

ASPECTOS TEÓRICOS DE LA MODELACIÓN DE LA CALIDAD DE AGUA EN UN RIO

CI51D Contaminación de Recursos Hídricos

Profesores J. Castillo y C. Espinoza
Semestre Primavera 2005

1. GENERALIDADES

El modelo de simulación está basado en las ecuaciones de variación longitudinal de oxígeno disuelto (OD), demanda bioquímica de oxígeno (DBO) y coliformes fecales (CF), en un curso superficial unidimensional, bajo condiciones aeróbicas, y en un modelo simple de temperatura basado en el concepto de temperatura de equilibrio.

La ecuación fundamental que define las relaciones analíticas entre los diferentes parámetros que utiliza el modelo es la siguiente:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (\epsilon \nabla C) - U \cdot \nabla C + F \quad (1.1)$$

En esta ecuación, C representa la concentración de una sustancia en el agua sujeta a los fenómenos de transporte, (dispersión y advección) y de degradación o reducción. El efecto de la dispersión corresponde al segundo término en la ecuación (1.1), donde ϵ es el coeficiente de dispersión, suponiendo que se cumple la ley de Fick. El efecto de la advección corresponde al tercer término, siendo U la velocidad media del escurrimiento. Finalmente, F corresponde a la fuentes o sumideros que representan los fenómenos de autopurificación, tales como sedimentación, descomposición y reoxigenación, en el caso de la demanda bioquímica de oxígeno y del oxígeno disuelto.

La aplicación de la ecuación (1.1) a la determinación de la distribución longitudinal de DBO y OD en un curso superficial se puede hacer suponiendo que las concentraciones son uniformes en un plano perpendicular al escurrimiento, en un punto dado del curso superficial. Es decir, que sólo existen variaciones significativas de concentración en el sentido longitudinal.

De esta forma, la ecuación (1.1) se puede escribir para un curso de agua en forma unidimensional en función de la distancia orientada hacia aguas abajo, x , como sigue:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \epsilon \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + F \quad (1.2)$$

o bien, para condiciones de equilibrio

$$\epsilon \cdot \frac{d^2 C}{dx^2} - U \cdot \frac{dC}{dx} + F = 0 \quad (1.3)$$

la ecuación (1.3) puede ser aplicada también para definir un modelo de temperatura, según se presenta más adelante.

2. VARIACION DE LA DEMANDA BIOQUÍMICA DE OXÍGENO

Para la aplicación de la ecuación (1.3) al modelo de DBO bajo condiciones aeróbicas se hacen una serie de suposiciones, las que se desarrollan a continuación.

2.1 Pérdida de Materia Orgánica

En este caso se puede identificar la descomposición y sedimentación de la materia orgánica como dos pérdidas o consumo de materia orgánica. En términos de la DBO ambos procesos siguen una ley de primer orden, es decir, son proporcionales a la DBO remanente en cada momento.

$$F|_{DESCOMPOSICION} = \frac{dL}{dt}|_{DESCOMPOSICION} = -k_1 \cdot L \quad (2.1)$$

$$F|_{SEDIMENTACION} = \frac{dL}{dt}|_{SEDIMENTACION} = -k_3 \cdot L \quad (2.2)$$

En estas ecuaciones L representa la demanda bioquímica de oxígeno en el agua (DBO última); k_1 es la constante de desoxigenación en 1/día y k_3 es la constante de sedimentación en 1/día.

2.2 Ganancia de Materia Orgánica

Si existe un aporte a la DBO del agua por resuspensión desde lodos del fondo o por demanda de oxígeno directa desde los lodos, esta puede representarse por una constante.

$$F|_{RESUSPENSION} = \frac{dL}{dt}|_{RESUSPENSION} = p \quad (2.3)$$

en que p es la constante de resuspensión de lodos de fondo en mg DBO/l-día.

