0.425
Asimilación en tejidos vegetales	0.297
Descomposición	0.140
Mineralización	0.007

Tomando en cuenta que la regeneración es un proceso a través del cual el nitrógeno sedimentado en forma de nitrógeno orgánico se reincorpora al agua en forma de nitrógeno amoniacal, adquiere relevancia efectuar el balance de masa, que permite apreciar que la remoción real de nitrógeno del agua a través de la sedimentación es de 0.12 gN/m²d. En términos reales de remoción de nitrógeno, el mecanismo con la mayor eficiencia fue la desnitrificación con 0.436 gN/m²d.

7.1.3. Ecuaciones de los modelos matemáticos

En cuanto a valores de correlación y tipo de ecuaciones utilizadas por los autores revisados, se generó una tabla (Tabla 9) en la que se consolidó la forma general de la ecuación utilizada en cada trabajo, así como el valor de correlación obtenido durante el estudio.

Tunçsiper *et al.* (2006) plantea su modelo de regresión múltiple en función del pH y del tiempo de residencia hidráulico, mientras Chan *et al.* (2008) lo plantea en función del tiempo de residencia hidráulico, concentración de oxígeno disuelto, temperatura del sistema y demanda bioquímica de oxígeno del influente. La toma de decisiones sobre las variables de las que dependerá la eficiencia en la remoción de contaminantes puede venir de información encontrada en la literatura, o de análisis de sensibilidad. Este último es un análisis estadístico que consiste en utilizar el modelo matemático generado y previamente calibrado con datos experimentales y observar el cambio en los resultados después de hacer incrementos o decremento en los valores de las variables independientes.

Tabla 11. Ecuaciones generales de los modelos matemáticos estudiados

	Variables	Modelos estudiados	Tipo de ecuación	Correlación [R ²]
Liu et al. 2005	Y1=N-Org Y2=N-NH ₃ ⁻ Y3=N-NO ₃ ⁻	Balace de masa con reacción cinética de primer orden para reactores agitados en serie	$V \frac{dY_i}{dt} = Q (Y_i)_{in} + r_{Y_i} V$	0.53** 1.3** 0.31**
Mc Gechan et al. 2005	Y1=N-NH ₃ ⁻ Y2=N-NO ₂ ⁻ Y3=N-NO ₃ ⁻ Y4=N-Org	Balace de masa para reactor de flujo pistó con reacción de primer orden	$Y_{ijk} = Y_{i,j-1,k-1} - \Delta Y_{i,j,k} + (1 - v_k) \times \Delta Y_{i-1,j,k} + \delta Y_{i,j,k} - \delta Y_{i,j,k+1}$	NE NE NE NE
Mayoet al. 2005	Y2=N-org Y1=N-NH ₃ ⁻ Y3=N-NO ₃ ⁻ Y4=N-sustrato Y5=N-plantas	Balace de masas para reactor de flujo pistón	$V \sum_{j=1}^m (r_{Y_i})_j + Q_{in} Y_{i_{in}} = Q_{out} Y_i + v \frac{dY_i}{dt}$	0.61
Tunçipeet al. 2006	Y1=N-NH ₃ ⁻ Y2=N-org Y3=N-NO ₃ ⁻	Modelo de regresión multivariable Cinética de primer orden	$Y_{i_{out}} = f(Y_{i_{in}}, pH, TRH)$ $Y_{i_{out}} = Y_{i_{in}} e^{(-k_1 t)}$	NE Y1=0.67 Y2=0.73 Y3=0.84
Chanet al. 2008	N-NH ₃	Modelo de regresión multivariable Cinética de primer orden Balace de masa para reactor por lotes	$(N-NH_3^-)_{out} = f((N-NH_3^-)_{in}, TRH, OD, T, DBO_{in})$ $(N-NH_3^-)_{out} = (N-NH_3^-)_{in} \exp(-kt)$ $V \frac{dN-NH_3}{dt} = Q(N-NH_3^-)_{in} - Q(N-NH_3^-)_{out} + r_{Y_i} V$	0.74 0.79 0.92

	Variables	Modelos estudiados	Tipo de ecuación	Correlación [R ²]
Akratos <i>et al.</i> 2009	Nitrógeno total	Red neuronal artificial 1	NE	0.53
		Red neuronal artificial 2	NE	0.69
	Nitrógeno total	Ecuación de diseño	$R_{TN} = \frac{TRH}{\left[TRH + \left(\frac{22.8}{T} \right) 45.5 \left(\frac{n}{1-n} \right)^3 \right]}$	0.47
	N-NH ₃ ⁻	Ecuación de diseño	$R_{NH_3} = 1.61 R_{TN} - 0.54$	0.42
Wang <i>et al.</i> 2009	Y1=N-Org	Sistema no lineal de cuatro ecuaciones	$\frac{dY_1}{dt} = \frac{1}{THR} (Y_{1in} - Y_1) - d_p Y_4 - r_a Y_1$	NE
	Y1=N-NH ₃ ⁻		$\frac{dY_1}{dt} = \frac{1}{THR} (Y_{2in} - Y_2) - r_a Y_1 - r_n Y_2 - r_v Y_2 - r_{p1} Y_4$	NE
	Y3=N-NO ₃ ⁻		$\frac{dY_3}{dt} = \frac{1}{THR} (Y_{3in} - Y_3) - r_n Y_2 - r_d Y_3 - r_{p2} Y_4$	NE
	Y4=N-plantas		$\frac{dY_4}{dt} = r_{p1} Y_4 + r_{p2} Y_4 - d_p Y_4$	NE
Sklarz <i>et al.</i> 2010	Y1=N-NH ₃ ⁻ Y2=N-NO ₂ ⁻ Y3=N-NO ₃ ⁻ Y4=TSS Y5=DBO _s Y6=DBO _d	Balance de masa para reactor completamente agitado	$v \frac{dY_i}{dt} = Q (Y_i)_{in} + r_A V$	Y1= 0.50* NE Y2= 0.59* Y3= 0.45* Y4= 0.38* Y5= 0.35*

