

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

DEPARTAMENTO DE ARQUITECTURA DE COMPUTADORES Y AUTOMÁTICA



TRABAJO DE FIN DE GRADO

Código de TFG: ACA06

Monitorización automática de aguas embalsadas mediante embarcaciones autónomas

Automatic monitoring of lentic water using autonomous surface vehicles

Supervisor/es: Gonzalo Carazo Barbero, Eva Besada Portas

Daniel García Calzón

Grado en Física

Curso académico 2024-2025

Convocatoria ordinaria de junio

Calificación: 9.3

Heterogeneidad espacial en un modelo tridimensional mínimo de nutrientes y cianobacterias

Resumen:

Siendo el agua dulce un bien escaso e imprescindible para el consumo humano, las afloraciones masivas de cianobacterias, que pueden producir metabolitos tóxicos para numerosas especies, se convierten en un problema de la salud pública relevante. Para poder anticipar sus efectos nocivos, es conveniente predecir su evolución y monitorizar su estado. Con el primer propósito en mente, en este Trabajo Fin de Grado simularemos su comportamiento en embalses y presas, tomando como punto de partida de un modelo periódico bidimensional para fitoplancton. Se ha ampliado su funcionalidad para el caso tridimensional, incluyendo la existencia de la superficie y el fondo del embalses. También se ha incluido en el modelo el desplazamiento vertical que realizan las cianobacterias a lo largo del día, debido a los cambios de densidad que sufren en función de la luz recibida. Los resultados de la extensión tridimensional, con los límites en el eje vertical, funciona de forma adecuada para embalses de grandes dimensiones, la extensión al desplazamiento vertical debe ser perfeccionada para su correcta interacción con el resto del modelo.

Abstract:

As freshwater is a scarce and essential resource for human consumption, massive blooms of cyanobacteria, which can produce metabolites that are toxic to numerous species, have become a major public health problem. In order to anticipate their harmful effects, it is advisable to predict their evolution and monitor their status. With the first purpose in mind, in this Final Degree Project we will simulate their behavior in reservoirs and dams, taking as a starting point a two-dimensional periodic model for phytoplankton. Its functionality has been extended to the three-dimensional case, including the existence of the surface and bottom of the reservoir. The vertical displacement of cyanobacteria throughout the day, due to their density changes and dependent on their incident light, has also been included in the model. The results of the three-dimensional extension, with the limits on the vertical axis, works adequately for reservoirs of large size; the extension to the vertical displacement must be perfected for its correct interaction with the rest of the model.

Índice

1. Introducción	2
2. Objetivos	2
3. Estudio Preliminar	2
4. Desarrollos Realizados	5
4.1. Desarrollo del Modelo 3D	5
4.2. Condiciones de contorno espaciales	7
4.3. Densidad de las Cianobacterias en Función de la Irradiancia	8
5. Resultados	12
5.1. Modelo 3D Sin Densidades	12
5.2. Modelo 3D Con Densidades	14
5.3. Discusión General	18
6. Conclusión	18
Referencias	20

1. Introducción

El agua dulce es un bien natural muypreciado e imprescindible en nuestro día a día (p.e. para producir energía, hidratarnos, cocinar, mantener la higiene...). Por lo que es importante su almacenaje y tener un buen control de su calidad.

Este trabajo se centra en la simulación, dentro del agua, de la distribución espacio-temporal de unos micro-organismos llamados cianobacterias. Estas bacterias son muy convenientes para la vida en la tierra, ya que al igual que otros seres vivos como plantas y algas, realizan la fotosíntesis para generar sus propios nutrientes a partir de materia inorgánica y producir oxígeno, que es liberado a la atmósfera y permite la vida en la tierra tal y como la conocemos actualmente. El problema es que las cianobacterias también producen compuestos tóxicos para los seres humanos y para otros seres vivos, convirtiendo el agua en la que habitan en no potable. Es por tanto importante el monitorizar su localización y anticipar sus afloramientos masivos en embalses y presas [1], por lo que este Trabajo de Fin de Grado (TFG) contribuiría a este segundo objetivo.

2. Objetivos

El objetivo global de este TFG es obtener, a partir de un modelo dinámico de la distribución bidimensional (en superficie) de fitoplancton, un modelo dinámico de la distribución tridimensional (en toda la masa de agua) adaptado al comportamiento de cianobacterias.

Para alcanzarlo, es necesario alcanzar los siguientes objetivos secundarios:

- Estudiar la física que rige la evolución de los modelos.
- Extender un modelo 2D periódico existente en la literatura al caso 3D periódico.
- Añadir al modelo anterior condiciones contorno que permitan simular la superficie y fondo de un embalse.
- Incluir al modelo físico-matemático el desplazamiento vertical de las cianobacterias.
- Simular los diferentes modelos propuestos y evaluar su funcionamiento.

3. Estudio Preliminar

Las simulación realizadas en este trabajo tienen como base el modelo 2D de tipo Euleriano para fitoplancton presentado en [2], que trabaja con concentraciones en vez del número de organismos y un dominio soportado por un mallado bidimensional. El código en MATLAB de la simulación y el modelo de dicho artículo fue facilitado por los tutores del TFG y traducido a Python como primera aproximación al trabajo. Este modelo 2D replica las interacciones entre nutrientes y fitoplancton (cianobacterias en nuestro caso) a través de una función de respuesta Holling de tipo II [3], usadas en ecología para describir el comportamiento de las interacciones entre cazadores y presas. Las funciones de tipo II se caracterizan por limitar la cantidad de alimento (nutrientes, N) que es capaz de procesar el cazador (cianobacterias, P) en un periodo de tiempo determinado. También incluye otra función Holling tipo II que tiene en cuenta como el zooplancton, también presente en el agua, se alimentan a su vez de las cianobacterias, actuando como un sumidero a un ritmo constante. Estas interacciones vienen descritas en las siguientes ecuaciones diferenciales,

$$\frac{dN}{dT} = I_N - k\mu \frac{N}{H_N + N} P - m_N N, \quad (1)$$

$$\frac{dP}{dT} = \mu \frac{N}{H_N + N} P - f_P \frac{P}{H_P + P}, \quad (2)$$

donde T representa el tiempo, I_N el ritmo de generación de nutrientes (que nunca se acaban para que las cianobacterias no mueran), k la cantidad de nutrientes en las cianobacterias, μ el ritmo máximo de crecimiento de las cianobacterias, H_N y H_P las constantes de semisaturación de los nutrientes y de las cianobacterias, m_N es el ritmo natural de desaparición de nutrientes, y f_P el ritmo máximo de depredación de las cianobacterias por parte del zooplancton a las cianobacterias. Por tanto, las Ecuaciones (1) y (2) nos da la evolución temporal de la cantidad de nutrientes y cianobacterias.

Las unidades de las variables y parámetros involucrados en las ecuaciones anteriores se resumen en la Tabla 1. Manipulándolas conveniente, podemos simplificarlas y reescribirlas utilizando las siguientes dos expresiones adimensionales,

$$\frac{\partial n}{\partial t} = i_n - a \frac{n}{1+n} p - m_n n, \quad (3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{n}{1+n} p - f_p \frac{p}{1+p}, \quad (4)$$

donde $n = \frac{N}{H_N}$, $t = \mu T$, $p = \frac{P}{H_P}$, $i_n = \frac{I_N}{\mu H_N}$, $a = \frac{k H_P}{H_N}$, $m_n = \frac{m_N}{\mu}$, y $f_p = \frac{f_P}{\mu H_P}$.

Por otra parte, la evolución espacial de una concentración φ se puede definir, de forma general [4], mediante la siguiente expresión,

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \nabla(-\mathbf{V}\varphi + \mathbf{D}\nabla\varphi) = \underbrace{-\nabla(\mathbf{V}\varphi)}_{\text{Advección}} + \underbrace{\nabla(\mathbf{D}\nabla\varphi)}_{\text{Difusión}}, \quad (5)$$

donde \mathbf{D} es el coeficiente de difusión ($\text{km}^2/\text{día}$), el término de advección es causado por el campo de velocidades \mathbf{V} del fluido en $\text{km}/\text{día}$ en el que se encuentra la concentración, y el término de difusión está asociado al gradiente $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y})$, en km^{-1} , de la concentración.

En [2], la advección es producida por L remolinos, que generan un campo de velocidades adimensional, en km (solo pudiendo adimensionalizar el tiempo), del fluido calculable como

$$\mathbf{v} = (v_x, v_y) = \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}, -\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \quad (6)$$

Variable	Significado	Unidades
T	Tiempo	día
N	Concentración de nutrientes	g/m^2
P	Concentración de cianobacterias	g/m^2
x, y	Posiciones en cartesianas en el mallado	km
Parámetro	Significado	Unidades
I_N	Ritmo de entrada de nutrientes	$\text{g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{día}^{-1}$
μ	Ritmo máximo de crecimiento de las cianobacterias	día^{-1}
k	Nutrientes en cianobacterias	—
m_N	Ritmo de desaparición de nutrientes	día^{-1}
f_P	Ritmo máximo de alimentación del zooplancton	$\text{g}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{día}^{-1}$
H_N	Constante de semisaturación de nutrientes	g/m^2
H_P	Constante de semisaturación de cianobacterias	g/m^2

Tabla 1: Variables y parámetros de la reacción

a partir de la ecuación de flujo en

$$\psi(x, y) = \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^9 \sigma_l \exp\left(-\frac{(x - x_{l,j})^2 + (y - y_{l,j})^2}{r_l^2}\right), \quad (7)$$

donde $\sigma_l = +1$ o -1 es el sentido, horario y antihorario, de rotación del remolino; $(x_{l,1}, y_{l,1})$, en km, su localización dentro del dominio; r_l , en km, su alcance; y $(x_{l,j}, y_{l,j})$, con $j = 2 : 9$, las 8 direcciones (N, S, E, O, NE, SE, NO, SO) en las que se replica cada remolino para lograr un comportamiento periódico del dominio. Cabe indicar que $\psi(x, y)$ esta en km^2 , hecho que se deduce de la referencia [5], citada en [2].