2.3 Cambio Neto de la Materia Orgánica

Bajo estas condiciones, la ecuación (1.3) puede escribirse:

$$e \cdot \frac{d^2 L}{dx^2} - U \cdot \frac{dL}{dx} - (k_1 + k_3) \cdot L + p = 0 \quad (2.4)$$

Aplicando como condiciones de borde $L = L_0$ en $x = 0$ se obtiene:

$$L(x) = \left\{ L_0 - \frac{p}{k_1 + k_3} \right\} \cdot \exp(J_1 \cdot x) + \frac{p}{k_1 + k_3} \quad (2.5)$$

en que:

$$J_1 = \frac{U}{2 \cdot e} \cdot \left[1 - \sqrt{1 + \frac{4 \cdot (k_1 + k_3) \cdot e}{U^2}} \right] \quad (2.6)$$

Para la situación en que no existe dispersión ($\varepsilon=0$), la expresión para J_1 se puede reemplazar por la siguiente cantidad:

$$J_1 = -\frac{k_1 + k_3}{U} \quad (2.7)$$

con lo cual la expresión para la DBO queda expresada como:

$$L(x) = \left\{ L_0 - \frac{p}{k_1 + k_3} \right\} \cdot \exp\left(-\frac{k_1 + k_3}{U} \cdot x \right) + \frac{p}{k_1 + k_3} \quad (2.8)$$

3. VARIACION DEL OXÍGENO DISUELTO

Para la aplicación de la ecuación general al modelo de oxígeno disuelto bajo condiciones aeróbicas se realizan una serie de supuestos, los que se describen a continuación.

3.1 Ganancia de Oxígeno

3.1.1 Reoxigenación

La reoxigenación atmosférica es proporcional al déficit de oxígeno disuelto D (ley de reoxigenación de primer orden).

$$F|_{\text{REOXIGENACION}} = \frac{dC}{dt}|_{\text{REOXIGENACION}} = k_2 \cdot (C_s - C) = k_2 \cdot D \quad (3.1)$$

en que C es la concentración de oxígeno disuelto (mg/l), k_2 es la constante de reoxigenación atmosférica (1/día), C_s es la concentración de saturación del oxígeno disuelto (mg/l) y D es el déficit de oxígeno, igual a $C_s - C$.

La constante de reoxigenación k_2 (día⁻¹) se puede estimar en función de diversos parámetros característicos de la corriente. Uno de los modelos más utilizados para este tipo de análisis es el de O'Connor and Dobbins (1958), quienes proponen la siguiente expresión:

$$k_2 = \frac{(D_m \cdot u)^{0.5}}{H^{1.5}} \quad (3.2)$$

donde D_m es el coeficiente de difusión molecular (m²/día), H es la profundidad media del agua (m) y u es la velocidad media de la corriente (m/día). El coeficiente de difusión molecular es igual a:

$$D_m = 213 \cdot 1.037^{T-20} \quad \text{cm}^2/\text{día}$$

3.1.2 Fotosíntesis

El aporte de oxígeno por fotosíntesis se puede representar por un término constante “a”, que se mide en (mg OD/l-día).

$$F|_{\text{FOTOSINTESIS}} = \frac{dC}{dt}|_{\text{FOTOSINTESIS}} = a = a_3 \cdot m \cdot A \quad (3.3)$$

donde a_3 es la tasa de producción de oxígeno por unidad de fotosíntesis algal (mg-OD/mg-Alga), m es la tasa de crecimiento de algal (1/día), y A es la concentración de biomasa de algas en el agua (mg-Alga/l).

3.2 Consumo de Oxígeno

3.2.1 Descomposición de la Materia Orgánica

El consumo de oxígeno por efecto de la descomposición de la materia orgánica queda expresada por la relación de primer orden definida para la DBO.

$$F|_{DESCOMPOSICION} = \frac{dC}{dt}|_{DESCOMPOSICION} = k_1 \cdot L \quad (3.4)$$

donde L representa la demanda bioquímica de oxígeno en el agua (DBO última) y k_1 es la constante de desoxigenación en 1/día.

3.2.2 Consumo de Materia Orgánica de Fondo (bentónica)

El consumo de oxígeno por efecto de la descomposición de la materia orgánica ubicada en el fondo de la corriente queda expresada por una relación de orden cero, definida como sigue:

$$F|_{FONDO} = \frac{dC}{dt}|_{FONDO} = \frac{k_4}{H} \quad (3.5)$$

donde H corresponde a la altura media de la corriente, y k_4 es la tasa de descomposición bentónica ($\text{g/m}^2/\text{día}$).

