



**FUNDAMENTOS DE MODELIZACIÓN  
DE LA CALIDAD DEL AGUA**

Julio C. Pazmiño Rodríguez



# FUNDAMENTOS DE MODELIZACIÓN DE LA CALIDAD DEL AGUA

# FUNDAMENTOS DE MODELIZACIÓN DE LA CALIDAD DEL AGUA

**Julio C. Pazmiño Rodríguez**



Título original: FUNDAMENTOS DE MODELIZACIÓN  
DE LA CALIDAD DEL AGUA

© Julio C. Pazmiño Rodríguez

2020,

Publicado por acuerdo con los autores.

© 2020, Editorial Grupo Compás

Universidad Técnica Estatal de Quevedo  
Guayaquil-Ecuador

Grupo Compás apoya la protección del copyright, cada uno de sus textos han sido sometido a un proceso de evaluación por pares externos con base en la normativa del editorial.

El copyright estimula la creatividad, defiende la diversidad en el ámbito de las ideas y el conocimiento, promueve la libre expresión y favorece una cultura viva. Quedan rigurosamente prohibidas, bajo las sanciones en las leyes, la producción o almacenamiento total o parcial de la presente publicación, incluyendo el diseño de la portada, así como la transmisión de la misma por cualquiera de sus medios, tanto si es electrónico, como químico, mecánico, óptico, de grabación o bien de fotocopia, sin la autorización de los titulares del copyright.

Editado en Guayaquil - Ecuador

ISBN: 978-9942-33-277-6

Cita.  
Pazmiño. J (2020) FUNDAMENTOS DE MODELIZACIÓN DE LA CALIDAD DEL AGUA, Editorial Compás,  
Guayaquil Ecuador, 201 pag

**Dedicatoria**

*A mi esposa Mabel y mi hija Carlita Valentina  
A mis padres Carlos y Vilma*

# CONTENIDO

<b>PRÓLOGO.....</b>	<b>VI</b>
<b>INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>1</b>
<b>SISTEMA INTERNACIONAL DE UNIDADES.....</b>	<b>1</b>
<b>DIMENSIONES DE LAS CANTIDADES.....</b>	<b>6</b>
<b>REFERENCIAS.....</b>	<b>8</b>
<b>CAPÍTULO 1. CINÉTICA DE REACCIONES Y REACTORES IDEALES.....</b>	<b>9</b>
<b>1.1 VELOCIDAD DE UNA REACCIÓN.....</b>	<b>9</b>
<b>1.2 ORDEN DE UNA REACCIÓN.....</b>	<b>12</b>
1.2.1 REACCIONES DE ORDEN CERO.....	14
1.2.2 REACCIONES DE PRIMER ORDEN.....	16
1.2.3 REACCIONES DE SEGUNDO ORDEN.....	17
1.2.4 REACCIONES DE ORDEN SUPERIOR.....	19
1.2.5 MÉTODO INTEGRAL PARA DETERMINAR EL ORDEN DE LA REACCIÓN.....	20
<b>1.3 BALANCE DE MASA.....</b>	<b>23</b>
1.3.1 LA ECUACIÓN GENERAL DEL BALANCE DE MASA.....	23
1.3.2 BALANCE DE MASA EN ESTADO ESTACIONARIO.....	25
1.3.2.1 Mezcla de corrientes.....	25
1.3.2.2 Estado estacionario y sustancia no conservativa.....	27
1.3.2.2.1 Sustancia no conservativa con reacción de orden cero.....	28
1.3.2.2.2 Sustancia no conservativa con reacción de primer orden.....	29
1.3.2.2.3 Sustancia no conservativa con reacción de segundo orden.....	29
1.3.3 BALANCE DE MASA EN ESTADO NO ESTACIONARIO.....	32
1.3.3.1 Estado no estacionario y sustancia conservativa (volumen constante).....	32
1.3.3.2 Estado no estacionario y sustancia conservativa (volumen variable).....	36
1.3.3.3 Estado no estacionario y sustancia no conservativa.....	39
1.3.3.3.1 Estado no estacionario para una reacción de orden cero.....	39
1.3.3.3.2 Estado no estacionario para una reacción de primer orden.....	41
<b>1.4 DISEÑO DE REACTORES HOMOGÉNEOS IDEALES.....</b>	<b>44</b>
1.4.1 REACTOR DISCONTINUO O BATCH.....	45

1.4.2	REACTORES CONTINUOS .....	46
1.4.2.1	Reactor de tanque de mezcla completa (RTMC) .....	46
1.4.2.2	Reactor tubular de flujo pistón (RFP) .....	48
1.4.3	REACTORES EN SERIE .....	53
	<b>PROBLEMAS PROPUESTOS .....</b>	<b>59</b>
	<b>REFERENCIAS.....</b>	<b>61</b>

## **CAPÍTULO 2. TRANSPORTE DE SUSTANCIAS EN EL AGUA .....** **63**

<b>2.1</b>	<b>PROCESOS DE TRANSPORTE EN EL AGUA .....</b>	<b>63</b>
2.1.1	ADVECCIÓN.....	64
2.1.2	DIFUSIÓN .....	65
2.1.3	DISPERSIÓN .....	67
<b>2.2</b>	<b>LA ECUACIÓN DE ADVECCIÓN-DIFUSIÓN (DISPERSIÓN) (ADE) .....</b>	<b>69</b>
2.2.1	SOLUCIONES DE LA ECUACIÓN DE ADVECCIÓN-DIFUSIÓN .....	77
2.2.1.1	Difusión en una dimensión.....	77
2.2.1.2	Difusión en dos dimensiones.....	86
2.2.1.3	Difusión en tres dimensiones .....	87
2.2.2	DISPERSIÓN LONGITUDINAL .....	88
	<b>PROBLEMAS PROPUESTOS .....</b>	<b>90</b>
	<b>REFERENCIAS.....</b>	<b>91</b>