Conviene resaltar que el cálculo de las velocidades del fluido a partir del campo escalar $\psi(x, y)$ puede realizarse también con una transformación $\psi'(x, y) = -\psi(x, y)$, siempre y cuando se cumpla que su divergencia es nula, ya que en un fluido incompresible la densidad ρ es constante en el tiempo t , por lo que por la ecuación de continuidad (que aparece en las páginas 4 y 5 de [6]) implica que

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) = 0 \quad \implies \quad \nabla \mathbf{v} = 0 \quad (8)$$

Se puede comprobar que la Ecuación (6) cumple esta condición, gracias a la periodicidad espacial tanto en el eje x como en el y . Además, la comprobación de esta condición durante la simulación (que hará uso de primeras y segundas derivadas centrales periódicas de primer orden tal y como se indica en las páginas 45 y 52 de [6]) nos permitirá saber si el campo de velocidades generado es correcto. Los valores numéricos obtenidos serán reescalados con un parámetro v_{max} en km, para poder controlar la velocidad máxima del flujo, siendo también necesario multiplicar por μ para obtener las velocidades en km/día.

El término de difusión se simplifica haciendo que el coeficiente de difusión \mathbf{D} sea una matriz diagonal $\text{diag}(D_r, D_r)$, donde D_r es un valor constante en $\text{km}^2/\text{día}$, tras suponer la misma difusividad para las direcciones laterales x e y . Su valor adimensional será $d_r = \mu D_r$ en km^2 .

Teniendo en cuenta todo lo anterior, se obtienen las ecuaciones de Advección-Difusión-Reacción (ADR) adimensionalizadas, que definen la evolución de las concentraciones adimensionales de nutrientes n y cianobacterias p en el tiempo adimensional t ,

$$\frac{\partial n}{\partial t}(x, y, t) = \underbrace{-n\nabla\mathbf{v} - \mathbf{v}\nabla n}_{\text{Advección}} + \underbrace{d_r \nabla^2 n}_{\text{Difusión}} + \underbrace{i_n - a \frac{n}{(1+n)} p - m_n n}_{\text{Reaccion}}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t}(x, y, t) = \underbrace{-(p\nabla\mathbf{v} + \mathbf{v}\nabla p)}_{\text{Advección}} + \underbrace{d_r \nabla^2 p}_{\text{Difusión}} + \underbrace{\frac{n}{1+n} p - f_p \frac{p}{1+p}}_{\text{Reacción}}, \quad (10)$$

donde los primeros términos del paréntesis deberán tender a 0, debido a la Ecuación (8), y $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ en km^{-2} .

Para realizar las simulaciones se utiliza el método de Runge-Kutta de orden 4 (ver página 165 de [6]), y se multiplican las concentraciones adimensionales de los nutrientes y las cianobacterias por H_N y H_P , revirtiendo la adimensionalización realizadas, para interpretar mejor los resultados.

Además, antes de iniciar la simulación tendremos que asegurarnos de que las condiciones iniciales son adecuadas para que se produzcan oscilaciones en las concentraciones en torno a un punto de

equilibrio estable. Suponiendo derivadas temporales nulas en las Ecuaciones (3) y (4), se tiene que

$$i_n - a \frac{n}{1+n} p - m_n n = 0, \quad (11)$$

$$\frac{n}{1+n} p - f_p \frac{p}{1+p} = 0. \quad (12)$$

Resolviendo el sistema de Ecuaciones (11) y (12) obtenemos tres posibles soluciones o puntos de equilibrio $F_i = (n_i, p_i)$. El primero (F_0 en Ecuación (13)) es trivial F_0 . Los dos restantes, (F_1 en Ecuación (14) y F_2 en Ecuación (15)) vienen de solucionar una ecuación cuadrática.

$$F_0 = \left(\frac{i_n}{m_n}, 0 \right) \quad (13)$$

$$n^2 + \frac{a f_p - i_n - a + m_n}{m_n} n + \frac{a f_p - i_n}{m_n} = 0 \quad \Rightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} F_1 = \left(n_1, \frac{f_p}{n_1} + f_p - 1 \right) \\ F_2 = \left(n_2, \frac{f_p}{n_2} + f_p - 1 \right) \end{array} \right. \quad (14)$$

$$p = \frac{f_p}{n} + f_p - 1 \quad (15)$$

En nuestro caso, usaremos el punto de equilibrio F_1 para ajustar las simulaciones de este TFG. Un estudio más profundo sobre los puntos de equilibrio y el por qué se toma este puede encontrarse en [2].

En los siguientes apartados se explicarán los pasos seguidos durante la elaboración de este trabajo, los modelos físico-matemáticos utilizados y las modificaciones que se han ido haciendo, para finalmente exponer el resultado obtenido y la conclusión final.

4. Desarrollos Realizados

Partiendo del modelo 2D explicado en la sección anterior, en esta sección se desarrolla un modelo 3D, se introducen unas condiciones de contorno en el eje z para eliminar su periodicidad espacial (y de esta forma simular correctamente un embalse teniendo topes en su fondo y superficie), se dota a las cianobacterias de densidad (para reproducir, debido a los cambios de densidad, los desplazamientos verticales que realizan de forma independiente del flujo del fluido), y variaremos estas densidades a lo largo del tiempo en función de la luminosidad del fluido [1].

4.1. Desarrollo del Modelo 3D

La mayoría de los pasos necesarios para convertir el modelo 2D de la sección anterior en un modelo 3D son triviales. Los parámetros que antes usábamos por unidad de superficie pasan ahora a definirse por unidad de volumen, y mantienen su valor. El mallado bidimensional usado en la simulación se convierte en un mallado tridimensional. El coeficiente de difusión sigue siendo constante en todas las direcciones, siendo necesario añadir el valor de la dirección z $\mathbf{D} = \text{diag}(D_r, D_r, D_r)$. Las conversiones necesarias para el modelo completo (ADR) se pueden ver en la Tabla 2. Los pasos para adimensionalizar las variables y parámetros siguen siendo los mismos que para el modelo 2D.

La mayor dificultad se encuentra en la generación del campo de velocidades tridimensional $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$, pues la $\psi(x, y)$ propuesta en [2] solo está definida para planos. Aunque existe en la literatura una forma diferente de generar velocidades del fluido en 3D (véase la función de flujo de Stokes [7]), no queríamos alejarnos de nuestro modelo inicial, que requiere de un medio con agitación turbulenta [5]. Con el objetivo de mantener esta condición, se ha optado por usar 3 funciones de flujo. Para ello, observamos que la $\psi(x, y)$ definida en (7) se puede interpretar como una rotación en torno al eje z . De forma análoga, podemos redefinir sendas funciones para las

Variable	Significado	Unidades
T	Tiempo	día
N	Concentración de nutrientes	g/m^3
P	Concentración de cianobacterias	g/m^3
x, y, z	Posiciones en cartesianas en el mallado	km
Parámetro	Significado	Unidades
I_N	Ritmo de entrada de nutrientes	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{día}^{-1}$
μ	Ritmo máximo de crecimiento de las cianobacterias	día^{-1}
k	Nutrientes en cianobacterias	—
m_N	Ritmo de desaparición de nutrientes	día^{-1}
f_P	Ritmo máximo de alimentación del zooplancton	$\text{g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{día}^{-1}$
H_N	Constante de semisaturación de nutrientes	g/m^3
H_P	Constante de semisaturación de cianobacterias	g/m^3
v_{max}	Velocidad máxima de reescalado adimensional	km
D	Coefficiente de difusión	$\text{km}^2/\text{día}$

Tabla 2: Variables y parámetros en tres dimensiones

rotaciones en torno a cada uno de los dos ejes restantes. De esta forma, podemos definir $\psi_1(x, y, z)$, $\psi_2(x, y, z)$ y $\psi_3(x, y, z)$ como las siguientes funciones de flujo que rotan en torno a los ejes z , y y x .

$$\psi_1(x, y, z) = \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^{27} \sigma_l \exp\left(-\frac{(x - x_{l,j})^2 + (y - y_{l,j})^2}{r_l^2}\right) \implies \mathbf{v}_1 = \left(\frac{\partial\psi_1}{\partial y}, -\frac{\partial\psi_1}{\partial x}, 0\right) \quad \text{Rota eje } z \quad (16)$$

$$\psi_2(x, y, z) = \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^{27} \sigma_l \exp\left(-\frac{(x - x_{l,j})^2 + (z - z_{l,j})^2}{r_l^2}\right) \implies \mathbf{v}_2 = \left(\frac{\partial\psi_2}{\partial z}, 0, -\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\right) \quad \text{Rota eje } y \quad (17)$$

$$\psi_3(x, y, z) = \sum_{l=1}^L \sum_{j=1}^{27} \sigma_l \exp\left(-\frac{(y - y_{l,j})^2 + (z - z_{l,j})^2}{r_l^2}\right) \implies \mathbf{v}_3 = \left(0, \frac{\partial\psi_3}{\partial z}, -\frac{\partial\psi_3}{\partial y}\right) \quad \text{Rota eje } x \quad (18)$$

Esta opción no es totalmente novedosa, ya que existen publicaciones en las que se genera un campo de velocidades a partir de dos funciones de flujo bidimensionales [8]. Las definiciones para el calculo de los campos de velocidad \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 y \mathbf{v}_3 , al igual que para (6), son arbitrarias, pudiendo variar en el signo siempre y cuando cumplan de forma independiente la condición de divergencia nula (8),. Finalmente, se puede calcular como campo de velocidades del fluido como $\mathbf{v} = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_3$, ya que también cumple, tal y como se muestra en la siguiente expresión, que su divergencia es nula.

