

MODELO LINEAL DE BALANCE DE OXÍGENO

por: Jorge Castillo G.

1.- Modelo general para el comportamiento de una sustancia en el agua en un sistema lineal

Previo es necesario introducir dos conceptos que representan los mecanismos básicos de transporte en el agua:

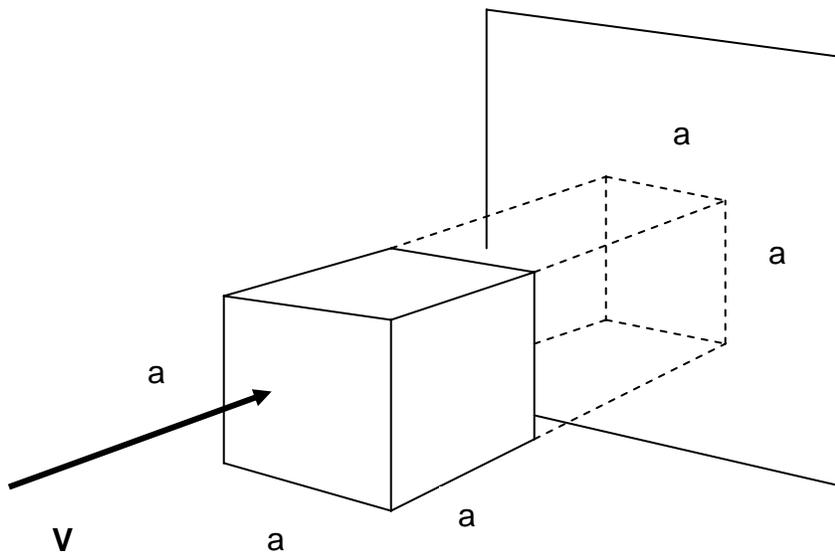
- i) flujo advectivo
- ii) flujo dispersivo

Flujo advectivo

Se refiere al transporte de sustancias disueltas a partículas “con el agua”, es decir mediante el arrastre que producen los desplazamientos netos del agua.

El flujo advectivo, o, la cantidad de sustancia transportada por unidad de superficie y por unidad de tiempo que se mueve en la dirección de la velocidad está dada por

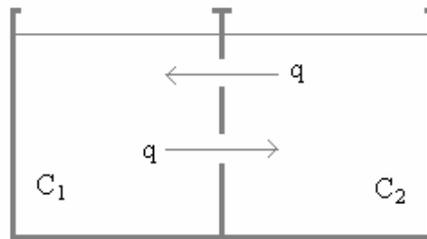
$$\vec{N}a = C(\vec{x}, t)\vec{U}(\vec{x}, t)$$



En la figura, la masa contenida en el cubo, Ca^3 , se demora en pasar por la sección de control, de tamaño a^2 , un tiempo a/V , por lo que el flujo que pasa por ella es de:

$$\vec{N}a = \frac{Ca^3}{a^2 \cdot \frac{a}{V}} = CV$$

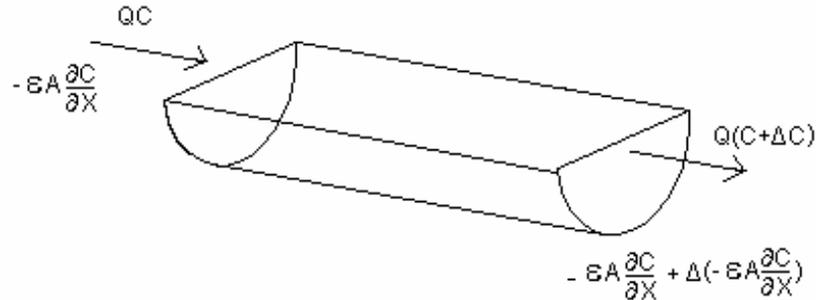
Flujo dispersivo



Se refiere al transporte de sustancias que ocurre independientemente de la existencia de un flujo de agua, por efecto de la superposición de la difusión a nivel molecular y la dispersión turbulenta. En estricto rigor corresponde al flujo advectivo de aquellos componentes del campo de velocidades no incluidas en el modelo hidrodinámico. Normalmente se representa a través de la Ley de Fick, inicialmente establecida para la difusión molecular, que establece que el flujo es directamente proporcional al gradiente de concentraciones, aunque con dirección opuesta a éste.