3.3 Cambio Neto del Oxígeno Disuelto

Bajo estas condiciones la ecuación (1.3) puede escribirse como:

$$e \cdot \frac{d^2 C}{dx^2} - U \cdot \frac{dC}{dx} - k_2 \cdot C + k_1 \cdot L - a + \frac{k_4}{d} = 0 \quad (3.6)$$

Al resolver la ecuación (3.4) junto con la condición de borde $D = D_0$ en $x = 0$ se obtiene:

$$D(x) = D_0 \cdot \exp(J_2 \cdot x) + \frac{k_1}{k_2 - k_1 - k_3} \cdot \left\{ L_0 - \frac{p}{k_1 + k_3} \right\} \cdot \{ \exp(J_1 \cdot x) - \exp(J_2 \cdot x) \} - \frac{1}{k_2} \cdot \left\{ a - \frac{k_4}{d} - \frac{k_1 \cdot p}{k_1 + k_2} \right\} \cdot \{ 1 - \exp(J_2 \cdot x) \} \quad (3.7)$$

en que

$$J_1 = \frac{U}{2 \cdot e} \cdot \left[1 - \sqrt{1 + \frac{4 \cdot (k_1 + k_3) \cdot e}{U^2}} \right] \quad (3.8)$$

$$J_2 = \frac{U}{2 \cdot e} \cdot \left[1 - \sqrt{1 + \frac{4 \cdot k_2 \cdot e}{U^2}} \right] \quad (3.9)$$

Para la situación en que no existe dispersión ($\varepsilon=0$), las expresiones para J_1 y J_2 se pueden por las siguientes cantidades:

$$J_1 = -\frac{k_1 + k_3}{U} \quad (3.10)$$

$$J_2 = -\frac{k_2}{U} \quad (3.11)$$

con lo cual la expresión para el Déficit de Oxígeno Disuelto queda expresada como:

$$\begin{aligned} D(x) = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{k_2}{U} \cdot x\right) + \\ + \frac{k_1}{k_2 - k_1 - k_3} \cdot \left\{ L_0 - \frac{p}{k_1 + k_3} \right\} \cdot \left\{ \exp\left(-\frac{k_1 + k_3}{U} \cdot x\right) - \exp\left(-\frac{k_2}{U} \cdot x\right) \right\} - \\ - \frac{1}{k_2} \cdot \left\{ a - \frac{k_4}{d} - \frac{k_1 \cdot p}{k_1 + k_2} \right\} \cdot \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{k_2}{U} \cdot x\right) \right\} \end{aligned} \quad (3.12)$$

4. MODELO DE TEMPERATURA

La simulación de la temperatura está basada en un modelo muy simple que supone que las pérdidas de calor (o eventualmente el aumento de la temperatura del agua cuando es menor que la temperatura ambiente) son proporcionales a la diferencia entre la temperatura del agua y la temperatura que ésta tendría en estado natural. Esta temperatura natural se denomina temperatura de equilibrio y para efectos prácticos se puede suponer igual a la temperatura media del agua cuando no está sometida a descargas térmicas.

Se puede aplicar la ecuación general (1.1) al caso de la temperatura, suponiendo que existe un sumidero de primer orden y que no existe dispersión. Para el caso en que la temperatura del agua es inferior a la temperatura de equilibrio existe una fuente de primer orden en lugar de un sumidero.

Aplicando estas suposiciones se puede obtener la siguiente ecuación:

$$T(x) = T_E + (T_0 - T_E) \cdot \exp(-K \cdot x) \quad (4.1)$$

en que:

$T(x)$: Temperatura a la distancia x
 T_E : Temperatura de equilibrio
 T_0 : Temperatura en $x=0$
 K : constante de enfriamiento

La constante de enfriamiento se puede expresar como:

$$K = \frac{\lambda}{g \cdot C_p \cdot H \cdot U} \quad (4.2)$$

siendo:

λ : Coeficiente de intercambio de energía
 γ : Densidad del agua
 C_p : Calor específico del agua
 H : Profundidad media del agua
 U : Velocidad media del agua

El parámetro λ adopta valores del orden de $670 \text{ kcal/m}^2 \text{ día } ^\circ\text{C}$, lo que equivale a decir que para un río con velocidad igual a 1 m/s y una profundidad media de 1 m. , K es del orden de 0.008 1/Km . En todo caso K es un parámetro que conviene calibrar con datos de terreno en lugar de estimar a priori.