$$\nabla\mathbf{v}_1 = 0, \nabla\mathbf{v}_2 = 0, \nabla\mathbf{v}_3 = 0 \implies \nabla\mathbf{v} = \nabla(\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_3) = \nabla\mathbf{v}_1 + \nabla\mathbf{v}_2 + \nabla\mathbf{v}_3 = 0. \quad (19)$$

Además, la suma de los campos de velocidades asociados a cada función de flujo hace los L remolinos contribuyan en todas las direcciones. En este caso y para lograr la periodicidad del modelo en las 3 direcciones, es necesario extender de forma periódica el punto original del remolino en las 27 direcciones posibles. Con todo lo anterior finalmente podemos obtener una versión tridimensional para las ecuaciones de ADR para las concentraciones adimensionales de nutrientes (20) y cianobacterias (21).

$$\frac{\partial n}{\partial t}(x, y, z, t) = \underbrace{-n\nabla\mathbf{v} - \mathbf{v}\nabla n}_{\text{Advección}} + \underbrace{d_r\nabla^2 n}_{\text{Difusión}} + \underbrace{i_n - a\frac{n}{(1+n)}p - m_n n}_{\text{Reacción}}, \quad (20)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t}(x, y, z, t) = \underbrace{-(p\nabla\mathbf{v} + \mathbf{v}\nabla p)}_{\text{Advección}} + \underbrace{d_r\nabla^2 p}_{\text{Difusión}} + \underbrace{\frac{n}{1+n}p - f_p\frac{p}{1+p}}_{\text{Reacción}}, \quad (21)$$

4.2. Condiciones de contorno espaciales

Para conseguir unas condiciones no periódicas en el eje z , y poder simular así el fondo y la superficie del embalse, sustituimos el calculo de las derivadas con respecto a la posición z , previamente realizadas mediante una derivada central periódica, por una expresión alternativa que permite imponer la condición de Neumann en las fronteras (i.e. $d\phi/dn = 0$, donde ϕ es una función cualquiera y n el vector normal en la frontera).

Para ello aplicamos las denominadas celdas fantasma (*ghost cells* o *ghost point*, ver páginas 57-58 [6]), de forma que la derivada central en los bordes se calcula como si hubiera una celda más fuera de la frontera con el mismo valor que la adyacente a esta, como si se tratase de un reflejo (i.e. haciendo $\phi[\min - 1] = \phi[\min + 1]$ y $\phi[\max + 1] = \phi[\max - 1]$, de forma que se obtenga el valor 0 en la variable ϕ bajo estudio, debido a la definición de la primera derivada central definición (pág. 45 [6]). En el caso que nos ocupa, esto se traduce en hacer

$$v_z \Big|_{z_{min}} = 0, v_z \Big|_{z_{max}} = 0, \frac{\partial p}{\partial z} \Big|_{z_{min}} = 0, \frac{\partial p}{\partial z} \Big|_{z_{max}} = 0, \frac{\partial n}{\partial z} \Big|_{z_{min}} = 0, \frac{\partial n}{\partial z} \Big|_{z_{max}} = 0, \quad (22)$$

donde $z \in [z_{min}, z_{max}]$ en km, siendo el fondo $z_{min} < 0$ y $z_{max} > 0$ la superficie en nuestro modelo. Las segundas derivadas (pág. 52 [6]) también deben tener esta celda extra en su calculo para mantener la coherencia. Aquí nos surge otro problema, porque el aplicar esta derivada a la hora obtener \mathbf{v} no es válido, ya que las terceras componentes de las velocidades no son obtenidas mediante la derivada en z en las Ecuaciones (17) y (18). Por lo que para obtener velocidades nulas en la frontera del eje z , hemos invertido las posiciones en z y las rotaciones del eje x e y de los remolinos que se encuentran en los dominios superiores e inferiores, produciendo así el mismo efecto del reflejo de las celdas fantasma, evitando saltos bruscos de velocidad, y manteniendo a su vez todas las condiciones anteriores.

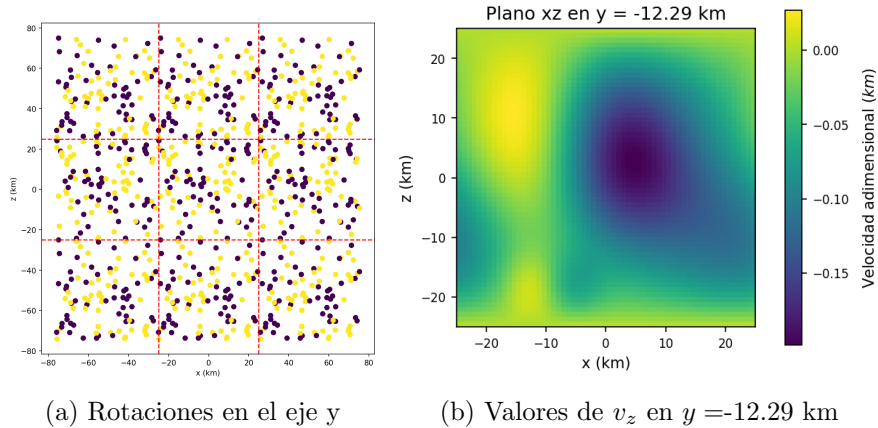


Figura 1: Aplicación de las condiciones de contorno.

En la Figura 1a podemos observar las posiciones de los remolinos para el plano $x-z$, utilizando un color diferente para representar cada sentido de rotación en el eje y . En ella se puede apreciar el reflejo con respecto a las líneas horizontales, siendo el dominio original el que se encuentra en el centro de la figura. La figura 1b nos muestra los valores dimensionales de la velocidad en la componente z (v_z) en $y = -12.29$ km, donde podemos apreciar los valores cercanos a 0 en para la superficie en $z_{max} = 25$ km y $z_{min} = -25$ km, viendo como además se mantiene la periodicidad para v_z en el eje x .

4.3. Densidad de las Cianobacterias en Función de la Irradiancia

Las densidades son añadidas como una dimensión extra en la simulación, por lo que habrá que modificar las Ecuaciones ADR (20) y (21) para incorporarla, solo siendo necesario adimensionalizar algunas definiciones del desarrollo de este apartado. En esta caso se encuentra la densidad celular ρ_{cell} en kg/m^3 , siendo su adimensionalización $\rho_{cell}^{adim} = \rho_{cell} \cdot \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \cdot \frac{1}{H_P}$. De la misma forma se debe adimensionalizar $d\rho_{cell}^{adim}$, paso importante para el cálculo de las integraciones y derivadas centrales de la densidad.

Por una parte, las cianobacterias en la naturaleza se agrupan formando colonias, por lo que se ha de distinguir entre las densidades celulares ρ_{cell} y las densidades de las colonias ρ_{colony} . Ambas densidades se encuentran relacionados por la siguiente expresión,

$$\rho_{colony} = \rho_{cell} n_{cell} (1 - n_{gas}) + \rho_{muc} (1 - n_{cell}), \quad (23)$$

donde n_{cell} y n_{gas} son las proporciones de la colonia formada por células y gas respectivamente, y ρ_{muc} la densidad del mucílago, otra sustancia que compone las colonias [1].

La densidad de la colonia ρ_{colony} es la que usamos para calcular la flotabilidad. Considerando nuestra colonia esférica, por el principio de Arquímedes (ver páginas 394-396 de [9]), el empuje \mathbf{E} que sufre nuestra colonia al estar dentro del fluido es

$$\mathbf{E} = \rho_{H_2O} \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right) \mathbf{g}, \quad (24)$$

donde ρ_{H_2O} es la densidad del agua, R el radio de la colonia, y $\mathbf{g} = (0, 0, -g)$ la aceleración de la gravedad. El empuje \mathbf{E} es contrarrestado (ver páginas 102-103 de [9]) por el peso \mathbf{W} de la colonia

$$\mathbf{W} = m_{colony} \cdot \mathbf{g} = \rho_{colony} \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right) \cdot \mathbf{g}, \quad (25)$$

donde m_{colony} es la masa de la colonia. La misma, durante su desplazamiento vertical sufrirá una fuerza de rozamiento debido a la viscosidad dinámica η del agua, que según la ley de Stokes (páginas 60-61 [10]), se puede definir con

$$\mathbf{F}_r = 6 \pi \eta R \mathbf{v}_{colony}, \quad (26)$$

donde $\mathbf{v}_{colony} = (0, 0, v_{z, colony})$ es la velocidad de desplazamiento de la colonia, que tratándose de un movimiento vertical tendrá solo componente z . Al usar la ley de Stokes estamos suponiendo un número de Reynolds (página 98 [10]) bajo, y por lo tanto un flujo laminar, hecho que comprobaremos más adelante. Finalmente, la colonia está sometida a la fuerza neta

$$\mathbf{F}_{neta} = m_{colony} \cdot \mathbf{a}_{colony} = \mathbf{W} - \mathbf{E} - \mathbf{F}_r = \rho_{colony} \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right) \cdot \frac{d\mathbf{v}_{colony}}{dt} \quad (27)$$

donde $a_{\text{colony}} = \frac{dv_{\text{colony}}}{dt}$ es la aceleración que sufre la colonia. Los signos de las fuerzas se han tomado de forma que la aceleración sea positiva hacia la superficie, en el sentido positivo del eje z .