$$\vec{N}_d = -\epsilon \nabla C(\vec{x}, t)$$

Balance de masas según la figura:



$$M = V\bar{C} = \bar{A}\Delta x\bar{C}$$

$$\frac{dM}{dt} = V \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \bar{A}\Delta x \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = QC - \varepsilon A \frac{\partial C}{\partial x} - Q\left(C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x\right) + \varepsilon A \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon A \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Delta x \pm F \bar{A} \Delta x$$

Dividiendo la ecuación por el volumen $\bar{A}\Delta x$ y haciendo tender Δx a cero, con lo cual las aproximaciones resultan exactas, y $\partial \bar{C} / \partial t$ se hace igual a $\partial C / \partial t$ en x , resulta la ecuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon A \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{Q}{A} \frac{\partial C}{\partial x} \pm F$$

o bien

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon A \frac{\partial C}{\partial x} \right) - U \frac{\partial C}{\partial x} \pm F$$

Si tanto el área transversal como el coeficiente de dispersión longitudinal no dependen de x , la ecuación se puede simplificar a

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} \pm F$$

F representa las “fuentes” o “sumideros” y tiene dimensiones de concentración por unidad de tiempo ($\partial C / \partial t$)

2.- Modelos de balance de oxígeno

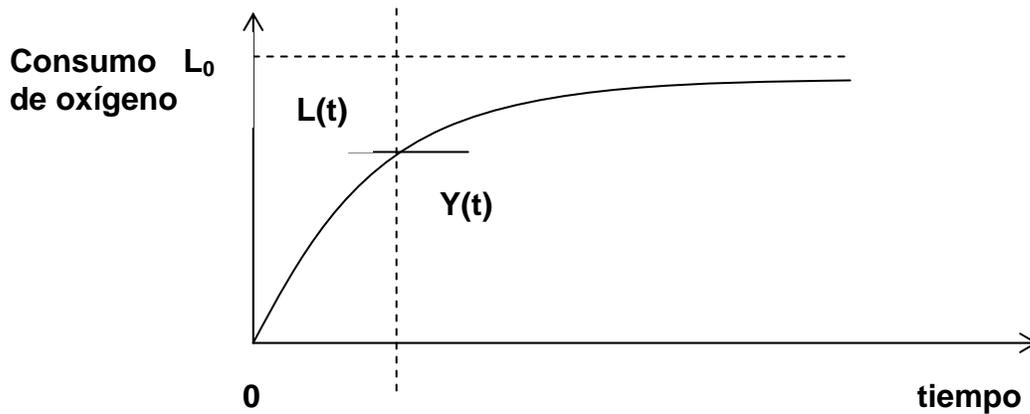
Mecanismos de variación del oxígeno disuelto:

- DBO
- Reoxigenación atmosférica
- Fotosíntesis
- Oxidación de sustancias inorgánicas

DBO

Cinética del proceso (Phelps, 1925)

