CI 51 D. Contaminación de Recursos Hidráulicos.
Jorge Castillo G.

Aplicaciones del modelo general

a) Descarga puntual en el mar o cuerpo lacustre sin flujo hidráulico significativo

La ecuación general que representa la velocidad de cambio de la concentración de una sustancia en el agua en un sistema sujeto a flujo advectivo, flujo dispersivo y reacción o decaimiento, la que se ha supuesto que es una reacción de primer orden, es la siguiente:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (\varepsilon \nabla C) - \vec{U} \cdot \nabla C - KC$$

La descarga puntual de una sustancia en el mar o en un cuerpo de agua lacustre de grandes dimensiones en el que no existe un campo de velocidades de magnitud significativa, vale decir, aguas esencialmente quietas, se puede modelar como un sistema sujeto principalmente a un flujo dispersivo y un fenómeno reactivo. El caudal de la descarga genera además un flujo advectivo, pero se puede demostrar que, normalmente, es suficientemente pequeño a poca distancia de la descarga para ser absolutamente despreciable.

Bajo las condiciones descritas el fenómeno presenta una simetría cilíndrica, es decir, al no haber ninguna dirección en la cual haya un flujo u otra condición diferente y suponiendo que no hay variaciones significativas de calidad con respecto a la profundidad del agua, el comportamiento de la sustancia en el agua es el mismo en cualquier dirección, por lo que basta con hacer el análisis del comportamiento de la sustancia en una dirección radial desde el punto de la descarga.

Dado que la hipótesis de esta aplicación establece que no hay un flujo hidráulico significativo, es decir, que las aguas están esencialmente quietas, es posible despreciar el término del flujo advectivo. Si se establece como segunda hipótesis que el sistema está en equilibrio, es decir que ha alcanzado un punto en que no hay variaciones temporales de la concentración, entonces la ecuación se puede escribir como

$$\varepsilon \nabla^2 C - KC = 0$$

Al haber simetría cilíndrica conviene escribir esta ecuación, que está escrita en coordenadas cartesianas del tipo (x,y,z), en coordenadas cilíndricas, en que cada punto del espacio aparece representado por una distancia desde el centro o radio, r, un ángulo φ medido desde una línea de referencia, y una altura z, del tipo (r, φ,z):

La ecuación en coordenadas cilíndricas se puede escribir como:

$$\varepsilon\nabla^2 C - KC = \varepsilon\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 C}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) - KC = 0$$

Al haber simetría cilíndrica sólo queda la derivada con respecto a r y la ecuación se simplifica como sigue:

$$\varepsilon\nabla^2 C - KC = \frac{\varepsilon}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C}{\partial r}\right) - KC = 0$$

Cuya forma final se reduce a:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial C}{\partial r} - \frac{K}{\varepsilon}C = 0$$

La solución de la ecuación anterior corresponde a una función de Bessel de orden 0. La solución es:

$$C(r) = AL_0\left(\sqrt{\frac{Kr^2}{\varepsilon}}\right) + BK_0\left(\sqrt{\frac{Kr^2}{\varepsilon}}\right)$$

en que L_0 y K_0 don las funciones modificadas de Bessel de primera y segunda clase y A y B son constantes. Aplicando las condiciones de borde C = 0 en r=∞ y C = C_0 en r=r_0, resulta la solución final:

$$C(r) = \frac{C_0 K_0\left(\sqrt{\frac{Kr^2}{\varepsilon}}\right)}{K_0\left(\sqrt{\frac{Kr_0^2}{\varepsilon}}\right)} \qquad \ldots\ldots\ldots \quad (5)$$

La ecuación anterior permite estimar la concentración de una sustancia en el agua sujeta a flujo dispersivo y reacción, caracterizados por los parámetros ε y K, respectivamente.