* El análisis de correlación se levó a cabo a través del método de índice modificado de correlación (IMC)

** Error cuadrático medio de tres HA

Nomenclatura de tabla 11

Índices		Subíndices	
Y	Concentración	in	influyente
TRH	Tiempo de retención hidráulico	out	efluente
k	constante cinética de primer orden	i	especie de N
t	tiempo de residencia	j	intervalo de tiempo
OD	oxígeno disuelto	k	posición
DBO	demanda bioquímica de oxígeno	s	suspendido
V	volumen del sistema	d	disuelto
Q	flujo volumétrico	TN	nitrógeno total
r	constante de reacción	NH ₃	nitrógeno amoniacal
R	remoción		
n	porosidad		
δ	Transporte difusivo		

Sklarz *et al.* (2010) desarrollan un modelo que simula un humedal artificial de flujo vertical con recirculación utilizando el balance de masa para reactores completamente agitados. La forma en la que se operan este tipo de sistemas es: para un lote de agua residual que permanece bajo tratamiento un tiempo de residencia hidráulico determinado, existe un flujo continuo de recirculación –en este caso medido en relación al cambio en la altura del líquido en el tanque, por hora (m/h)- proveniente del fondo del tanque que es alimentado a la parte superior del sistema y que por gravedad recorre el material de empaque teniendo contacto con los microorganismos que componen la biopelícula. Los autores proponen despreciar el efecto de la desnitrificación en el sistema, pues asumen condiciones de saturación de oxígeno en el agua debido al régimen de flujo en el que opera el HA. Un aspecto relevante es que a través de un análisis de sensibilidad al modelo, este estudio analiza el impacto que tiene la modificación de las condiciones de operación en la remoción de contaminantes del sistema. En general, los resultados arrojan que en corto tiempo (1h de TRH) la capacidad de remoción de contaminantes es especialmente sensible a los cambios en el flujo de recirculación y en el volumen de agua tratado, pero a mayores tiempos de residencia, estas modificaciones son menos evidentes. Los resultados de esta investigación también señalan que no hubo una diferencia significativa en la remoción de nitrógeno amoniacal y de nitratos entre

los HA con plantas y los HA sin plantas. El flujo de recirculación que se consideró óptimo para la remoción de contaminantes en este tipo de HA, fue de 1.5 m/h.

Por otro lado, Akrotos *et al.* (2009) proponen el uso de redes neuronales artificiales (RNA), en específico el método de percepción multicapa (MLP), como un método matemático para predecir la remoción de nitrógeno total de aguas residuales. Se probaron dos RNA, en las que el número de variables consideradas para desarrollarlas fueron diferentes. La primer RNA (1), consideró como variables la capacidad hidráulica del humedal, llamada porosidad por los autores, referida a la cantidad de agua que puede entrar al sistema a través de los espacios vacíos existentes entre el material de empaque y el rizoma vegetal; la temperatura del agua residual de entrada; y el tiempo hidráulico de residencia dentro de los sistemas. Estas variables fueron seleccionadas a través de un análisis de componentes principales (PCA), el cual consiste en comparar, utilizando datos experimentales, los factores que reportan el mayor impacto en el desempeño del HA. Por otro lado, la segunda RNA (2) probada, incorporó variables relacionadas con las condiciones del entorno del HA, a partir de los siguientes datos: mes del año, humedad del aire, presión barométrica, flux de energía solar, velocidad del viento y precipitación. Los factores de correlación arrojados para la RNA (1) y la RNA (2) fueron 0.53 y 0.69 respectivamente. Estos resultados están asociados a la inclusión de un mayor número de parámetros que -como se revisó en capítulos anteriores- están relacionados con la eficiencia de las diferentes rutas de transformación del nitrógeno dentro de los HA. Además de utilizar RNA, Akrotos *et al.* (2009) proponen una ecuación de diseño para encontrar los valores óptimos de TRH y porosidad del HA (espacio vacío entre material de empaque y rizoma vegetal) para la remoción de nitrógeno total y nitrógeno amoniacal. Los valores de correlación entre los datos arrojados por la ecuación de diseño para nitrógeno total y nitrógeno amoniacal fueron 0.47 y 0.42 respectivamente.