En la situación de equilibrio en la que la Ecuación (27) se iguale a cero, la velocidad de la colonia v_{colony} es constante y su valor

$$\mathbf{v}_{\text{lim}} = \mathbf{v}_{\text{colony}} \Big|_{\text{equilibrio}} = \frac{2}{9} \cdot \frac{R^2(\rho_{\text{colony}} - \rho_{H_2O})\mathbf{g}}{\eta}. \quad (28)$$

El resultado anterior se le conoce como velocidad límite de Stokes \mathbf{v}_{lim} (páginas 60-61 [10]). Integrando las dos últimas igualdades de la Ecuación (27), obtenemos que la velocidad de la colonia en función del tiempo t se puede obtener con

$$\mathbf{v}_{\text{colony}}(t) = \mathbf{v}_{\text{lim}} \left(1 - \exp\left(-\frac{9\eta}{2R^2\rho_{\text{colony}}}t\right) \right) = v_{\text{lim}} \left(1 - \exp\left(-\frac{1}{\tau_{\text{colony}}}t\right) \right), \quad (29)$$

donde $\tau_{\text{colony}} = 2R^2\rho_{\text{colony}}/9\eta$ es el tiempo de relajación o respuesta, que da cuenta de cuanto tarda colonia en volver al estado de equilibrio tras una perturbación, en nuestro caso las fuerzas que actúan sobre ella. Sustituyendo en esta última expresión los valores de la Tabla 3 (usando $\rho_{\text{colony}} = \rho_{\text{mean colony}}$ como aproximación), se obtiene que τ_{colony} es del orden de 10^{-4} s, pudiéndose, por lo tanto, aproximar $\mathbf{v}_{\text{colony}}(t) = \mathbf{v}_{\text{lim}}$ en la Ecuación (29). Tomando como $\mathbf{v}_{\text{max}} = 0.3$ km [2], se puede calcular la velocidad máxima del fluido $\mathbf{V}_{\text{max}} = \mathbf{v}_{\text{max}} \cdot \frac{1000 \text{ m}}{1 \text{ km}} \cdot \frac{1 \text{ día}}{3600 \cdot 24 \text{ s}} \cdot \mu$ en unidades del Sistema Internacional, y determinar que el número de Stokes [11] es

$$\text{St} = \tau_{\text{colony}} \frac{V_{\text{max}}}{R} = \frac{R \rho_{\text{colony}} V_{\text{max}}}{9 \eta}, \quad (30)$$

es del orden de 10^{-2} . Este valor de St implica que las cianobacterias seguirán las líneas del flujo rodeando posibles obstáculos, por lo que sus colonias no tienen inercia. Volviendo al comentario anterior sobre el número de Reynolds Re (página 98 [10], modificado para nuestro caso), este se puede relacionar con el de Stokes de la Ecuación (30) de la siguiente forma,

$$\text{Re} = \frac{2\rho_{H_2O}V_{\text{max}}R}{\eta} \implies \text{Re} = \frac{18 \rho_{H_2O}}{\rho_{\text{colony}}} \cdot \text{St} \quad (31)$$

obteniéndose que $\text{Re} \approx 0.17 < 1$, lo que justifica el uso de la ley de Stokes para obtener la velocidad límite de la colonia mediante la Ecuación (26). Analizando dicha expresión y teniendo en cuenta que $\mathbf{g} = (0, 0, -g)$, se obtiene la siguiente expresión para la velocidad límite en la dirección z .

$$v_{\text{lim},z} = \frac{2}{9} \cdot \frac{R^2(\rho_{H_2O} - \rho_{\text{colony}})g}{\eta} \quad (32)$$

Símbolo	Nombre	Valor (SI)	Referencia
η	Viscosidad dinámica del fluido (20°C, 1 atm)	0.0010016 Pa · s	[12]
R	Radio de la colonia (10×Radio cianobacteria)	$10 \cdot 5 \times 10^{-6}$ m	[13]
$\rho_{\text{mean colony}}$	Densidad de la colonia (media)	997.5 kg/m ³	[1]
ρ_{H_2O}	Densidad del agua (20°C, 1atm)	998.21 kg/m ³	[12]
g	Aceleración gravitatoria	9.8 m/s ²	–
\mathbf{V}_{max}	Velocidad máxima del flujo	1.73×10^{-3} m/s	[2]

Tabla 3: Valores de las variables de las Ecuaciones (28)-(31) en el Sistema Internacional

Gracias a ella, se puede comprobar que si $\rho_{H_2O} - \rho_{colony} > 0$ entonces $v_{lim,z} > 0$, y la colonia de cianobacterias ascenderá.

La ecuación (32) es la que hay que adimensionalizar, pasando primero de m/s a km/día, y multiplicando a continuación el tiempo multiplicando por μ . Por lo tanto, denotaremos la velocidad límite adimensional como

$$v_{lim,z}^{adim} = v_{lim,z} \cdot \frac{1 \text{ km}}{1000 \text{ m}} \cdot \frac{3600 \cdot 24 \text{ s}}{1 \text{ día}} \cdot \frac{1}{\mu}. \quad (33)$$

Por otra parte, la densidad celular evolucionarán en función de la irradiancia solar que reciba. Para simular esta evolución, obtendremos la irradiancia en la superficie de nuestro fluido I_S en función del tiempo T en días, con la siguiente expresión, cuyos parámetros se encuentran en la Tabla 4.

$$I_S(T) = \max\left(0, (I_{\max} - I_{\text{offset}}) \cdot \sin\left(2\pi \frac{T - T_{\text{noon}}}{T_{\text{day}}} + \pi/2\right) + I_{\text{offset}}\right) \quad (34)$$

Durante la simulación se introducen en la función tiempos adimensionales t , por lo que tanto T_{day} como T_{noon} deberán adimensionalizarse ($t_{\text{day}} = \mu T_{\text{day}}$, $t_{\text{noon}} = \mu T_{\text{noon}}$) para obtener el valor de la irradiancia en superficie en W m^{-2} . Su valor decae a medida que se profundiza en fluido según la ley de Beer–Lambert [1],

$$I(z, t) = I_S(t) \cdot \exp\left(\text{Ki} \cdot \left(z - \frac{z_{\max} - z_{\min}}{2}\right) \cdot 1000\right), \quad (35)$$

donde t ya es el tiempo adimensional, Ki el coeficiente de atenuación de luz (que depende de la longitud de onda y de la composición del material que atraviesa, y cuyo valor, para nuestro caso, se presenta en la Tabla 4), $z_{\max} - z_{\min}$ la longitud vertical, $z_{\max} > 0$ el valor de la superficie y $z_{\min} < 0$ el valor del fondo. La forma del exponente se debe a que introducimos los valores de distancias del eje z en kilómetros.

Con lo anteriormente expuesto, la densidad celular en función de la irradiancia varía según las dos expresiones siguientes,

$$\frac{\partial \rho_{\text{cell}}}{\partial T}(z, t) = \beta \cdot I(z, t) \cdot \exp(-I(z, t)/I_0) + \gamma \quad \text{si } I(z, t) \geq I_{\text{lim}}, \quad (36)$$

$$\frac{\partial \rho_{\text{cell}}}{\partial T}(z, t) = -\alpha \cdot \Delta \rho \cdot H(\Delta \rho) \quad \text{si } I(z, t) < I_{\text{lim}} \quad (37)$$

Parámetro	Descripción	Valor
I_{\max}	Irradiancia máxima	800 W m^{-2}
I_{offset}	Desfase de irradiancia	200 W m^{-2}
T_{day}	Duración del día	1 día
T_{noon}	Hora del mediodía (irradiancia máxima)	0.5 día
Ki	Coeficiente de atenuación de luz	0.5 m^{-1}
β	Factor de normalización	$1.5 \times 10^{-3} \text{ s}^2 \text{ m}^{-3}$
I_0	Irradiancia límite de foto-inhibición	146.43 W m^{-2}
I_{lim}	Irradiancia límite o umbral	5.57 W m^{-2}
γ	Tasa media de cambio en condiciones oscuras	$-8.3 \times 10^{-3} \text{ kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$
α	Tasa de decaimiento de densidad celular	$4.7 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$
C_ρ	Densidad mínima de la célula	1010 kg m^{-3}

Tabla 4: Parámetros del modelo de irradiancia

donde $\Delta_\rho = \rho_{\text{cell}} - C_\rho$, C_ρ la densidad mínima de una cianobacteria y H la función escalón de Heaviside, que devuelve el valor 1 en el caso de $\Delta_\rho \geq 1$ y 0 en caso contrario. Además, para un tiempo adimensional t y una altura z en km obtenemos un valor para la irradiancia I en W m^{-2} , y si esta supera el valor umbral I_{lim} , tendremos que la variación de densidad dependerá de la irradiancia, y en caso contrario, que decrece con el tiempo en función del valor de la densidad celular ρ_{cell} que se trate. Estos dos escenarios nos devuelven $\frac{\partial \rho_{\text{cell}}}{\partial T}$ en unidades de $\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$, siendo este un valor que se ha de adimensionalizar también para poder usarlo en la simulación, mediante $\frac{\partial \rho_{\text{cell}}^{\text{adim}}}{\partial t} = \frac{\partial \rho_{\text{cell}}}{\partial T} \cdot \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ kg}} \cdot \frac{3600 \cdot 24 \text{ s}}{1 \text{ día}} \cdot \frac{1}{\mu \text{HP}}$.

Tras haber desarrollado y adimensionalizado el modelo de la referencia [1], vamos a modificar las ecuaciones de ADR para tener en cuenta las densidades.