La denominada condición inicial se puede establecer definiendo una distancia r_0 dentro de la cual la descarga se mezclaría completamente en el agua (por ejemplo 50 metros) y calculando la concentración resultante de esta mezcla, C_0, mediante la siguiente ecuación:

$$C_0 = \frac{C^*}{1 + K\dfrac{\pi r_0^2 h}{Q}}$$

En que C* es la concentración de la descarga,
K es la constante cinética del contaminante,
H es la profundidad del agua y
Q el caudal de la descarga

Dado que K tiene unidades de tiempo^{-1} (1/día), ε de distancia al cuadrado por unidad de tiempo (km^2/día) y r de distancia (km), si se usan unidades adecuadas el término $\sqrt{\dfrac{Kr^2}{\varepsilon}}$ es adimensional y se puede calcular en función de r para los valores de la constante de decaimiento, K, y el coeficiente dispersión, ε.

Para un determinado set de valores de r_0, C_0, K y ε se puede aplicar la ecuación [5] para calcular la concentración en función de la distancia a partir de la función de Bessel aplicada al valor adimensional **raiz(Kr^2/ε)**, multiplicar el resultado por C_0 y luego dividirlo por el valor de la función de Bessel para **raiz(Kr$_0^2$/ε)**

Los resultados de la aplicación del modelo descrito se pueden obtener ya sea en forma gráfica, aplicando el ábaco que se presenta en la figura N° 1 o se puede programar computacionalmente.

Ejemplo de aplicación:

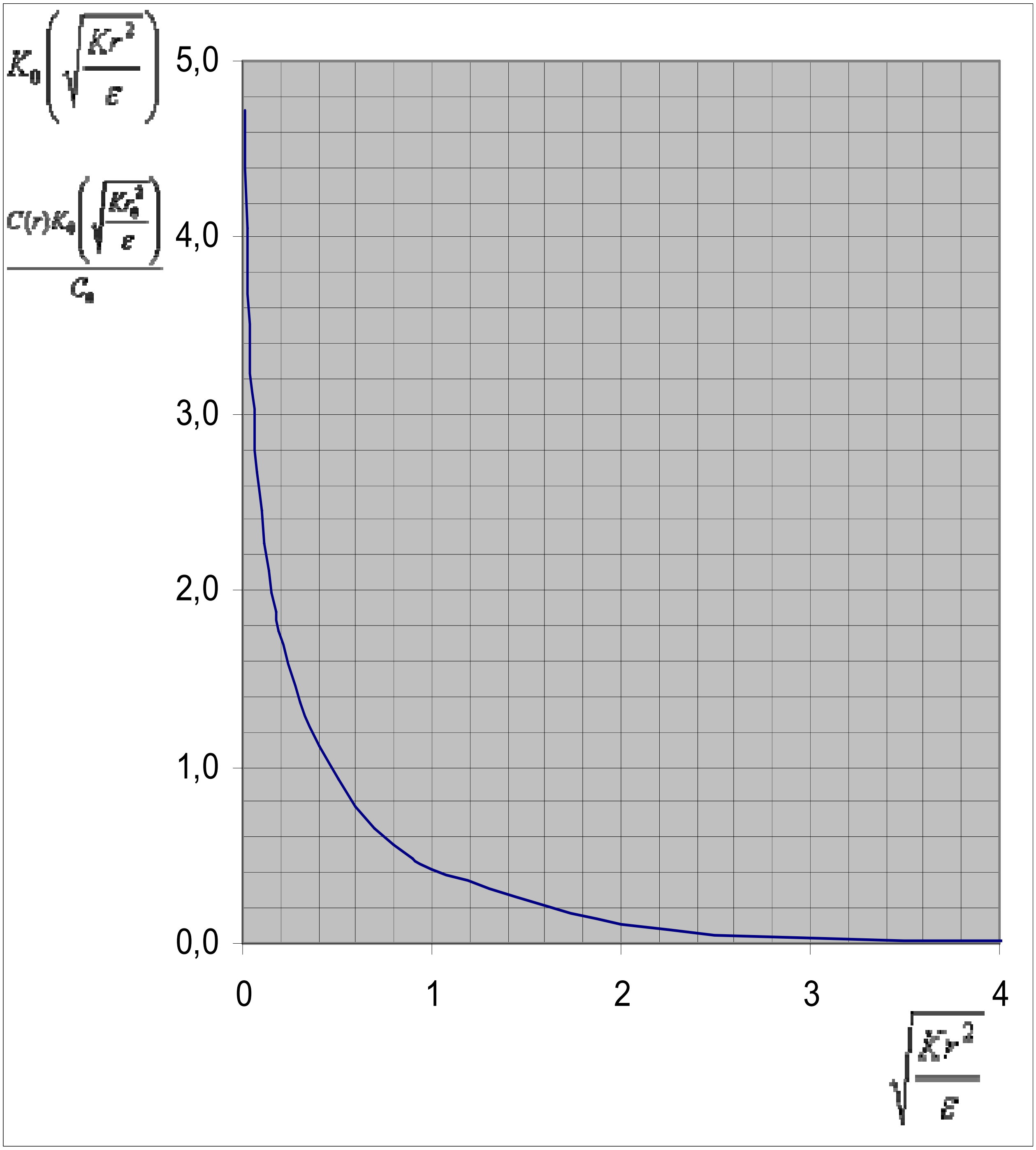
Para los valores

K= 0,1(1/día)
ε = 10 km^2/día = 10.000.000 m^2/día
C_0 = 0,1mg/l
r_0 = 0,1km = 100 m

El valor adimensional de raiz(Kr$_0^2$/ε) = 0,01 y la función de Bessel de este valor es K_0(raiz(Kr$_0^2$/ε))=K_0(0,01) = 4,72 por lo que la concentración en función de la distancia se puede calcular como

$$C(r) = \frac{C_0 K_0\left(\sqrt{\dfrac{Kr^2}{\varepsilon}}\right)}{K_0\left(\sqrt{\dfrac{Kr_0^2}{\varepsilon}}\right)} = \frac{0{,}1 \cdot K_0\left(\sqrt{\dfrac{Kr^2}{\varepsilon}}\right)}{4{,}72}$$

Figura N°1. Abaco para el cálculo de concentraciones con la función de Bessel de orden 0, K_0