Howell *et al.* (2005) desarrollaron un modelo matemático denominado *Algoritmo para transformaciones de nutrientes en humedales artificiales* (CWANT, por sus siglas en inglés), en el cual consideraron un arreglo secuencial de reactores completamente agitados. El humedal del que obtuvieron datos experimentales para calibrar y validar el modelo es un humedal de flujo superficial de grandes dimensiones (18,925 m³/d).

En el modelo propuesto los autores destacan la inclusión de ecuaciones de crecimiento y asimilación de nutrientes a través de las algas, como un componente fundamental para modelar los mecanismos de transformación de nitrógeno en HAFS; así como ecuaciones para estimar la concentración de oxígeno disuelto dentro del sistema. Al final, los resultados reflejaron una remoción de nitrógeno total cercana al 41%. Dentro de las conclusiones de la investigación destacan la importancia de las estaciones del año como factores limitantes o estimulantes de la asimilación de nitrógeno por parte de algas y plantas dentro del HA.

Chan *et al.* (2006) generaron tres modelos matemáticos con el fin de predecir la concentración de nitrógeno amoniacal del efluente al variar las condiciones de operación del humedal artificial.

- El primer modelo se caracteriza por la aplicación de una regresión multivariable, donde la concentración del efluente es una función de la concentración inicial de amonio en el agua, el tiempo de residencia hidráulico, la temperatura en el sistema y la demanda bioquímica de oxígeno.
- En el segundo modelo, se utilizó una ecuación cinética para reacciones de primer orden; en éste, a través de datos experimentales y una herramienta de modelamiento matemático se estimaron las constantes cinéticas para la descomposición del amonio. Cabe destacar, que utilizando este modelo la descripción del sistema no incluye factores como la temperatura, la concentración de oxígeno disuelto y la demanda bioquímica de oxígeno que - como se mencionó en capítulos anteriores- son determinantes para la transformación del amonio en el sistema.
- El tercer modelo utilizado, se caracteriza por la aplicación de la ecuación de balance de masa para un reactor por lotes, en el que se incluyen términos matemáticos que representan la transformación microbiológica del nitrógeno amoniacal -a través de la ecuación de Monod- y la fijación de esta sustancia en los tejidos vegetales -mediante la ecuación de Michaelis-Menten- así como la concentración de oxígeno disuelto, el tiempo de residencia hidráulico y la temperatura dentro del sistema. Los valores de correlación (R^2) entre los datos arrojados por los modelos y los datos experimentales para el modelo de

regresión multivariable, el de cinética de primer orden y el de balance de masa son 0.74, 0.75 y 0.92 respectivamente. De esta forma es posible apreciar que en la medida en la que los modelos matemáticos incluyen una mayor cantidad de factores hidráulicos, biológicos y cinéticos, la aproximación a los valores reales es mayor.

Hafner y Jewell(2006) proponen un modelo predictivo de remoción de nitrógeno y fósforo en función de la asimilación de estos nutrientes por algas y microorganismos suspendidos en el agua que fluye dentro del HA, además de su proceso de descomposición. En general desarrollan una propuesta muy detallada para describir el crecimiento, reproducción y muerte de algas, algo no muy común en los otros modelos estudiados. Sin embargo, una de las principales conclusiones a la que los autores llegan es la falta de representación de los demás mecanismos de remoción y transformación de nutrientes; que se ve reflejado en resultados predictivos no muy cercanos a los datos experimentales. Ellos plantean sin embargo, que estas ecuaciones desarrolladas pueden ser un aporte adicional para los modelos ya existentes.

Por otro lado, Tunçsiper *et al.* (2006) también comparan los resultados de un modelo de regresión multivariable y otro de cinética de primer orden con datos experimentales, pero incluyen las reacciones de nitrificación, desnitrificación y amonificación como las rutas de transformación y remoción de nitrógeno amoniacal, nitratos y nitritos. Además del número de especies nitrogenadas estudiadas, una diferencia significativa con el modelo de regresión multivariable propuesto por Chan *et al.* (2008), consiste en que los factores considerados como condicionantes de la remoción de especies nitrogenadas del influente son el pH, la concentración de especies en el influente y el tiempo de residencia hidráulico; dejando fuera la concentración de oxígeno disuelto en el sistema, la temperatura y la demanda bioquímica de oxígeno del influente.

En el caso de Wang *et al.* (2009), el enfoque estuvo dirigido hacia los efectos de las estaciones del año y la concentración de nitrógeno en el influente, en la remoción de nitrógeno total en los humedales artificiales y la correlación con el modelo de simulación de ese sistema. En la Tabla 10 se puede apreciar que las mayores tasas de remoción se obtuvieron para el humedal que operó a una menor concentración

inicial de nitrógeno. Asimismo, la mayor discrepancia entre los valores arrojados por el modelo de simulación y los resultados experimentales ocurrieron en el caso del humedal artificial que operó con una mayor concentración de nitrógeno en el influente.