5. CONCENTRACIÓN DE SATURACIÓN DE OXÍGENO DISUELTO EN EL AGUA

Este es un importante parámetro en todos los modelos de balance de oxígeno. Representa la cantidad máxima de oxígeno disuelto que el agua puede contener y depende de algunas condiciones ambientales. La concentración de saturación es aquella a la cual la tasa de intercambio neto de moléculas de oxígeno en la interfase agua-aire es nula. Diversos autores han determinado su valor en forma experimental, encontrándose que depende fundamentalmente de la temperatura del agua y de la presión atmosférica. Otros parámetros que también influyen en su valor, pero menos importantes, son la salinidad del agua, la humedad del aire y temperatura del aire.

Para este trabajo se adopta la siguiente relación, para la concentración de saturación de oxígeno, C_s , al nivel del mar y la temperatura, T :

$$\ln[C_s] = -139.34410 + \frac{1.575701 \cdot 10^5}{T} - \frac{6.642308 \cdot 10^7}{T^2} + \frac{1.2438 \cdot 10^{10}}{T^3} - \frac{8.621949 \cdot 10^{11}}{T^4} \quad (5.1)$$

En esta relación C_s está expresada en mg/l y T en grados Kelvin ($T(^{\circ}\text{C}) + 273.16$).

Para una presión barométrica diferente a 1 atmósfera, se puede encontrar C_s como:

$$C_s = \overline{C_s} \cdot \frac{p - p_v}{p_{ATM} - p_v} \quad (5.2)$$

siendo:

p : La presión atmosférica

p_{ATM} : La presión correspondiente a una atmósfera

p_v : La presión de vapor del agua a la temperatura del agua

$\overline{C_s}$: Concentración de saturación a una atmósfera

Por otra parte, la presión de vapor, p_v , depende de la temperatura del agua, habiéndose encontrado la relación siguiente, mediante un ajuste por el método de mínimos cuadrados, a los valores entregados por las tablas de uso corriente,

$$p_v(T) = \exp(a \cdot T^2 + b \cdot T + c) \quad (5.3)$$

Donde:

a : -0,0002177444

b : 0,07067217

c : -5,063447

p_v en kg/cm^2

T en grados Kelvin

Además, la presión atmosférica se puede relacionar con la altura, h ; a través de la expresión:

$$p(h) = 1.033 \cdot \exp(-0,000116 \cdot h) \quad (5.4)$$

siendo:

p en kg/m^2

h en metros sobre el nivel del mar

6. COLIFORMES FECALES

Para la aplicación de la ecuación (1.3) al modelo de coliformes fecales se hacen las siguientes suposiciones:

La mortalidad de microorganismos en el curso de agua se produce a una tasa de primer orden, es decir, son proporcionales a la cantidad de microorganismos presentes en cada momento.

$$F|_{MORTALIDAD} = \frac{dN}{dt}|_{MORTALIDAD} = -k_b \cdot N \quad (6.1)$$

En estas ecuaciones N representa la concentración de microorganismos por cada 100 ml. Bajo estas condiciones, la ecuación (1.3) puede escribirse:

$$e \cdot \frac{d^2 N}{dx^2} - U \cdot \frac{dN}{dx} - k_b \cdot N = 0 \quad (6.2)$$

Aplicando como condiciones de borde $N = N_0$ en $x = 0$ se obtiene:

$$N(x) = N_0 \cdot \exp(J_3 \cdot x) \quad (6.3)$$

en que:

$$J_3 = \frac{U}{2 \cdot e} \cdot \left[1 - \sqrt{1 + \frac{4 \cdot k_b \cdot e}{U^2}} \right] \quad (6.4)$$

Para la situación en que no existe dispersión ($\epsilon=0$), la expresión para J_3 se puede reemplazar por la siguiente cantidad:

$$J_3 = -\frac{k_b}{U} \quad (6.5)$$

con lo cual la expresión para los microorganismos queda expresada como:

$$N(x) = N_0 \cdot \exp\left(-\frac{k_b}{U} \cdot x\right) \quad (6.6)$$