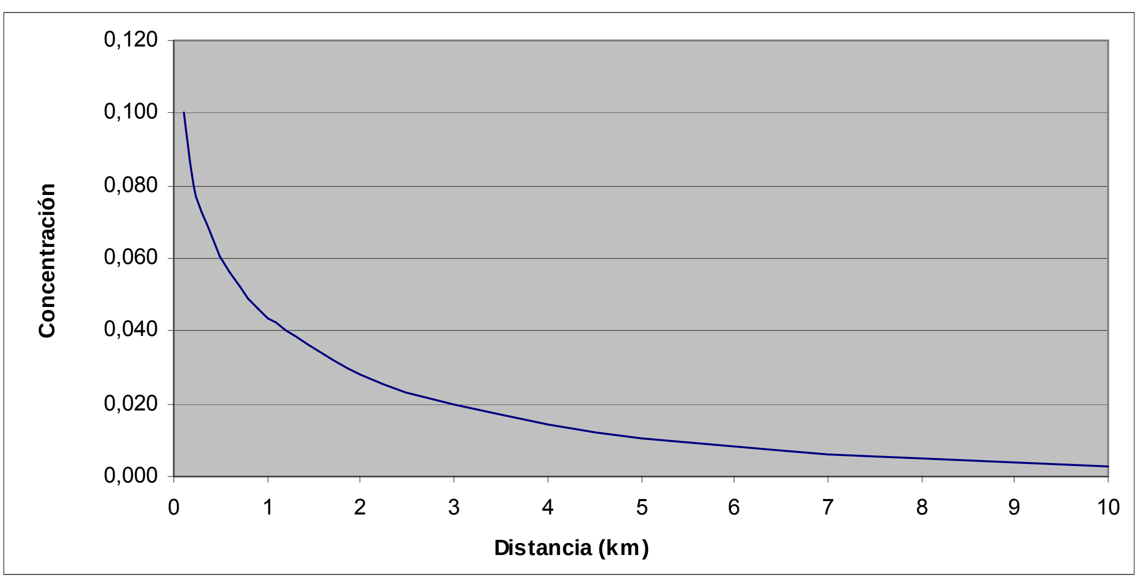


Ejemplo

K	0,1	1/día
ε	10	km^2/día
C_0	0,1	mg/l
r_0	0,1	km
raiz(Kr_0^2/ε)	0,01	

Resultados del cálculo

r (km)	**Argumento**	**Bessel**	**Concentración**
0,1	0,01	4,72	0,10
0,2	0,02	4,03	0,09
0,3	0,03	3,62	0,08
0,4	0,04	3,34	0,07
0,5	0,05	3,11	0,07
0,6	0,06	2,93	0,06
0,7	0,07	2,78	0,06
0,8	0,08	2,65	0,06
0,9	0,09	2,53	0,05
1,0	0,10	2,43	0,05
2,0	0,20	1,75	0,04
3,0	0,30	1,37	0,03
4,0	0,40	1,11	0,02
5,0	0,50	0,92	0,02
6,0	0,60	0,78	0,02
7,0	0,70	0,66	0,01
8,0	0,80	0,57	0,01
9,0	0,90	0,49	0,01
10,0	1,00	0,42	0,01



b) Descarga puntual en el mar o cuerpo lacustre con un flujo hidráulico en una dirección principal

El modelo anterior es válido para descargas en un medio uniforme, isotrópico, sin flujo en ninguna dirección, de manera que el transporte de contaminante sólo se produce por efecto de la dispersión. Muchas veces existen corrientes, ya sea generales o inducidas por el viento, que generan un lento movimiento del agua el que, a su vez, genera un transporte advectivo de contaminantes, que se suma al transporte dispersivo. Este caso fue estudiado por Brooks en 1960[1] quien integró la ecuación diferencial que describe la distribución de concentraciones por efecto del flujo advectivo y dispersivo, sujeto a una degradación de primer orden, en un medio en que existe una velocidad en un sentido longitudinal (eje x). Por simplicidad, y dado que el flujo advectivo en estas condiciones es mucho mayor que el dispersivo, se desprecia la dispersión longitudinal y sólo se conserva la dispersión en el sentido transversal (eje y). La ecuación general que describe la distribución de concentraciones es:

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla C) - \vec{U} \cdot \nabla C - KC = 0$$

que, para las condiciones particulares descritas, se transforma en

$$\frac{\partial}{\partial y}(\varepsilon_y \frac{\partial C}{\partial y}) - U_x \frac{\partial C}{\partial x} - KC = 0$$

Brooks supuso que el coeficiente de dispersión lateral, ε_y, no es uniforme sino que varía con la escala del fenómeno dispersivo de acuerdo a una relación del tipo

$$\varepsilon_y = \varepsilon_0 (L/b)^{4/3}$$

en que L es la escala a la cual se produce el fenómeno de dispersión turbulenta. Bajo estas condiciones la solución de la ecuación para la línea central, representada por el eje x, es la siguiente:

$$C(x) = C_0 e^{-\frac{Kx}{U}} erf\left[\sqrt{\frac{3/2}{\left(1+\frac{8\varepsilon_0 x}{Uw^2}\right)^3 - 1}}\right]$$

[1] Brooks, N. H. "Diffusion of Sewage Effluent in an Ocean Current", Proceedings of the First International Conference on Waste Disposal in the Marine Environment, University of California, 1979, Pergamon Press N. Y., 1960.

en que ***erf*** es la función error ("error function") y w es el ancho de la descarga inicial (por ejemplo el ancho del difusor, en el caso que éste exista) y U es la velocidad longitudinal del agua.