Tabla 12. Porcentaje de remoción de NT para Wang *et al.* (2009)

Concentración inicial de nitrógeno	Estación del año	Experimentación [%]	Modelo Matemático [%]
HA I 15mgN/L	Primavera	59.47	53.20
	Verano	90.73	87.00
	Otoño	93.67	92.73
	Invierno	92.20	91.20
HA II 30 mgN/L	Primavera	41.40	31.67
	Verano	68.53	73.23
	Otoño	72.60	74.23
	Invierno	40.13	41.40

7.1.4. Discusión de los modelos revisados

Los marcos conceptuales en los que basaron el desarrollo de los modelos no fueron expuestos en todos los casos, y las mayores similitudes que se encontraron fueron en la explicación de las reacciones de amonificación y nitrificación. Sin embargo no en todos los casos se tomó en cuenta el componente microbiológico como un factor importante en el desarrollo de estos modelos, y únicamente cuatro de los diez trabajos revisados (Mayo y Bigambo, 2005; Wang *et al.*, 2009; Sklarz *et al.*, 2010; Chan *et al.*, 2008) se incluyeron parámetros como la tasa de crecimiento de los microorganismos, o la tasa de rendimiento máximo de transformación que se ha observado en estas especies, a pesar de que sí existen valores en la literatura. Este es probablemente un aspecto importante en el que trabajos posteriores dedicados a la descripción del ciclo del nitrógeno en HA podrían profundizar.

En los trabajos revisados se registraron valores de constantes cinéticas muy variables. Una razón importante para lo anterior es la temperatura, ya que las reacciones químicas son muy dependientes a esta condición ambiental. De igual

forma, las características de cada modelo, así como del sistema experimental pueden generar diferencias importantes en el momento de la calibración de los modelos, obligando a que las constantes cinéticas que en algún momento pudieron ser investigadas en la literatura, tengan que ajustarse para obtener una mejor correlación con los datos experimentales.

Se encontraron dos modelos cuyos objetivos se orientaron a la descripción del flujo del nitrógeno en HA (Liu *et al.*, 2005 y Wang *et al.*, 2009), en los que se caracterizaron un mayor número de mecanismos de remoción (siete y seis respectivamente), y el número de parámetros requeridos para su operación fue significativamente elevado (más de 15 parámetros) respecto de los utilizados en los modelos empíricos (alrededor de 7 parámetros). Sin embargo, los valores de correlación encontrados para estos modelos son menores a los obtenidos a través de los modelos empíricos. Esto puede deberse al gran número de parámetros que es necesario estimar.

Se identifica un reducido número de propuestas para generar ecuaciones de diseño con un enfoque hacia las aplicaciones prácticas, que aporte ecuaciones para la toma de decisiones en la construcción de HA con alta eficiencia en la remoción de compuestos nitrogenados. Una recomendación para el futuro es avanzar en el desarrollo de modelos matemáticos ligados a una propuesta de diseño.

El tiempo hidráulico de residencia fue señalado como el criterio de operación con mayor influencia en la eficiencia de los HA. Esto está asociado al tiempo en el cual el agua permanece en contacto con la biopelícula adherida al sustrato y, simultáneamente, a la disponibilidad de oxígeno disuelto en el sistema. En consecuencia, es recomendable construir curvas de respuesta utilizando los modelos generados, para establecer los valores de remoción de compuestos nitrogenados en función del TRH, para procurar mayores índices de remoción.

7.2. Recomendaciones para generar nuevos modelos que simulen el ciclo del nitrógeno en HAFSS

Waingwright *et al.* (2004) proponen una metodología que distingue cuatro etapas en el proceso de construcción de modelos matemáticos: 1^a. Establecer los límites de tiempo y espacio; 2^a. Gestar el modelo; 3^a. Desarrollar el modelo; 4^a. Probar el modelo; 5^a. Comparar y validar el modelo matemático.

Adaptando este algoritmo para la simulación de las transformaciones de compuestos nitrogenados en humedales artificiales de flujo subsuperficial, se propone la siguiente metodología para orientar y facilitar la generación de nuevos modelos matemáticos. El Diagrama 2 representa este algoritmo, en el cual se pueden apreciar los pasos a seguir cuando se desea desarrollar un modelo matemático