Ley de primer orden, monomolecular, característica de reacciones enzimáticas



Reacción de Primer Orden

$$\frac{dy}{dt} = \text{velocidad de consumo de oxígeno} = k_1 L$$

k_1 = constante de oxidación bioquímica

$$\frac{dy}{dt} = -\frac{dL}{dt} = k_1 L$$

$$L = L_0 e^{-k_1 t}$$

$$y(t) = L_0 - L = L_0 (1 - e^{-k_1 t})$$

$$k_1 \approx \frac{\frac{\Delta L}{L}}{\Delta t}$$

Efecto de la temperatura

$$k_1(t) = k_1(20^\circ C)(1 + 0,047)^{t-20}$$

$$L_o(t) = L_o(20^\circ C)(1 + 0,02(t - 20))$$

OXIGENO DISUELTO

Concentración de saturación

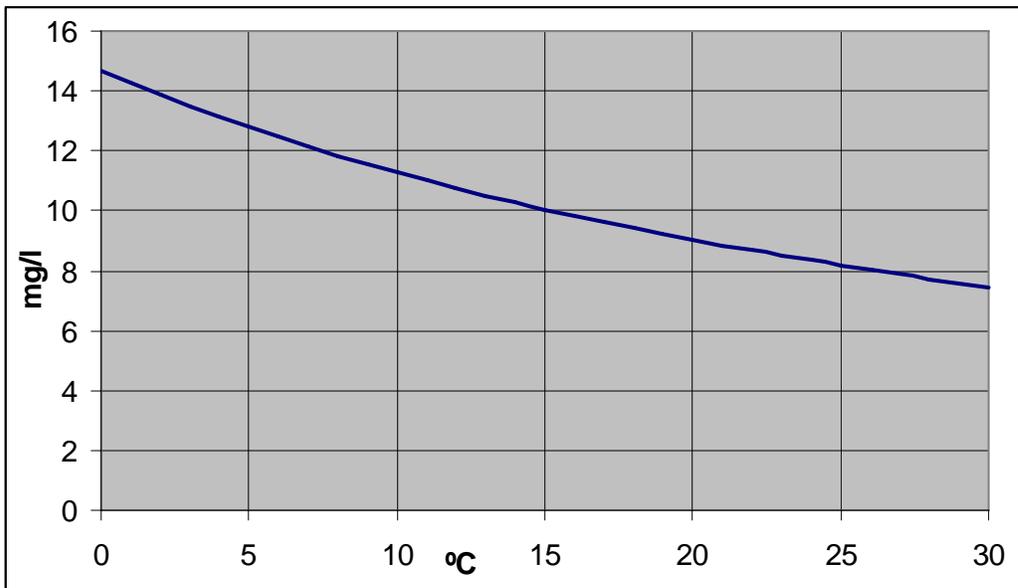
Es la concentración de equilibrio del intercambio molecular con el aire.

$$C_s = C_s(t, P, \text{etc})$$

Efecto de la temperatura

$$C_s = 14,652 - 0,41022t + 0,007991t^2 - 0,000077774t^3$$

Solubilidad del oxígeno en el agua destilada a 1 atmósfera de presión



Efecto de la presión

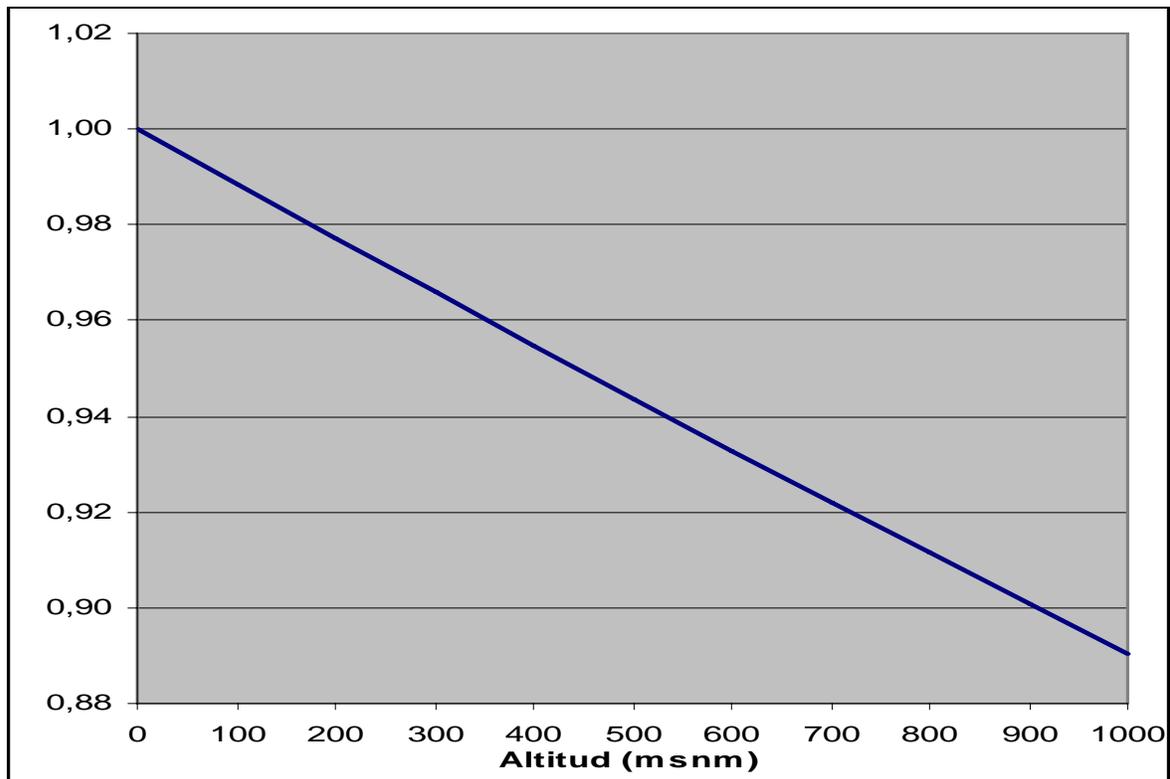
$$C_s = C_s (760 \text{ mm Hg}) \frac{P - p}{760 - p}$$