Si se supone que la dispersión es uniforme, es decir, independiente de x, la solución de la ecuación se simplifica a

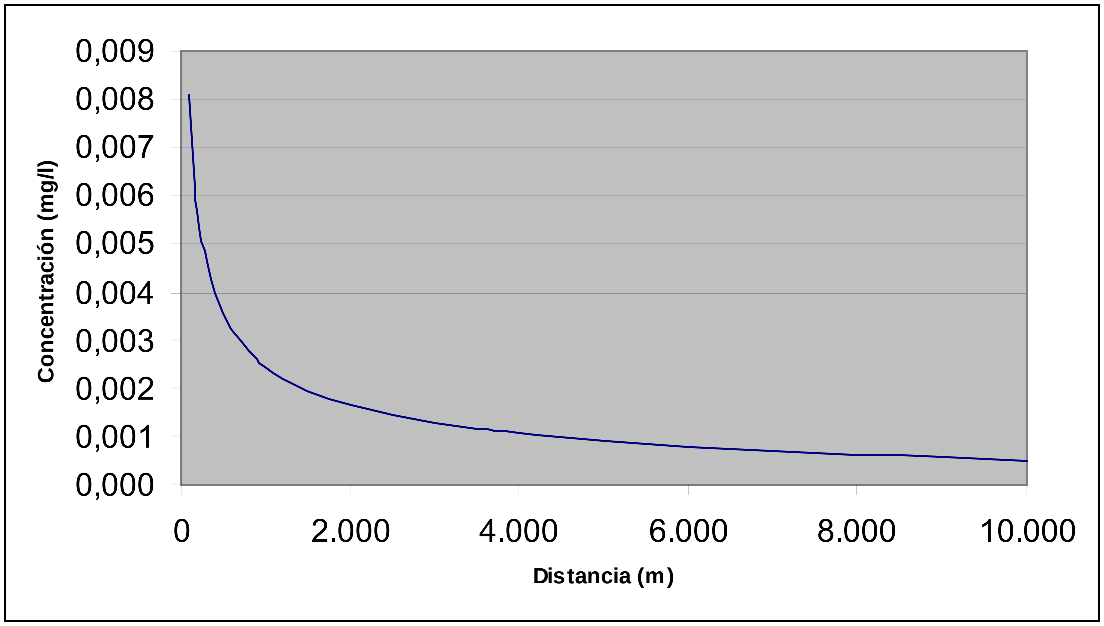
$$C(x) = C_0 e^{-\frac{Kx}{U}} erf\left[\sqrt{\frac{Uw^2}{16\varepsilon x}}\right]$$

Ejemplo

U	8.640	m/día
K	0,1	1/día
ε	2,6	km^2/día*
C_0	0,1	mg/l
w	0,1	km

Resultados del cálculo

x (m)	**raiz($Uw^2/16\varepsilon x$)**	**Decaimiento**	**Dispersión**	**C(x)**
100	0,144	0,999	0,161	0,016
200	0,102	0,998	0,115	0,011
300	0,083	0,997	0,094	0,009
400	0,072	0,995	0,081	0,008
500	0,064	0,994	0,073	0,007
600	0,059	0,993	0,066	0,007
700	0,054	0,992	0,061	0,006
800	0,051	0,991	0,057	0,006
900	0,048	0,990	0,054	0,005
1.000	0,046	0,988	0,051	0,005
1.500	0,037	0,983	0,042	0,004
2.000	0,032	0,977	0,036	0,004
2.500	0,029	0,971	0,033	0,003
3.000	0,026	0,966	0,030	0,003
3.500	0,024	0,960	0,027	0,003
4.000	0,023	0,955	0,026	0,002
5.000	0,020	0,944	0,023	0,002
6.000	0,019	0,933	0,021	0,002
7.000	0,017	0,922	0,019	0,002
8.000	0,016	0,912	0,018	0,002
9.000	0,015	0,901	0,017	0,002
10.000	0,014	0,891	0,016	0,001