Los nutrientes sólo se ven afectados en el término de la reacción,

$$\frac{\partial n}{\partial t}(x, y, z, t) = \underbrace{-n \nabla \mathbf{v} - \mathbf{v} \nabla n}_{\text{Advección}} + \underbrace{d_r \nabla^2 n}_{\text{Difusión}} + \underbrace{i_n - a \frac{n}{(1+n)} p_{\text{int}} - m_n n}_{\text{Reacción}} \quad (38)$$

ya que ahora tenemos cianobacterias con distintos valores de densidades. Por tanto necesitamos contabilizar que todas a la hora de consumir nutrientes integrando con respecto a la densidad $p_{\text{int}}(x, y, z, t) = \int_{\rho_{\text{cell, min}}^{\text{adim}}}^{\rho_{\text{cell, max}}^{\text{adim}}} p(x, y, z, t, \rho_{\text{cell}, \theta}^{\text{adim}}) d\rho_{\text{cell}}^{\text{adim}}$, siendo $\rho_{\text{cell, min}}^{\text{adim}}$ y $\rho_{\text{cell, max}}^{\text{adim}}$ las densidades celulares adimensionales con menor y mayor valor para nuestra simulación, considerando así que las cianobacterias absorben nutrientes a un mismo ritmo, independientemente de la densidad celular.

Para el caso de las cianobacterias, tendremos que pasar de una simulación tridimensional (en la que se tienen en cuenta las velocidades en el espacio tridimensional) a una cuatridimensional (añadiendo la densidad celular). Por lo tanto, en el campo de velocidades de la advección, tendremos que añadir el movimiento vertical que proporcione la velocidad límite de Stokes adimensionalizada para la componente z calculada con la Ecuación (33), y añadir la velocidad con la que cambia la densidad celular adimensional como cuarta componente.

$$\mathbf{v}(x, y, z, \rho_{\text{cell}}^{\text{adim}}, t) = (v_x, v_y, v_z + v_{\text{lim}, z}^{\text{adim}}, \frac{\partial \rho_{\text{cell}}^{\text{adim}}}{\partial t}) \quad (39)$$

También hay que definir una nueva divergencia $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z, \partial/\partial \rho_{\text{cell}}^{\text{adim}})$, siendo únicamente la parte espacial la que tiene unidades (km^{-1}).

Adicionalmente, para el término de la difusión incluimos la difusividad de la densidad D_ρ en $(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})^2 \cdot \text{día}^{-1}$, también constante, siendo el coeficiente de difusión una matriz $\mathbf{D} = \text{diag}(D_r, D_r, D_r, D_\rho)$, que adimensionalizado queda como $\mathbf{d} = \text{diag}(d_r, d_r, d_r, d_\rho)$ siendo $d_\rho = D_\rho \cdot \frac{10^6 \text{ g}^2}{1 \text{ kg}^2} \cdot \frac{10^6 \text{ g}^2}{1 \text{ kg}^2} \cdot \frac{10^6 \text{ m}^2}{1 \text{ km}^2} \cdot \frac{1}{\mu \text{HP}}$.

Tras los cambios anteriormente mencionados, se obtiene la siguiente expresión para la evolución de la concentración de cianobacterias

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t}(x, y, z, \rho_{\text{cell}}^{\text{adim}}, t) = & -p \nabla \mathbf{v} - \mathbf{v} \nabla p && \text{Advección} \\ & + d_r \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) p + d_\rho \frac{\partial^2}{(\partial \rho_{\text{cell}}^{\text{adim}})^2} p && \text{Difusión} \\ & + \left(\frac{n}{(1+n)} p_{\text{int}} - f_p \frac{p_{\text{int}}}{1 + p_{\text{int}}} \right) \frac{p}{p_{\text{int}}} && \text{Reacción} \end{aligned} \quad (40)$$

Al igual que la divergencia, el laplaciano que aparece en el desarrollo de la difusión se ve modificado, convirtiéndose en $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial (\rho_{\text{cell}}^{\text{adim}})^2}$, en km^{-2} para los términos espaciales.

La parte de la reacción también tendrá que integrar las concentraciones de cianobacterias respecto a la densidad para el buen funcionamiento de las funciones tipo Holling [3], siendo necesario en este caso añadir un término para la proporcionalidad p/p_{int} ya que si la concentración es superior a un valor dado, esta contribuirá en mayor medida a la absorción total de nutrientes y tendrá más probabilidades de ser presa del zooplancton. Finalmente, hay que comentar que la condición de divergencia nula (ver Ecuación (19)) solo se debe cumplir para el fluido, no considerando en ella los términos de $v_{lim,z}^{adim}$ y $\frac{\partial \rho_{cell}^{adim}}{\partial t}$. Además, a la hora de establecer las condiciones iniciales de las concentraciones, conviene acercar sus valores a los del punto de equilibrio (Ecuación (14)), teniendo en cuenta para ello el valor de p corresponderá al de todas las densidades (i.e. p_{int}).

5. Resultados

En la sección de los resultados distinguiremos dos partes. En la primera se exponen los resultados del modelo tridimensional sin las densidades, en la que nos centraremos principalmente en la versión con condiciones de contorno aplicadas. Esta decisión se toma porque visualmente son muy similares y la aplicación de las condiciones de contorno tiene mayor interés. La otra parte será del modelo que incorpora las densidades, para el que se presentan pequeñas simulaciones que prueban su compatibilidad con el primer modelo [2], y en el que se usan solo algunas partes de las ecuaciones de ADR en cada prueba. Se realizará también una discusión general de los resultados. Material adicional en GitHub: <https://github.com/DanielGC99-hub/TFG>

5.1. Modelo 3D Sin Densidades

Tanto para la simulación periódica como en la que aplicamos condiciones de contorno en z , se utilizan los los valores de los parámetros de la Tabla 5 que provienen de [2]. Los correspondientes valores de los parámetros adimensionalizados se recogen en la Tabla 6.

Además, el dominio espacial de la simulación será un cubo cuyas dimensiones irán de $x_{min} = y_{min} = z_{min} = -25$ a $x_{max} = y_{max} = z_{max} = 25$ km en todos los ejes (x, y, z), cada eje estará dividido

Parámetro	Significado	Valor
I_N	Ritmo de entrada de nutrientes	$0.00225 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{día}^{-1}$
μ	Ritmo máximo de crecimiento de las cianobacterias	0.5 día^{-1}
k	Nutrientes en cianobacterias	0.01
m_N	Ritmo de desaparición de nutrientes	0.015 día^{-1}
f_P	Ritmo máximo de alimentación del zooplancton	$1.8 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{día}^{-1}$
H_N	Constante de semisaturación de nutrientes	$0.005 \text{ g}/\text{m}^3$
H_P	Constante de semisaturación de cianobacterias	$4.0 \text{ g}/\text{m}^3$
D_r	Coefficiente de difusión	$0.045 \text{ km}^2/\text{día}$

Tabla 5: Parámetros 3D de la simulación

Parámetro	Conversión o Significado	Valor adimensional
i_n	$I_N/(\mu H_N)$	0.9
a	$k H_P/H_N$	8.0
m_n	m_N/μ	0.03
f_p	$f_P/(\mu H_P)$	0.9
d_r	D_r/μ	0.09
v_{max}	Velocidad máxima adimensional	0.3 km

Tabla 6: Parámetros adimensionales

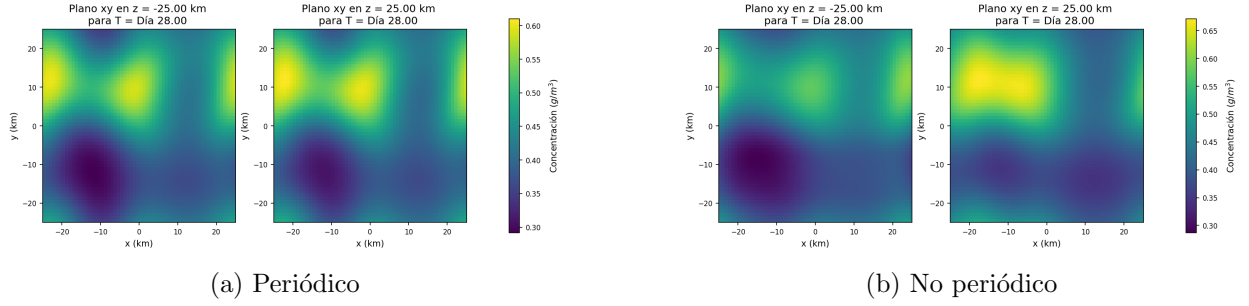


Figura 2: Comparativa Fondo ($z = -25$ km) - Superficie ($z = 25$ km) de las concentraciones de los dos modelos sin densidades

en 60 celdas, constituyéndose un mallado de $60 \times 60 \times 60$ cubos de $0,833 \times 0,833 \times 0,833$ km³ cada uno. Por lo tanto, se usará $dx = dy = dz = 0,833$ km para el cálculo de las derivadas centrales. El campo de velocidad \mathbf{v} lo generan $L = 100$ remolinos. Sus posiciones dentro del dominio $(x_{l,1}, y_{l,1}, z_{l,1})$, sus sentidos de rotación σ_l y sus alcances r_l serán generados de forma aleatoria (pero con una semilla *seed* fija) siguiendo una distribución uniforme dentro del dominio para las posiciones, equiprobable para los sentidos y en el rango $[5, 20]$ km para el alcance. Esta semilla será la misma tanto para la simulación periódica como para la no periódica en z , usando además para esta última la generación del campo de velocidades y las derivadas centrales comentadas en el apartado 4.2.