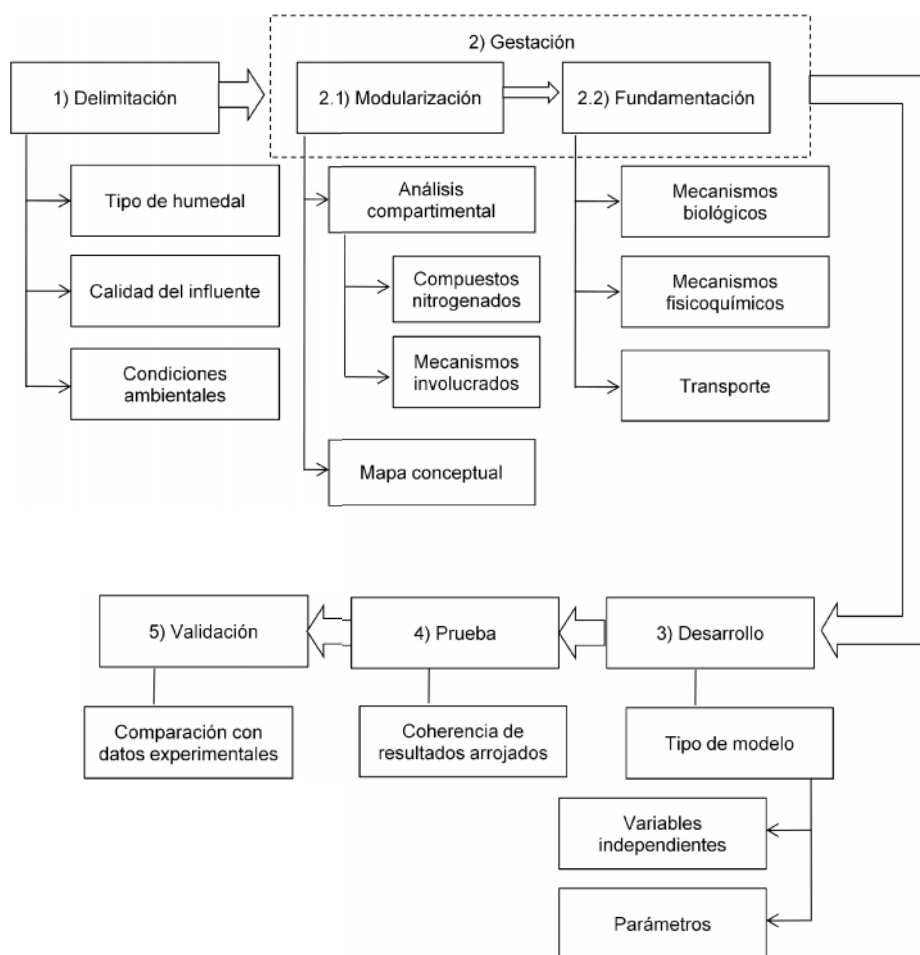


Figura 8. Propuesta de algoritmo para generar modelos matemáticos que simulen el flujo del nitrógeno en HAFSS

- 1) Delimitar el problema. Esta etapa consiste establecer límites claros de tiempo y espacio, que permitan delimitar los alcances del modelo. Es aquí donde se debe definir el tipo de HA que se busca representar, la calidad del agua que se desea tratar y las concentraciones medias de los diferentes compuestos de nitrógeno contenidos en ésta; también se deben describir las condiciones ambientales bajo las cuales operará el sistema. Como se mencionó anteriormente, no se han desarrollado aún suficientes modelos que simulen las transformaciones del nitrógeno dentro de HA de flujo vertical. Esta situación es una convocatoria para que se desarrollen más sistemas que operen en este régimen de flujo, y que además se desarrollen expresiones matemáticas que los representen adecuadamente.

- 2) La siguiente etapa de gestación, consiste en la creación del marco conceptual que sustentará el modelo. Este segundo paso está conformado por dos subetapas:
 - Etapa de modularización del sistema, que consiste en crear un mapa mental de los procesos que ocurren dentro de él en forma de módulos o compartimentos más pequeños y de solución más sencilla. Una forma de representar ciclos de transformación en un sistema, consiste en la delimitación de los compartimentos que lo integran; un compartimento se define a partir de la materia que se transforma de forma homogénea (Liu *et al.*, 2005), lo que se ilustra con cada una de las especies de nitrógeno (amonio, nitratos, nitritos, nitrógeno gaseoso) que están presentes dentro de un HA, entre las cuáles suceden procesos de transformación continua de unas en otras. En el mismo sentido, un sistema de compartimentos se define como aquella estructura conformada por dos o más compartimentos que intercambian materia a través de los correspondientes procesos de transformación. Como ejemplo podemos mencionar las representaciones que se hacen del ciclo del nitrógeno, en el que sus diferentes especies se transforman. En esta etapa es fundamental plantear los compuestos nitrogenados que serán estudiadas por el modelo, pues esto definirá la profundidad de la etapa de fundamentación. En la revisión previa hubo autores que únicamente desarrollaron modelos para evaluar la variación en

las concentraciones de amonio, y hubo otros que tomaron en cuenta dos o más compuestos nitrogenados. El análisis de compartimentos permite traducir a una forma esquemática un sistema que puede resultar difícil de comprender de forma abstracta.

- La etapa de fundamentación, donde se buscan los principios fundamentales que explican cómo es que los compartimentos intercambian materia entre sí, esclareciendo la ciencia detrás de cada ellos. Durante esta etapa es importante buscar información sobre los mecanismos asociados a las transformaciones de las especies nitrogenadas que se incluyeron en el análisis de compartimentos, así como todos los factores que afectan la eficiencia de transformación de cada uno de los mecanismos. La revisión arrojó que aún hay un amplio campo de generación de conocimiento sobre la representación matemática de las reacciones microbiológicas, y su incorporación a modelos matemáticos.
- 3) Una vez concluida la etapa de gestación del modelo, es posible proceder a desarrollarlo. Para ello se eligen las expresiones matemáticas más adecuadas que permitan alcanzar los objetivos definidos en la etapa de delimitación del problema. Esta etapa es importante pues define la complejidad del modelo. En esta etapa se podrán elegir las ecuaciones que permitirán llevar a cabo la simulación del HA. Se pueden elegir el tipo de ecuaciones que se mencionaron previamente, tomando en cuenta las limitaciones o ventajas de cada una. Para desarrollar un modelo que permita incrementar el conocimiento en materia del flujo del nitrógeno en HA, es recomendable plantear ecuaciones de balance de masa que contemplen además de cinéticas de primer orden, la influencia de los microorganismos en el proceso.
 - 4) Al concluir el desarrollo del modelo, es necesario probarlo y asegurarse de que los resultados son coherentes con el sistema que se está representando, es decir, que el modelo arroje resultados coherentes. Se puede hacer uso de información obtenida en la etapa de fundamentación para recibir orientación sobre el tipo de comportamiento esperado de los datos arrojados por el modelo. Para un modelo que simula la transformación compuestos nitrogenados en HA,