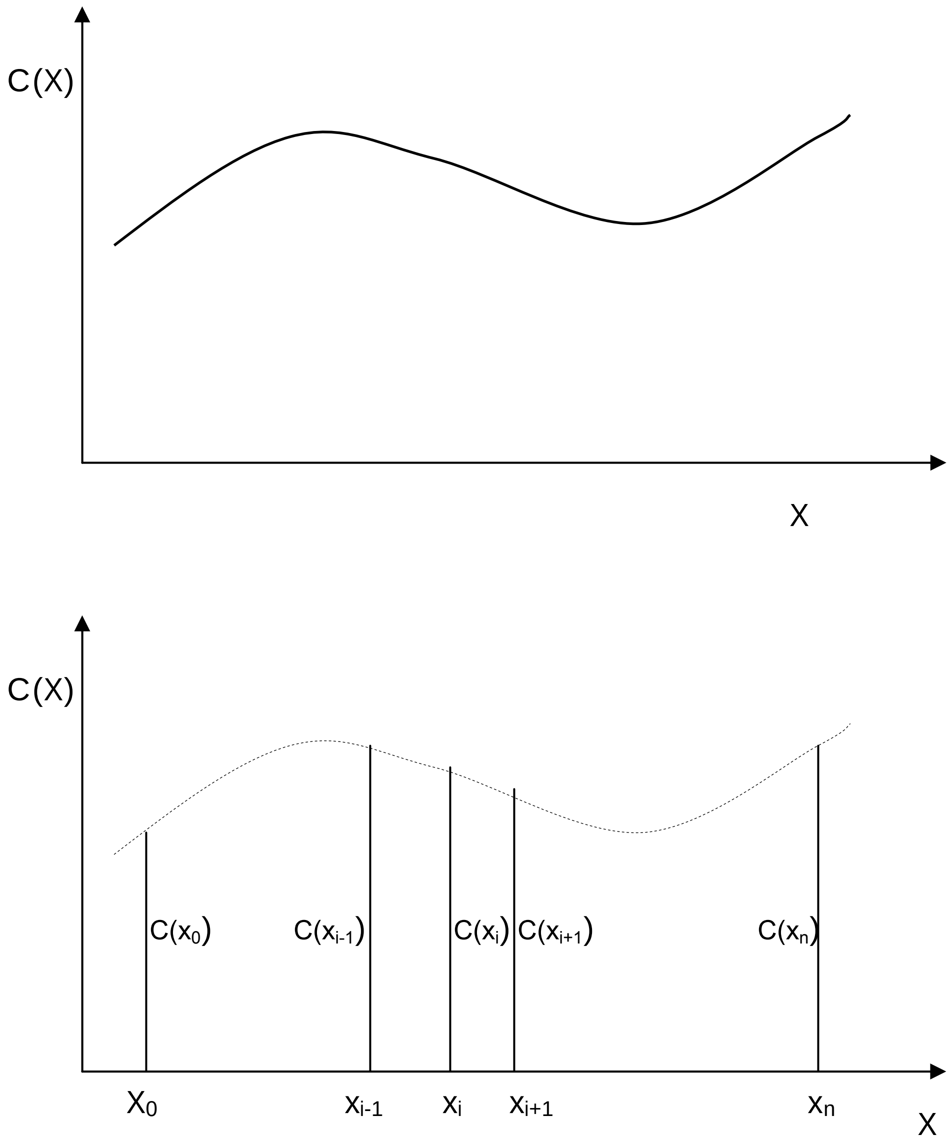


c) Soluciones numéricas

Las ecuaciones diferenciales que describen el comportamiento de una sustancia en el agua no siempre tienen soluciones analíticas. Cuando no es posible derivar una solución a analítica, es necesario recurrir a soluciones numéricas. Que entregan un resultado aproximado, pero suficiente para cuantificar la evolución espacial o temporal de la calidad del agua.