Las condiciones iniciales para las concentraciones usadas en ambos casos han sido

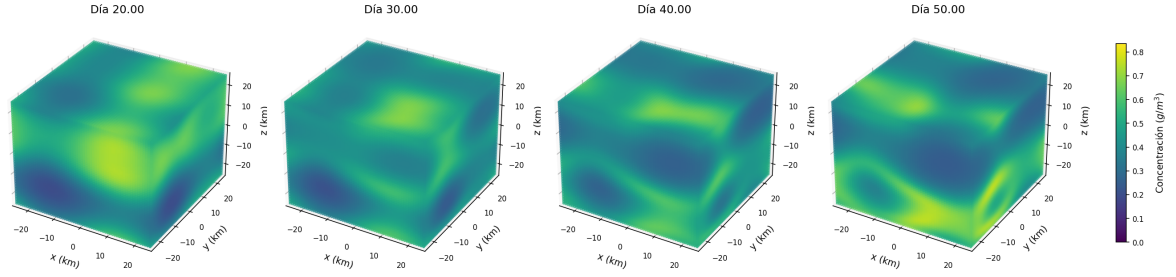
$$P(x, y, z, T = 0) = 2 + A \left(\sin \left(\frac{2\pi x}{x_{\max} - x_{\min}} \right) + \sin \left(\frac{2\pi z}{z_{\max} - z_{\min}} \right) \right), \quad (41)$$

$$N(x, y, z, T = 0) = 2 + A \left(\sin \left(\frac{2\pi y}{y_{\max} - y_{\min}} \right) + \sin \left(\frac{2\pi z}{z_{\max} - z_{\min}} \right) \right), \quad (42)$$

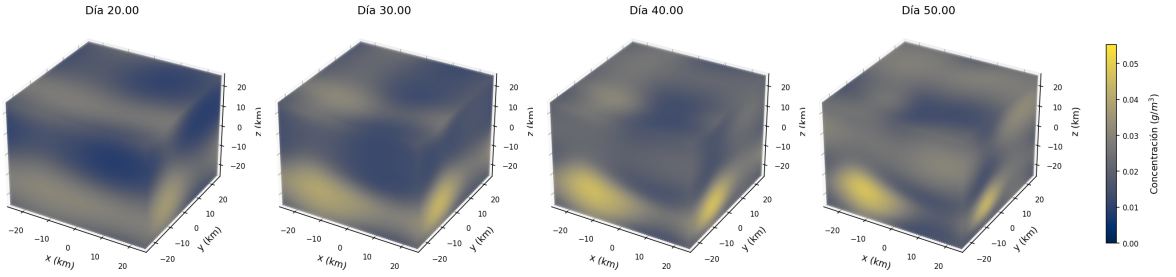
en unidades de g/m³, siendo la amplitud $A = 0.5$. Las condiciones iniciales son adimensionalizadas con la conversión descrita en el modelo 2D, para posteriormente acercar su valor a el punto de equilibrio (14) antes de iniciar la simulación. La simulación que se expone ha sido realizada para un periodo de tiempo de 120 días, con intervalos de tiempo de $dT = 0.1$ día, con valor adimensional $dt = \mu \cdot dT = 0.05$ para la integración por Runge-Kutta de cuarto orden de las ecuaciones ADR adimensionales de las Ecuaciones (20) y (21).

En la Figura 2, se muestran las concentraciones de cianobacterias en los fondos y superficies (planos xy en z_{\min} y z_{\max}) del modelo periódico y no periódico, se puede apreciar como para el mismo instante de tiempo (día 28) de las simulaciones ya hay diferencias en los resultados de ambos modelos (ambos con misma semilla y parámetros). La Figura 1 del apartado 4.2 también pertenece a la simulación del modelo no periódico. El campo de velocidades para el modelo no periódico tiene un valor máximo (valores absolutos) divergencia la divergencia de $\nabla \mathbf{v} = 0.013$ km en unidades adimensionales, notoriamente superior a la del modelo periódico ($\nabla \mathbf{v} = 7.4 \times 10^{-17}$ km), pero no tanto si la comparamos la velocidad máxima del flujo $\mathbf{v}_{\max} = 0.3$ km, y por tanto dando por cumplida la condición de la divergencia nula de la Ecuación 19 en ambos modelos.

En la evolución de la simulación que aparecen de la Figuras 3 y 4, se puede apreciar patrones esféricos que se van repitiendo en posiciones diferentes, observando como las cianobacterias rodean a los nutrientes y se van alimentando de estos hasta que no quedan, quedándose aisladas de los nutrientes que se han ido generando en las otras zonas del dominio donde había menos cianobacterias, para finalmente desaparecer por la falta de nutrientes, que vuelven a aparecer en el hueco dejado, repitiendo el ciclo (oscilación entorno al punto de equilibrio de la Ecuación (14)).

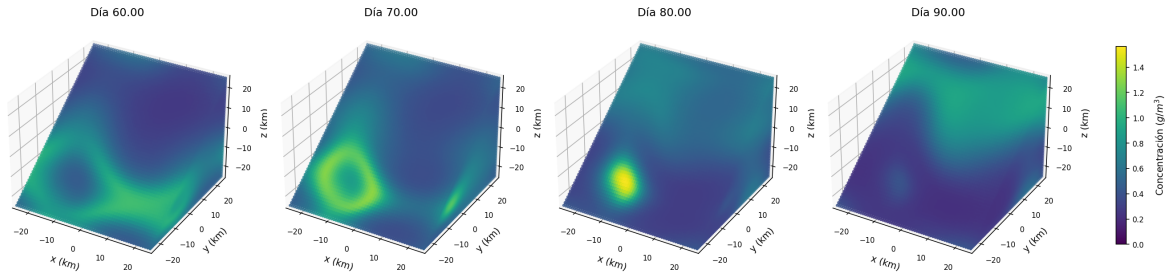


(a) Concentración de Cianobacterias

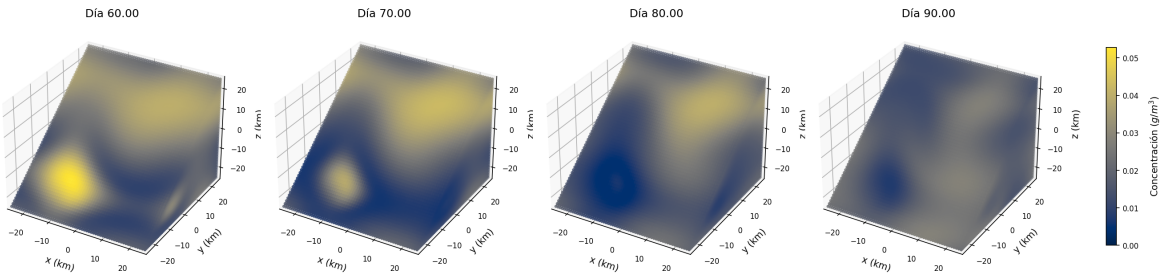


(b) Concentración de Nutrientes

Figura 3: Concentraciones día 20, 30, 40, 50. Modelo No Periódico.



(a) Concentración de Cianobacterias



(b) Concentración de Nutrientes

Figura 4: Concentraciones día 60, 70, 80, 90. Modelo No Periódico. Corte en plano $y - z = 0$.

5.2. Modelo 3D Con Densidades

Se ha usado como base el modelo 3D periódico, con un campo de velocidad generado por $L = 20$ remolinos, con los parámetros adimensionales de la Tabla 6 y como coeficiente adimensional de la difusión de la densidad d_ρ , de forma arbitraria ya que no se usa bibliografía para este parámetro, usamos el mismo valor que para d_r . El dominio es un cubo, con dimensiones entre $x_{\min} = y_{\min} =$

$z_{\min} = -5$ a $x_{\max} = y_{\max} = z_{\max} = 5$ km en todos los ejes (x, y, z) , 20 celdas por eje, y un mallado de $20 \times 20 \times 20$, donde cada pequeño cubo mide $0.5 \times 0.5 \times 0.5$ km³ (dx, dy, dz).

La dimensión que tendrá en cuenta la densidad estará comprendido entre los valores $\rho_{cell, \min} = 1025$ kg/m³ y $\rho_{cell, \max} = 1065$ kg/m³ (de acuerdo con los valores sugeridos en [1]), estando dividida en 20 celdas, cada valor separado por $d\rho_{cell} = 2$ kg/m³. Estos valores se adimensionalizan según las conversiones comentadas en el apartado 4.3. La diferencia para las distintas pruebas que se realizan en este apartado radica en las condiciones iniciales.

Para probar el comportamiento de la difusión se ha usado una concentración inicial de cianobacterias con la distribución gaussiana esférica de la siguiente expresión (páginas 24-25 [14], eliminando la normalización)

$$P(x, y, z, T = 0) = B \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (43)$$

centrada en $(x_0, y_0, z_0) = (0, 0, 0)$, con una amplitud $B = 1.5$ g/m³ y una desviación estándar $\sigma = 2$ km. Además, se trunca su valor a cero cuando el radio de la esfera muestreada es superior a 3 km. Como se puede observar la Ecuación (43) no depende de ρ_{cell} , esto es intencional. Con el objetivo de facilitar el estudio de la difusión en la densidad ρ_{cell} , hacemos que solo las celdas pares de densidad tomen este valor, no teniendo ninguna concentración en las impares (la posición q que ocupa el valor dentro de la dimensión discretizada, $\rho_{cell}[q]$ siendo $q = 0, 1, \dots, \text{celdas} - 1$ en Python). Además, la concentración inicial de nutrientes es

$$N(x, y, z, T = 0) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in [-2,37, +2,37] \text{ km} \\ 2 & \text{resto} \end{cases}$$

Finalmente, durante la simulación, se utiliza la correspondiente adimensionalización, sin ajustar para el punto de estabilidad (14), pasos de tiempo $dT = 0.1$ día y una duración de $T = 80$ días.