la fase de prueba del modelo debe arrojar datos que al graficarlos muestren por un lado, que la concentración de amonio tiene una tendencia a decaer, mientras que la de nitratos a incrementarse y luego decaer.

- 5) La etapa de validación es la última y consiste en comparar los resultados teóricos generados a través del modelo, con resultados experimentales reales. Una vez que existe una correlación aceptable entre ellos -esta magnitud es muy variable y dependerá del criterio de los autores del modelo- se puede establecer si el modelo matemático está listo para aplicarse o no.

8. CONCLUSIONES

En los primeros capítulos se presentaron conceptos fundamentales para entender el presente trabajo, como son la definición de un HA, sus componentes, y los mecanismos a través de los cuales se remueven contaminantes de las aguas residuales.

Posteriormente se introdujo al nitrógeno como contaminante y los mecanismos de transformación de nitrógeno en HA, el papel que el componente vegetal, el sustrato y los microorganismos juegan en este ciclo. También se señalaron los criterios de operación que favorecen la eficiencia de cada una de las reacciones. Con lo anterior, se buscó generar un marco de referencia al alcance de quienes deseen proponer nuevos modelos matemáticos para contribuir a la mejor orientación de esa tarea.

Se definió el panorama actual en materia de modelos matemáticos que simulan las transformaciones y remoción de nitrógeno en HA, mostrando que la mayoría de los trabajos desarrollados han sido de carácter empírico, con objetivos orientados a la predicción de tasas de remoción de nitrógeno y enfocados en la simulación de HAFH. Los mecanismos más representados fueron la amonificación o mineralización y la nitrificación. En ninguno de los casos se encontraron componentes que representaran procesos de ANAMMOX, fijación de nitrógeno gaseoso, adsorción de iones, desnitrificación aerobia, nitrificación parcial y procesos bajo la influencia de NOx. Lo anterior puede obedecer a dos situaciones: que los reportes experimentales refieran tasas de remoción mucho más pequeñas que las correspondientes a los otros mecanismos de transformación; o bien, que la investigación de estas reacciones resulte insuficiente. De igual forma, no se encontraron metodologías similares para plantear los modelos y no todos los trabajos presentan el marco conceptual que les sustenta, haciendo más complicada la caracterización y comparación.

Para los modelos empíricos, se encontraron valores de correlación mayores a 0.5, y se observó que en la medida en la que la ecuación aumentó su complejidad, de modelos de regresión multivariable a ecuaciones cinéticas de primer orden y

después a ecuaciones de balance de masa para reactores ideales, estos valores de correlación se incrementaron ligeramente. Lo anterior puede estar asociado a una mejor caracterización del proceso que se lleva a cabo dentro de los HA. En general, los autores concluyeron que los modelos desarrollados bajo esta clasificación ofrecieron valores útiles para tomar decisiones respecto a la operación de los humedales.

Con la búsqueda, análisis y organización de la información reciente que se ha presentado en éste trabajo, se ha procurado aportar una referencia que contribuya a orientar y facilitar el desarrollo de modelos matemáticos que simulen el flujo del nitrógeno en HA. Un siguiente paso en la revisión de los modelos matemáticos estudiados podría ser el ejercicio en el cual, para un mismo conjunto de datos experimentales, ajeno a cualquier trabajo, se comparara la correlación con los datos teóricos arrojados por cada uno.

Por último, se propuso una metodología para generar nuevos modelos matemáticos que simulen el flujo del nitrógeno, esperando servir como una referencia o guía de procedimientos para aquellos que deseen proponer nuevos modelos matemáticos.