Para derivar una solución numérica de una ecuación diferencial es necesario transformar, en primer lugar, la función continua de la concentración, en una representación aproximada en que se sustituye por una serie de valores discretos asociados a una serie de puntos también discretos, en el espacio o en el tiempo. La serie de valores discretos de concentración no se conoce *a priori*, ya que son los resultados del modelo numérico. En la figura siguiente se ilustra esta transformación:

Figura N° 3. Transformación de una función discreta en una función continua



En el método denominado de **diferencias finitas**, las derivadas de la ecuación diferencial se pueden escribir en forma aproximada, a partir de su definición, y de esta forma la ecuación diferencial se transforma en una ecuación lineal, en que las concentraciones $C(x_i)$ son las incógnitas. La solución de las ecuaciones lineales resultantes será una aproximación de la solución de la ecuación diferencial.

Por ejemplo, la ecuación diferencial que describe una descarga puntual continua, bajo condiciones de equilibrio, sometida a los fenómenos de flujo advectivo, dispersivo y reacción, con simetría cilíndrica, es la siguiente:

$$\frac{1}{x}\frac{\partial}{\partial r}\left(\varepsilon x\frac{\partial C}{\partial r}\right)-\frac{Q_0}{2\pi h}\frac{1}{z}\frac{\partial C}{\partial r}-KC=0$$

que se puede transformar a:

$$\varepsilon\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-(\frac{Q_0}{2\pi h}-\varepsilon)\frac{1}{x}\frac{\partial C}{\partial x}-KC=0$$

En esta ecuación, si se define una separación entre dos puntos consecutivos constante, igual a Δx, las derivadas se pueden aproximar para cualquier punto x_i, asociado a la concentración $C(x_i)$, o simplemente C_i, como sigue:

$$\frac{\partial C_i}{\partial r}=\frac{C_{i+1}-C_{i-1}}{2\Delta r}$$

$$\frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2}=\frac{\frac{C_{i+1}-C_i}{\Delta r}-\frac{C_i-C_{i-1}}{\Delta r}}{\Delta r}=\frac{C_{i+1}-2C_i+C_{i-1}}{(\Delta r)^2}$$

Y la ecuación diferencial se puede escribir como:

$$\varepsilon\frac{C_{i+1}-2C_i+C_{i-1}}{(\Delta x)^2}-\frac{(\frac{Q_0}{2\pi h}-\varepsilon)}{2\Delta x}\frac{1}{x}(C_{i+1}-C_{i-1})-KC_i=0$$

Que reordenada, genera la ecuación lineal siguiente:

$$(\frac{\varepsilon}{\Delta r^2}+\frac{\frac{Q_0}{2\pi h}-\varepsilon}{2\Delta r(r_0+i\Delta r)})C_{i-1}+(-\frac{2\varepsilon}{\Delta r^2}-K)C_i+(\frac{\varepsilon}{\Delta r^2}-\frac{\frac{Q_0}{2\pi h}-\varepsilon}{2\Delta r(r_0+i\Delta r)})C_{i+1}=0$$

Para cada i, excepto el primer y último valor discreto de la serie, se puede escribir una ecuación lineal como la anterior. Tanto el primer como el último valor de la serie cuentan con sólo dos de los tres términos que incluye la ecuación y, por lo tanto, ésta no puede ser escrita. Estos valores deben ser calculados mediante otras hipótesis, denominadas condiciones de borde, las que son necesarias para poder seleccionar una de las infinitas soluciones que tiene una ecuación diferencial. La condición de borde más obvia es la que establece que $C(r_0) = C_0$. La segunda condición de borde es menos obvia y depende de la condición particular del sistema. Por ejemplo, si hubiera una concentración de fondo, C_f, la condición de borde típica es que C tiende a C_f cuando r se aleja indefinidamente, es decir, en términos matemáticos, que

$$\lim_{r \to \infty} C(r) = C_f$$

Ejemplo:

K= 0,1 1/día
$\varepsilon =$ 2,6 km^2/día* 2.600.000m2/día 1
C_0 = 0,1 mg/l
r_0 = 0,1 km = 100 m
Q_0 = 30 m^3/hr = 720 m^3/día
Δx = 0,1 km = 100 m
H = 0,01 km = 10 m
Distancia crítica 1: 32,5 m (a la cual se reduce a 0,001 por sólo decaimiento)
Distancia crítica 2: 150,6 Corresp. a vol. en que se reduce a 0,001 por mezcla completa

A1= 260 1/día
A2= -26.000 m/día
B= -520 1/día
C1= 260 m/día
C2= 26.000 1/día
X= $r_0+i*\Delta x$

Ecuación genérica:
$(A1+A2/(r_0+i*\Delta x))*C_{i-1} + B*C_i+(C1+C2/(r_0+i*\Delta x))*C_{i+1}=0$

Primera ecuación (1)
$(A1+A2/(r_0+\Delta x)*C_0 + B*C_1+(A1-A2/(r_0+\Delta x))*C_2=0$

equivalente a

$B*C1+(A1-A2/(r_0+\Delta x))*C2=-(A1+A2/(r_0+\Delta x))*C_0$

Última ecuación(n)
$=-C_{n-1}+C_n=0$

equivalente a
C_n=Cn-1

Valores de la matriz de coeficientes y lado derecho del sistema de ecuaciones:

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	Lado derecho
-520,1	390,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	-13,0
173,3	-520,1	346,7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,0	195,0	-520,1	325,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,0	0,0	208,0	-520,1	312,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,0	0,0	0,0	216,7	-520,1	303,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
0,0	0,0	0,0	0,0	222,9	-520,1	297,1	0,0	0,0	0,0	0,0
0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	227,5	-520,1	292,5	0,0	0,0	0,0
0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	231,1	-520,1	288,9	0,0	0,0
0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	234,0	-520,1	286,0	0,0
0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,0	0,0	0,0

Valores de la matriz inversa

-0,0034	-0,0045	-0,0051	-0,0053	-0,0051	-0,0045	-0,0034	-0,0019	0,0000	0,5527
-0,0020	-0,0060	-0,0068	-0,0071	-0,0068	-0,0060	-0,0045	-0,0026	0,0000	0,7371
-0,0013	-0,0038	-0,0077	-0,0080	-0,0077	-0,0067	-0,0051	-0,0029	0,0000	0,8295
-0,0009	-0,0026	-0,0051	-0,0085	-0,0082	-0,0072	-0,0054	-0,0031	0,0000	0,8852
-0,0006	-0,0017	-0,0034	-0,0057	-0,0085	-0,0075	-0,0057	-0,0032	0,0000	0,9226
-0,0004	-0,0011	-0,0022	-0,0036	-0,0055	-0,0077	-0,0058	-0,0033	0,0000	0,9496
-0,0002	-0,0006	-0,0013	-0,0021	-0,0032	-0,0045	-0,0060	-0,0034	0,0000	0,9702
-0,0001	-0,0003	-0,0006	-0,0009	-0,0014	-0,0020	-0,0027	-0,0034	0,0000	0,9866
0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000
0,0001	0,0002	0,0005	0,0008	0,0012	0,0016	0,0022	0,0028	0,0035	1,0113

Solución del sistema de ecuaciones

X	C	
100	0,1000	Condición de borde
200	0,0444	
300	0,0259	
400	0,0166	
500	0,0111	
600	0,0074	
700	0,0047	
800	0,0028	
900	0,0012	
1.000	0,0000	Condición de borde
1.100	-0,0010	

Gráfico de la solución