En las Figuras 5a y 5b (hay dos figuras para $T = 0$ días, debido a que el visualizador fallaba en representar dos imágenes con concentración 0), se puede observar que para la celda $q = 1$ ($\rho_{cell}[1]$ o [pos.1] encima de la figura) para $T = 0$ días no hay concentración, y en la Figura 5c que para $T = 15$ días, en las mismas posiciones aparece concentración, teniendo más concentración para $y = 0.26$ km al ser el punto más cercano al centro del dominio, y por tanto, donde mayor concentración hay debido a las condiciones iniciales impuestas en la Ecuación 43. También obtenemos un buen comportamiento de las concentraciones de los nutrientes (Figura 6) difundiéndose y manteniendo la periodicidad en x , y de las cianobacterias con $\rho_{cell}[1]$ (Figura 7), con celda impar, que inicialmente tenía una densidad que se ha ido difundiéndose tanto espacialmente como a otras densidades adyacentes (como es el caso de $\rho_{cell}[0]$).

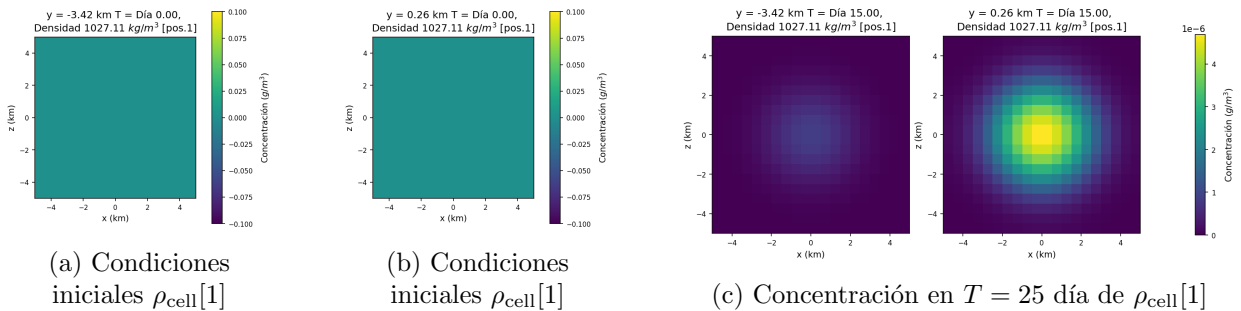
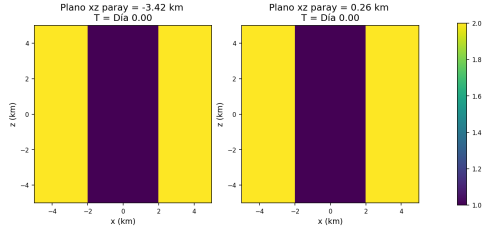
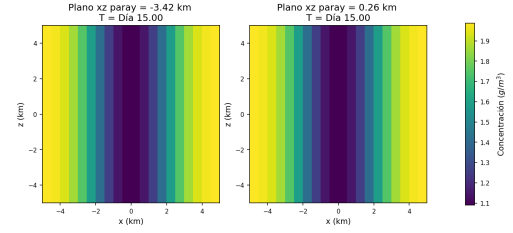


Figura 5: Evolución Concentración P.Densidad impar $\rho_{cell}[1] = 1027.11$ kg/m³ (Prueba Difusión)

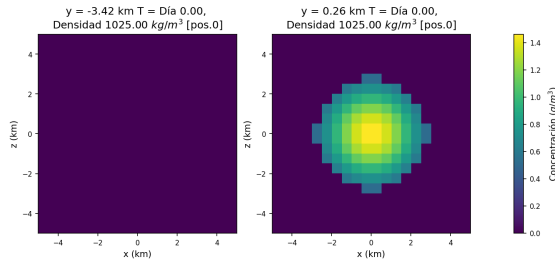


(a) Condiciones iniciales N

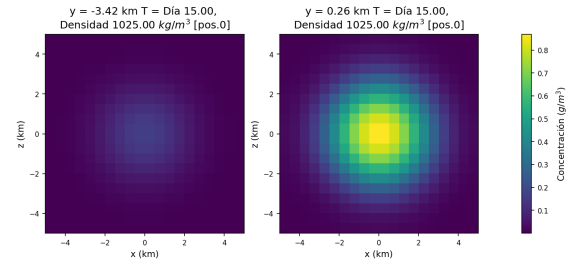


(b) Concentración en $T = 25$ día de N

Figura 6: Evolución Concentración N (Prueba Difusión)



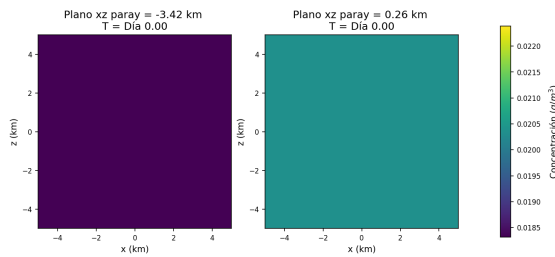
(a) Concentración inicial de $\rho_{\text{cell}}[0]$



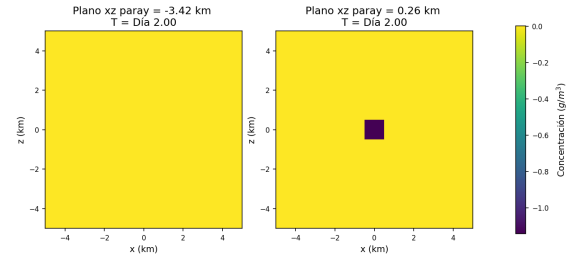
(b) Concentración en $T = 25$ día de $\rho_{\text{cell}}[0]$

Figura 7: Evolución Concentración P. Densidad impar $\rho_{\text{cell}}[0] = 1025.0 \text{ kg/m}^3$ (Prueba Difusión)

Para las pruebas de la reacción, se han usado las mismas condiciones iniciales para las cianobacterias (Ecuación 43), esta vez sin dejar densidades sin concentración. Las concentraciones iniciales de nutrientes son 1 g/m^3 para todo el espacio, esta vez ajustando al punto de estabilidad. Al ser la reacción lo que estamos evaluando es importante ajustar las condiciones iniciales al punto de equilibrio de la Ecuación (14), teniendo en cuenta que para el modelo con densidades se utiliza la integración p_{int} , como se comentó al final del apartado 4.3. Para el aspecto temporal, se utilizando las mismas condiciones anteriores.



(a) Condiciones iniciales N



(b) Concentración en $T = 2$ día de N

Figura 8: Evolución de las Concentraciones de Nutrientes(Prueba Reacción)

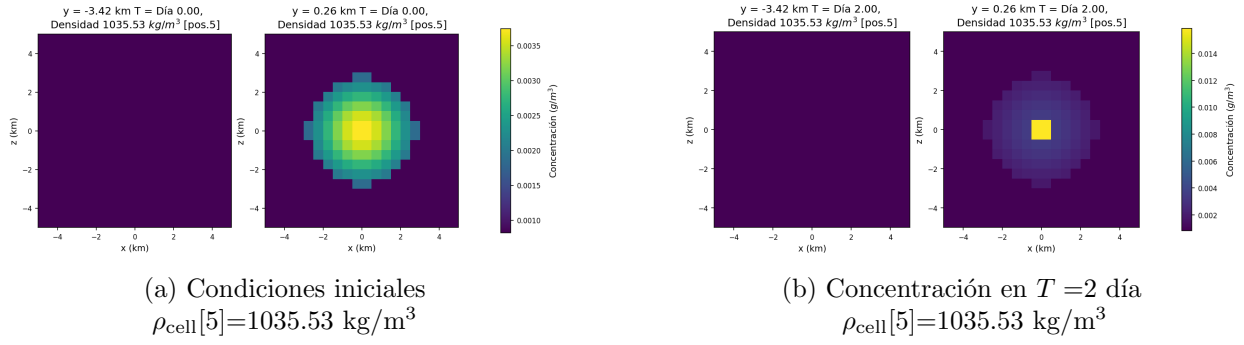


Figura 9: Evolución de las Concentraciones de Cianobacterias (Prueba Reacción)

Como se puede observar para las concentraciones de nutrientes de la Figura 8b, en un corto periodo de tiempo ($T = 2$ días) aparecen concentraciones negativas. Las concentraciones cianobacterias cercanas al centro del dominio que aparecen en la Figura 9a consumen los nutrientes presentes en ese volumen, y acaban apareciendo concentraciones de cianobacterias altas en el centro (Figura 9b), que no hacen más que aumentar con el tiempo ($T > 2$ día), al igual que siguen disminuyendo las de nutrientes.

Para la advección se han usado las mismas condiciones que para reacción, quitando el ajuste al punto de equilibrio, en este caso se han probado varios escenarios que se discutirán más adelante, no habiendo obtenido resultados satisfactorios para la incorporación de las densidades. Sí que se ha podido apreciar el movimiento vertical debido a la velocidad límite (Figura 10), siendo la única contribución al campo de velocidades, tras impedir la aparición de concentraciones negativas, que ocupaban el espacio tras el desplazamiento.