9. BIBLIOGRAFÍA

1. Akrotos C.S., Papaspyros J.N.E. y Tsihrintzis V.A. (2009). *Total nitrogen and ammonia removal prediction in horizontal subsurface flow constructed wetlands: use of artificial neural networks and development of a design equation*. *Biores. Technol.* 100, 586-596
2. Arheimer B. y Wittgren H. B. (2002). *Modelling nitrogen removal in potential wetlands at the catchment scale*. *Ecol. Eng.* 19, 63-80.
3. Atlas R.M. y Bartha B. (2006). *Ecología microbiana y microbiología ambiental*. Pearson Educación S.A. Madrid, España. 661 pp.
4. Bayley M. L., Davison L. y Headley T. R. (2003). *Nitrogen removal from domestic effluent using subsurface flow constructed wetlands: influence of depth, hydraulic residence time and pre-nitrification*. *Wat. Sci. Technol.* 48(5), 175-182.
5. Brisson J. y Chazarenc F. (2009). *Maximizing pollutant removal in constructed wetlands: Should we pay more attention to macrophyte species selection?* *Sci. Tot. Env.* 407, 3923-3930.
6. Brix H. y Arias C.A. (2005). *Danish Guidelines for small-scale constructed wetland systems for onsite treatment of domestic sewage*. *Water Sci. Tech.* 51(9),1-9
7. Caselles-Osorio A. y García J. (2006). *Performance of experimental horizontal subsurface flow constructed wetlands fed with dissolved or particulate organic matter*. *Water Res.* 40, 3603-3611.
8. Chan S.Y., Tsang Y.F., Cui L.H. y Chua H. (2008). *Domestic wastewater treatment using batch-fed wetland and predictive model development for NH₃-N removal*. *Process Biochem.* 43 297-305
9. Chavarría-Hernández J.C. (2001). *Humedales artificiales de flujo vertical: estado del arte y propuestas experimentales para la obtención de parámetros de diseño*. Tesis profesional. UNAM. México, D. F. 133 p.
10. Cooper P. (2005). *The performance of vertical flow constructed wetland systems with special reference to the significance of oxygen transfer and hydraulic loading rates*. *Water Sci. & Technol.* 51 (9), 81-90.
11. Crites R. W., Reed S.C. y Middlebrooks E.J. (2006). *Natural Wastewater Treatment Systems*. CRC Press, 552 pp.

12. De Feo G., Lofrano G. y Belgiorno V. (2005). *Treatment of high strength wastewater with vertical flow constructed wetland filters*. *Wat. Sci. & Technol.* 51 (10), 139-146.
13. Faulwetter J. L., Gagnon V., Sundberg C., Chazarenc F., Burr M. D., Brisson J., Camper A. K. y Stein O. R. (2009). *Microbial processes influencing performance of treatment wetlands: A review*. *Ecolog. Eng.* 34, 987-1004.
14. Fenoglio-Limón, F. E. (2000). *Desarrollo de la ingeniería básica para el diseño de una planta de tratamiento de aguas residuales a base de un humedal artificial de flujo horizontal*. Tesis profesional. UNAM. México, D. F. 107 pp.
15. Forquet, N., Wanko A., Mosé R. y Sadowski A.G. (2009). *Diphasic modelling of vertical flow filter*. *Ecol. Eng.* 35, 47-56.
16. García-García, C.A. (2007). *Determinación de la capacidad máxima de degradación de materia orgánica disuelta empleando reactores empacados experimentales*. Tesis profesional. UNAM. México, D.F. 91 pp.
17. Hafner S. D. y Jewell W.J. (2006) *Predicting nitrogen and phosphorus removal in wetlands due to detritus accumulation: a simple mechanistic model*. *Ecol. Eng.* 27 13-21
18. Hiley P. (1995). The reality of sewage treatment using wetlands. *Wat. Sci. Technol.* 29(4), 329-337.
19. Howell C.J., Crohn D.M. y Mohammad O. (2005) *Simulating nutrient cycling and removal through treatment wetlands in arid/semiarid environments*. *Ecol. Eng.* 25 25-39
20. Kadlec, R.H. y Wallace, S.D. (2009). *Treatment Wetlands*. CRC Press, 2da edición. Boca Ratón, E.U.A. 1016 pp
21. Kincanon R. y McAnally A.S. (2004) *Enhancing commonly used model predictions for constructed wetland performance: as-built design considerations*. *Ecol. Modelling.* 174, 309-322
22. Langergraber G., Giraldi D., Mena J., Meyer D., Peña M., Toscano A., Brovelli A. y Korkusuz, E.A. (2009). *Recent Developments in numerical modeling of subsurface flow constructed wetlands*. *Sci. Tot. Env.* 409, 3931-394.
23. Lee C., Fletcher T. y Sun G. (2009). *Nitrogen removal in constructed wetland systems*. *Eng. Life Sci.* 9(1), 11-22.
24. McGechan M.B., Moir S.E., Sym G. y Castle K. (2005) *Estimating inorganic and organic nitrogen transformation rates in a model of a constructed wetland purification system for dilute farm effluents*. *Biosystems Eng.* 91(1) 61-75