P es la presión atmosférica

p es la presión de vapor a la temperatura del agua

Para alturas sobre el nivel del mar inferiores a 1.000 metros y temperaturas inferiores a 25°C, p es despreciable frente a P y se puede aproximar C_s como una proporción directa.

Reducción de la solubilidad del oxígeno en el agua destilada con la altitud



Reoxigenación atmosférica

Dobbin (1903)

$$\frac{dC}{dt} = k_2(C_s - C) = k_2 D$$

K_2 : constante de reoxigenación = f (temperatura, agitación, relación superficie de intercambio c/r al volumen del agua)

$D = (C_s - C)$: déficit de oxígeno disuelto

Efecto de agitación

Efecto de geometría

Relaciones empíricas:

O'Connor : $k_2 = 12,9 \frac{U^{1/2}}{H^{3/2}}$

Churchill : $k_2 = 11,6 \frac{U}{H^{1,67}}$

Owens : $k_2 = 12,9 \frac{U^{0,67}}{H^{1,87}}$

En las relaciones anteriores k_2 está en 1/día

U en pies/seg
H en pies

Efecto de la temperatura:

$$k_2 = k_2(20^\circ) (1+0,024)^{T-20}$$

Sobresaturación

Perfil de OD en un río

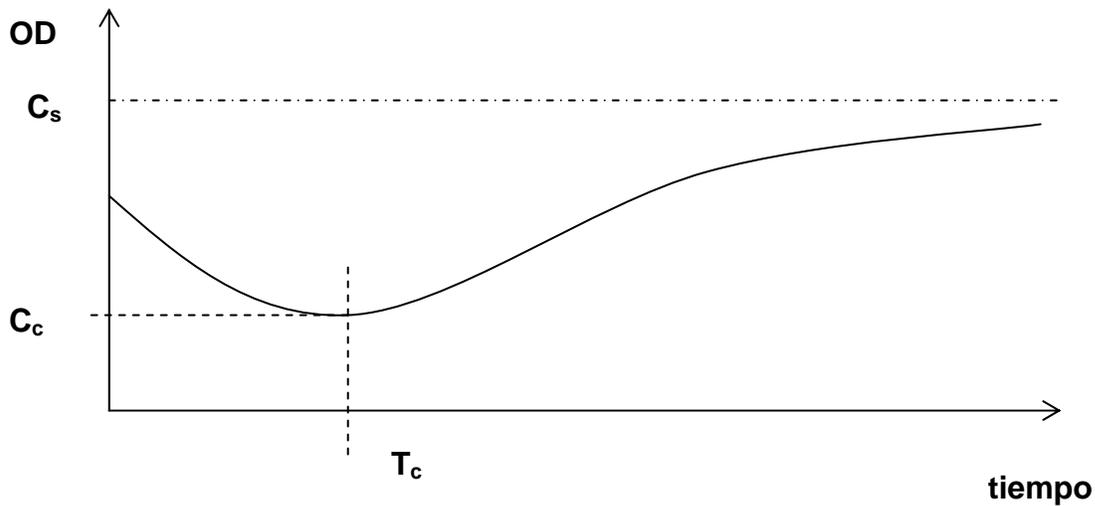
Modelo de Streeter y Phelps



$$\frac{dC}{dt} = k_2 D - k_1 L = k_2 D - k_1 L_0 e^{-k_1 t} = -\frac{dD}{dt}$$

$$D(t) = \frac{k_1 L_0}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) + D_0 e^{-k_2 t}$$