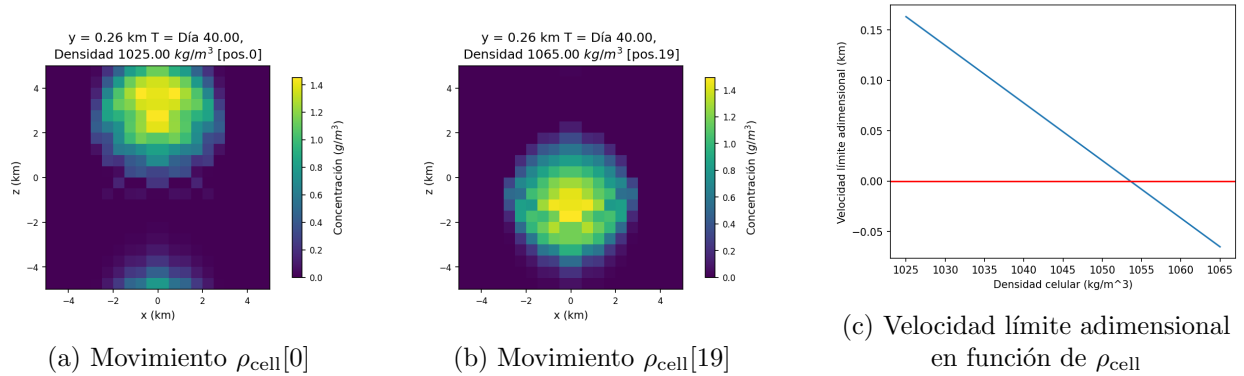


Figura 10: Movimiento vertical de las Cianobacterias (Prueba Advección)

La Figura 10c nos muestra una gráfica que representa la velocidad límite adimensional $v_{\text{lim},z}^{\text{adim}}$ en función de la densidad celular ρ_{cell} (Ecuación (32) con el paso de la Ecuación (23) y con la adimensionalización de la Ecuación (33)). Teniendo la gráfica como referencia, podemos observar como para un tiempo $T = 40$ días, para la menor densidad $\rho_{\text{cell},\text{min}} = \rho_{\text{cell}}[0]$ (Figura 10a) se ha producido un desplazamiento hacia el sentido positivo del eje z de las concentraciones de cianobacterias, y para el caso de mayor densidad $\rho_{\text{cell},\text{max}} = \rho_{\text{cell}}[19]$ (Figura 10b) tenemos el caso contrario de desplazamiento, habiéndose recorrido una distancia menor con respecto a su posición inicial en el centro del dominio para el mismo tiempo $T = 40$ días. La concentración que aparece en la parte inferior de la Figura 10a se debe a la periodicidad del modelo.

5.3. Discusión General

Tras un análisis detallado, se ha llegado a la conclusión de que el principal problema para al añadir densidades se debe incompatibilidad con las unidades de los dos modelos usados. Las distancias del modelo 2D [2] están en km, mientras que las del modelo que estamos usando para añadir las densidades [1] están en metros, lo que supone un problema a la hora de aplicar la ley de Beer-Lambert (Ecuación (35)) para la atenuación de la irradiancia, ya que solo llega a la primera capa del mallado. Si se reducen las dimensiones espaciales y se aumenta el número de cubos en el mallado del modelo base, reduciendo (dx, dy, dz) , las derivadas espaciales dan números demasiado altos debido a su definición (páginas 45 y 52 de [6]). Pasar los parámetros que dependen de la distancia (\mathbf{v}_{\max} y d_r) también genera problemas, esta vez en las ecuaciones de ADR. Probando con las simulaciones pequeñas expuestas en el apartado 5.2, podemos ver que hay partes funcionales. La difusión espacial (Figura 6 y 7) tanto de nutrientes como de cianobacterias se desarrolla adecuadamente al igual que en el modelo 3D sin densidades, y la incorporación de la difusión de la densidad (Figura 5) es también satisfactoria, apareciendo concentración de densidades que no había en las condiciones iniciales. La reacción (Figura 8 y 9) por el contrario, aunque las cianobacterias sí se alimentan de los nutrientes que se encuentran en su posición en las condiciones iniciales, no se produce una evolución con patrones como la que se puede apreciar en el modelo sin densidades. Esto puede ocurrir por varias razones, siendo la más posible por una incorrecta escritura del código de la simulación, o porque el modelo 2D [2] del que parte todo trabajo requiere de un medio con agitación turbulenta [5] que no se estaba proporcionando en la prueba, o porque se haya pasado por alto algún factor de relevancia en el desarrollo de la reacción con densidades del apartado 4.3. El movimiento vertical (Figura 10) producido por la velocidad límite de Stokes (32) es relativamente satisfactorio, ya que aun produciéndose el desplazamiento esperado en el eje z , positivo para aquellas densidades celulares ρ_{cell} que tienen una densidad de colonia ρ_{colony} (calculada con la Ecuación (23)) menor densidad con el agua ρ_{H_2O} (y viceversa en el caso contrario), se ha tenido que poner un tope por la aparición de concentraciones negativas en el espacio que antes ocupaban las cianobacterias.

Si se intenta usar el coeficiente de atenuación de la luz K_i en km (olvidándonos de hacer un modelo realista) y cambiamos la forma del exponente de la Ecuación (35), eliminando el factor 1000, aunque la irradiancia se calcula como si el dominio estuviera en metros, seguimos teniendo problemas con las unidades temporales. En todas las simulaciones se ha usado el número de Courant-Friedrichs-Levy C [15], que permite comprobar (cuando $C \leq 1$) si la relación entre los intervalos temporales y el mallado del dominio es adecuada para las velocidades. Para el modelo con densidades, la expresión toma la forma $C = dT \cdot \mathbf{v}_{\max} \left(\frac{1}{dx} + \frac{1}{dy} \right) + dT \cdot \max(|\mathbf{v}_{\max} + v_{\lim,z}|) \cdot \frac{1}{dz} + dT \cdot \max\left(\left|\frac{\partial \rho_{cell}}{\partial t}\right|\right) \cdot \frac{1}{d\rho_{cell}}$. Usando un intervalo temporal dT en días (como requiere el modelo [2]), C toma un valor superior a 300, ya que $\frac{\partial \rho_{cell}}{\partial t}$ tiene valores adimensionales del orden de 10^6 , muy grande en comparación a las velocidades espaciales (el valor $v_{\lim,z}^{adim}$ alcanza los 0.15 km y $\mathbf{v}_{\max} = 0,3$ km). Si se trabaja en segundos durante la simulación, el tiempo de computo sería enorme, necesitando realizar simulaciones de un único día durante horas.

6. Conclusión

Para el modelo 3D sin densidades podemos concluir que, aunque satisfactorio, los medios generados tienen profundidades excesivas para las dimensiones de lagos y embalses que existen, habiendo probado que fallaba para profundidades del orden de metros. No obstante, se han llevado a cabo simulaciones funcionales y que cumplen con las condiciones matemáticas esperadas.

Por el contrario no se ha conseguido la implementación de densidades a estos modelos. La

simulación completa fallaba, dando valores negativos en las concentraciones, e incluso impidiéndolo de forma forzaba no se ha conseguido obtener buenos resultados, aunque sí algunos avances en apartados como la advección y la difusión.

Con lo anteriormente expuesto, a priori, no parece sencillo compatibilizar los dos modelos ([1] y [2]) de forma realista debido a la diferencia de unidades. Se podría explorar el uso de K_i en km, buscando que las partes del modelo con densidades funcionen por separado. Existiendo también la posibilidad de revertir las adimensionalizaciones del primer modelo, para un mejor entendimiento de la física del problema y una menor fuente de errores al añadir las densidades, y con ello poder llegar a obtener un modelo completo satisfactorio.

Referencias

- [1] G. Carazo-Barbero, E. Besada-Portas, J. L. Risco-Martín, and J. A. López-Orozco, “Ea-based asv trajectory planner for detecting cyanobacterial blooms in freshwater,” in *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference*, ser. GECCO '23. New York, NY, USA: Association for Computing Machinery, 2023, p. 1321–1329. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1145/3583131.3590484>
- [2] H. Serizawa, T. Amemiya, and K. Itoh, “Patchiness in a minimal nutrient — phytoplankton model,” *Journal of Biosciences*, vol. 33, no. 3, pp. 391–403, Sep 2008. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1007/s12038-008-0059-y>
- [3] C. S. Holling, “Some characteristics of simple types of predation and parasitism,” *The Canadian Entomologist*, vol. 91, no. 7, p. 385–398, 1959.
- [4] P. Wesseling, *Principles of Computational Fluid Dynamics*, ser. Springer Series in Computational Mathematics. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2001, vol. 29, pp. 33–34.
- [5] E. Abraham, “The generation of plankton patchiness by turbulent stirring,” *Nature*, vol. 391, pp. 577–580, 02 1998.
- [6] J. H. Ferziger, M. Perić, and R. L. Street, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 4th ed. Springer, 2020.
- [7] G. K. Batchelor, *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1967, pp. 78–79.
- [8] M. S. Greywall, “Streamwise computation of three-dimensional flows using two stream functions,” *Journal of Fluids Engineering*, vol. 115, no. 2, pp. 233–238, 06 1993. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1115/1.2910129>
- [9] D. Halliday, R. Resnick, and J. Walker, *Fundamentals of Physics, Extended*, 10th ed. John Wiley & Sons, 2013.
- [10] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, 2nd ed. John Wiley & Sons, Inc., 2001.
- [11] C. E. Brennen, *Fundamentals of Multiphase Flow*. Cambridge University Press, 2005, p. 327. [Online]. Available: <http://brennen.caltech.edu/INTMult/multbook.pdf>
- [12] E. W. Lemmon, I. H. Bell, M. L. Huber, and M. O. McLinden, “Thermophysical properties of fluid systems,” in *NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69*, P. J. Linstrom and W. G. Mallard, Eds. Gaithersburg, MD: National Institute of Standards and Technology, 2025. [Online]. Available: <https://doi.org/10.18434/T4D303>
- [13] M. T. Madigan, K. S. Bender, D. H. Buckley, W. M. Sattley, and D. A. Stahl, *Brock Biology of Microorganisms*, 16th ed. Harlow, England: Pearson Education Limited, 2021, p. 46.
- [14] C. M. Bishop, *Pattern Recognition and Machine Learning*. New York: Springer, 2006. [Online]. Available: <https://www.microsoft.com/en-us/research/wp-content/uploads/2006/01/Bishop-Pattern-Recognition-and-Machine-Learning-2006.pdf>
- [15] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy, “On the partial difference equations of mathematical physics,” *IBM Journal of Research and Development*, vol. 11, no. 2, pp. 215–234, 1967.