25. Maltais-Landry G., Maranger R., Brisson J. y Chazarenc F. (2009). *Nitrogen transformations and retention in planted and artificially aerated constructed wetlands*. Water Res. 43, 535-545.
26. Mayo A.W. y Bigambo T. (2005) *Nitrogen transformation in horizontal subsurface flow constructed wetlands I: Model development*. Phys. Chem. Earth 30 658-667.
27. Millán S.E. (1999). *Operación de una planta piloto tipo humedal artificial de flujo horizontal para tratamiento de aguas residuales y su reuso para riego*. Tesis profesional. UNAM. México, D. F. 130 pp
28. Miranda-Ríos M. (2000). *Desarrollo situación actual y aplicaciones potenciales de los humedales artificiales de flujo horizontal en México*. Tesis profesional. UNAM. México, D. F. 96 p.
29. Wainwright J. y Mulligan M. (2004). *Environmental modelling: finding simplicity in complexity*. John Wiley & Sons LTD. West Sussex, England, 430 pp.
30. Pérez J., Poughon L., Dussap C.G., Montesinos J.L. y Godia F. (2005). *Dynamics and steady state operation of a nitrifying fixed bed biofilm reactor: mathematical model based description*. Process Biochem. 40 2359-2369.
31. Paredes D., Kusch P., Stange F., Müller R.A. y Köser H. (2007). *Model experiments on improving nitrogen in laboratory scale subsurface constructed wetlands by enhancing the anaerobic ammonia oxidation*. Water Sci. & Technol. 56 (3) 145-150.
32. Ramirez-Carrillo H.F., Luna-Pabello V.M. y Arredondo-Figueroa J.L. (2009). *Evaluación de un humedal artificial de flujo vertical intermitente, para obtener agua de buena calidad para la agricultura*. Revista Mexicana de Ingeniería Química. 8(1), 93-99.
33. Ramírez-Carrillo H. F. (1998). *Desarrollo de la ingeniería básica para el diseño de una planta de tratamiento de aguas residuales a base de un humedal artificial de flujo horizontal*. Tesis profesional. UNAM. México, D. F. 94 pp.
34. Schmidt I., Sliemers O., Schmid M., Bock E., Fuerst J., Kuenen J.G., Jetten M.S.M. y Strous M. (2003). *New concepts of microbial treatment processes for the nitrogen removal in wastewaters*. FEMS Microbiology Review 27, 481-492.
35. Scholten Th., Foekema E.M., Van Dokkum H.P., Kaag N.H.B.M. y Jak R.G. (2005). *Eutrophication Management and Ecotoxicology*. Springer-Verlag. Heidelberg, Alemania. 122 pp.

36. Sklarz M.Y., Gross A., Soares M.I.M. y Yakirevich A. (2010). *Mathematical model analysis of recirculating vertical flow constructed wetlands*. *Water Res.* 44, 2010-2020.
37. Sun G. y Austin D. (2007). *A mass balance study on nitrification and deammonification in vertical flow constructed wetlands treating landfill leachate*. *Water Sci. & Tech.* 56 (3), 117-123.
38. Tam N.F.Y., Wong A.H.Y., Wong M.H. y Wong Y.S. (2009). *Mass balance of nitrogen in constructed mangrove wetlands receiving ammonium-rich wastewater: Effects of tidal regime and carbon supply*. *Ecol. Eng.* 35, 453-462.
39. Tanner C.C., Kadlec R.H., Gibbs M.M., Sukias J.P.S. y Nguyen L.M. (2002). *Nitrogen processing gradients in subsurface-flow treatment wetlands*. *Ecol. Eng.* 18, 499-520.
40. Tao W., Hall K.J. y Duff S.J.B., (2006). *Performance evaluation and effects of hydraulic retention time and mass loading rate on treatment of woodwaste leachate in surface-flow constructed wetlands*. *Ecol. Eng.* 26 (3), 252-265.
41. Tunçsiper B., Ayaz S.Ç. y Akça L. (2006). *Modelling and evaluation of nitrogen removal performance in subsurface flow and free water surface constructed wetlands*. *Water Sci. & Technol.* 53(12) 11-120
42. USEPA (2000). EPA 832-F-00-023. Humedales de flujo subsuperficial. Folleto informativo de tecnología de aguas residuales. Office of Water. United States Environmental Protection Agency. Folleto informativo. Washington D.C. 13pp
43. USEPA. *A handbook of constructed wetlands*. [en línea] <http://www.epa.gov/owow/wetlands/watersheds/cwetlands.html> 26/10/09
44. Vymazal J. y Kröpfelová L. (2005). *Growth of Phragmites Australis and Phalaris arundinacea in constructed wetlands for wastewater treatment in Czech Republic*. *Ecol. Eng.* 25, 606 – 621.
45. Vymazal J. (2005). *Constructed Wetlands for wastewater treatment*. Editorial, *Ecol. Eng.* 23, 475-477.
46. Vymazal J. (2007). *Removal of nutrients in various types of constructed wetlands*. *Science Tot. Env.* 380, 48-65.
47. Wang Y., Zhang J., Kong H., Inamori Y., Xu K., Inamori R., y Kondo T. (2009). *A simulation model of nitrogen transformation in reed constructed wetlands*. *Desalination* 235, 93-101.

48. Wainwright J. y Mulligan M. (2004). *Environmental Modelling: Finding Simplicity in Complexity*. John Wiley & Sons. Londres, Reino Unido. 432 pp.
49. Wanko A., Mose R., Carayrou J. y Sadowski A.G. (2005). Simulation of biodegradation in infiltration seepage-model development and hydrodynamic calibration.
50. Yalkuc A. y Ugurlu A. (2009). *Comparison of horizontal and vertical constructed wetland system for landfill leachate treatment*. *Biores. Technol.* 100, 2521-2526.
51. Zhang C.B., Wang J., Liu W.L., Zhu S.X., Liu D., Chang S.X., Chang J. y Ge Y. (2010). *Effects of plant diversity on nutrient retention and enzyme activities in a full-scale constructed wetland*. *Biores. Technol.* 101, 1686-1692.