Forma de la curva:



$$\begin{aligned} \text{Si } t = 0 & \quad D = D_0 \text{ y } C = C_0 \\ t = \infty & \quad D = 0 \text{ y } C = C_s \end{aligned}$$

Pendiente en el origen:

$$\left. \frac{dD}{dt} \right|_{t=0} = k_1 L_0 - k_2 D_0, \text{ generalmente mayor que cero.}$$

Ejemplo: $k_1 = 0,1$ $k_2 = 0,2$
 $L_0 = 100$ $D_0 = 3,0$

$$\left. \frac{dD}{dt} \right|_{t=0} = 10 - 0,6 = 9,4 > 0$$

Punto crítico: Se produce cuando $k_1L = k_2D$

$$t_c = \frac{1}{k_2 - k_1} \text{Ln} \left[\frac{k_2}{k_1} \left(1 - \frac{D_o(k_2 - k_1)}{k_1 L_o} \right) \right]$$

$$D_c = D(t_c) = \frac{k_1}{k_2} L_o \left[\frac{k_2}{k_1} \left(1 - \frac{D_o(k_2 - k_1)}{k_1 L_o} \right) \right]^{-\frac{k_1}{k_2 - k_1}}$$

Efecto de la descarga

$$\frac{\partial D}{\partial L_o} = \frac{k_1}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) > 0$$

Para cualquier valor de k_1, k_2 D aumenta siempre con L_o

$$\frac{\partial t_c}{\partial L_o} = \frac{D_o}{L_o(k_1 L_o - D_o(k_2 - k_1))}$$

$$k_1 L_o - D_o(k_2 - k_1) > k_1 L_o - D_o k_2 > 0 \text{ si } OD \text{ decrece en el origen}$$

Por lo tanto

$$\frac{\partial t_c}{\partial L_o} > 0 \quad t_c \text{ se traslada hacia aguas abajo al aumentar } L_o$$

$$\text{Valor máximo de } t_c = \frac{\ln(k) - \ln(k_1)}{k_2 - k_1}$$

Todo lo anterior es válido en función del tiempo

3.- Aplicación de la ecuación general a un modelo de oxígeno disuelto

Ecuación general:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon A \frac{\partial C}{\partial x} \right) - U \frac{\partial C}{\partial x} \pm F$$

Cambios de la DBO

- i) Oxidación de la materia orgánica : - k_1L
- ii) Sedimentación : - k_3L
- iii) Resuspensión de fondo : p

Demanda béntica o resuspensión de lodos de fondo debería ser en estricto rigor inversamente proporcional a la profundidad media del cauce. Suponer que es constante equivale a suponer que la profundidad media es aproximadamente constante.

Ecuación :

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

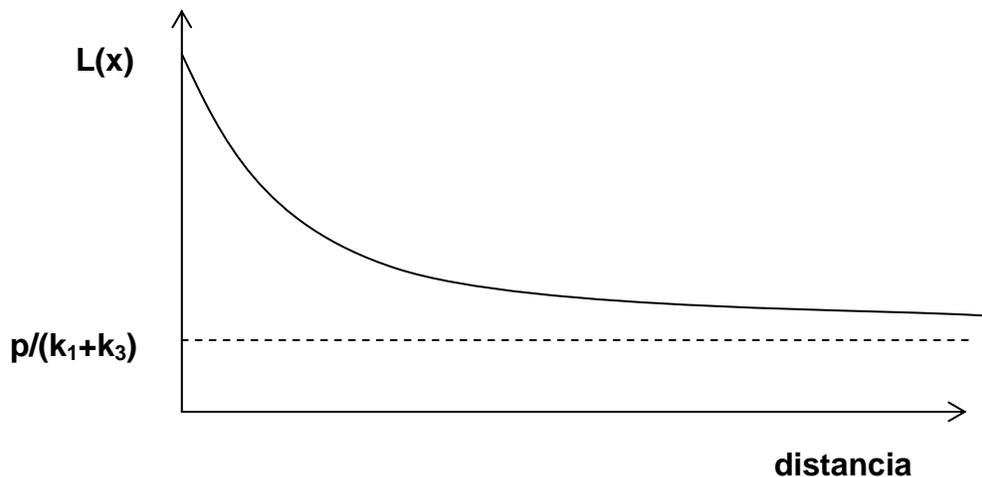
Condiciones de borde : $L = L_0$ en $x = 0$

Solución :

$$L(x) = \left[L_0 - \frac{p}{k_1 + k_3} \right] e^{j_1 x} + \frac{p}{k_1 + k_3}$$

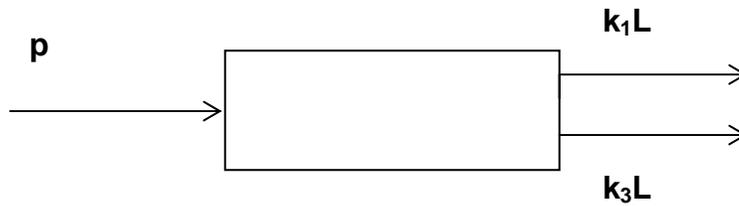
En que

$$J_1 = \frac{U}{2\varepsilon} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4(k_1 + k_3)\varepsilon}{U^2}} \right)$$



El término $p/(k_1+k_3)$ corresponde a la DBO de equilibrio, cuando el aporte de DBO béntica (p) se equilibra con la degradación bacteriana (k_1L) más la sedimentación (k_3L).

Gráficamente:



En el equilibrio: $p = k_1 L_{eq} + k_3 L_{eq}$, de donde $L_{eq} = p / (k_1 + k_3)$

Oxígeno disuelto:

- i) Reoxigenación atmosférica : $k_2 D$
- ii) Fotosíntesis : a
- iii) Oxidación materia orgánica : $-k_1 L$

Otros términos que se podrían introducir : Oxidación de compuestos nitrogenados, demanda béntica directa, etc.

Ecuación :

$$\varepsilon \frac{d^2 C}{dx^2} - U \frac{dC}{dx} + k_2 D - k_1 L + a = 0$$

Solución :

$$D(x) = D_0 e^{-j_2 x} + \frac{k_1}{k_2 - k_1 - k_3} \left(L_0 - \frac{p}{k_1 + k_3} \right) (e^{j_1 x} - e^{-j_2 x}) - \frac{1}{k_2} \left(a - \frac{k_1 p}{k_1 + k_3} \right) (1 - e^{-j_2 x})$$

En que

$$J_2 = \frac{U}{2\varepsilon} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4k_2 \varepsilon}{U^2}} \right)$$

Condiciones anaeróbicas

DBO: La velocidad de oxidación de la DBO queda limitada por la velocidad de reoxigenación atmosférica y el aporte de las algas, si es que éstas están presentes, por lo que la ecuación queda :

$$\varepsilon \frac{d^2 L}{dx^2} - U \frac{dL}{dx} - (k_2 C_s + a) - k_3 L + p = 0$$

Cuya solución es

$$L = \left(L_i + \frac{k_2 C_s + a - p}{k_3} \right) e^{j_3(x-x_i)} + \frac{p - k_2 C_s - a}{k_3}$$

En que

$$J_3 = \frac{U}{2\varepsilon} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4k_3\varepsilon}{U^2}} \right)$$

El fin de la zona anaeróbica se produce cuando la DBO se ha reducido a un nivel tal que la demanda de oxígeno se hace inferior a la oferta (reoxigenación atmosférica más fotosíntesis). A partir de este momento aparece un residual de oxígeno en el agua, el cual aumenta gradualmente hacia aguas abajo, hasta que vuelve a encontrar las condiciones de equilibrio. Esta condición se produce cuando

$$k_2 C_s + a = k_1 L_f$$

Bajo estas condiciones la DBO tiene el siguiente valor :

$$L_f = \frac{k_2 C_s + a}{k_1} = L(x_f) = \left(L_i + \frac{k_2 C_s + a - p}{k_3} \right) e^{j_3(x_f-x_i)} - \frac{k_2 C_s + a - p}{k_3}$$

De la ecuación anterior se puede deducir la longitud del tramo anaeróbico como

$$x_f - x_i = \frac{1}{J_3} \operatorname{Ln} \left[\frac{k_2 C_s + a + \frac{k_1}{k_3} (k_2 C_s + a - p)}{k_1 L_i + \frac{k_1}{k_3} (k_2 C_s + a - p)} \right]$$