## **CAPÍTULO 3. MODELIZACIÓN DE LA CALIDAD DEL AGUA SUPERFICIAL.....** **93**

<b>3.1</b>	<b>INTRODUCCIÓN .....</b>	<b>93</b>
<b>3.2</b>	<b>FUENTES Y SUMIDROS DEL OXÍGENO DISUELTO .....</b>	<b>95</b>
<b>3.3</b>	<b>DEMANDA BIOQUÍMICA DE OXÍGENO (DBO) .....</b>	<b>98</b>
3.3.1	CONTEXTO E INTRODUCCIÓN .....	98
3.3.2	CINÉTICA DE PRIMER ORDEN DE LA DBO .....	100
3.3.2.1	Demanda bioquímica de oxígeno carbonosa (DBOC).....	100
3.3.2.2	Demanda bioquímica de oxígeno nitrogenada (DBON) .....	104
3.3.3	OTROS MODELOS CINÉTICOS DE LA DBO .....	109
3.3.4	CONSTANTE DE DESOXIGENACIÓN .....	115
3.3.4.1	Métodos para la determinación de $k_1$ .....	116
3.3.4.2	Métodos para determinar $k_d$ .....	122

3.3.5	CONSTANTE DE REMOCIÓN TOTAL DE LA DBO ( $K_R$ ).....	123
3.3.6	CORRECCIÓN DE LA CONSTANTE DE DESOXIGENACIÓN POR LA TEMPERATURA .....	125
<b>3.4</b>	<b>REAIREACIÓN .....</b>	<b>126</b>
3.4.1	FORMULACIÓN MATEMÁTICA .....	126
3.4.2	MÉTODOS PARA DETERMINAR $K_A$ .....	129
3.4.3	VALORES REPRESENTATIVOS Y CORRECCIÓN POR LA TEMPERATURA .....	133
3.4.4	SATURACIÓN DEL OXÍGENO DISUELTO .....	133
<b>3.5</b>	<b>MODELO DE STREETER-PHELPS .....</b>	<b>136</b>
3.5.1	FORMULACIÓN MATEMÁTICA DEL MODELO CLÁSICO DE STREETER-PHELPS .....	136
3.5.2	TIEMPO Y DÉFICIT CRÍTICOS .....	141
3.5.3	CONDICIONES ANAEROBIAS.....	153
<b>3.6</b>	<b>NITRIFICACIÓN .....</b>	<b>167</b>
<b>3.7</b>	<b>MODELO DE STREETER-PHELPS MODIFICADO O TOTAL.....</b>	<b>181</b>
	<b>REFERENCIAS.....</b>	<b>186</b>

# Prólogo

Desde la noche de los tiempos de la existencia humana en la Tierra, y de la vida en general, el agua ha representado el recurso natural más importante y crucial para el desarrollo y bienestar de las poblaciones, pero en un contexto más amplio, su rol como elemento vital de la naturaleza siempre ha sido la base de todos los procesos responsables del sostenimiento de la vida y del equilibrio ecosistémico. No obstante, el progreso histórico de las civilizaciones, desde los asentamientos primitivos hasta las ciudades modernas e industrializadas que caracterizan el mundo en la actualidad, ha conllevado la aparición, incremento y agravamiento de perturbaciones o impactos ambientales que han afectado principalmente a los recursos hídricos, entre ellos la contaminación de las aguas superficiales por la descarga de aguas residuales sin tratar, que compromete su disponibilidad en calidad adecuada para el ser humano, y produce la consecuente degradación de los ecosistemas acuáticos.

En el panorama descrito, el estudio científico de la calidad del agua se ha erigido quizás en la mayor de las preocupaciones ambientales del mundo contemporáneo, ratificada incluso en el marco de las metas del sexto objetivo del desarrollo sostenible de las Naciones Unidas. La presente obra pretende contribuir a las metas mundiales relacionadas con la calidad y disponibilidad de agua segura desde el contexto de la academia universitaria, proporcionando un recurso bibliográfico sencillo, pero detalladamente técnico, que viabilice la óptima formación académica de los estudiantes de ingeniería ambiental y de las ciencias del agua en los fundamentos que todo profesional interesado en la solución de los problemas de calidad del agua debe dominar. Así, los fundamentos que encontrarán los docentes y estudiantes en el contenido de la obra para interactuar en los procesos de enseñanza-aprendizaje, se enfocan en el uso de la modelización matemática como

eje articulador de las bases teóricas, pero principalmente como herramienta útil para abordar científicamente la problemática de la contaminación en corrientes naturales de agua superficial y la necesidad de controlar la carga contaminante de los vertimientos de aguas residuales.

La estructura del libro se organiza en un apartado introductorio y tres capítulos, los cuales guardan coherencia en el desarrollo progresivo de los modelos matemáticos básicos de calidad del agua. Cada capítulo ha sido elaborado de modo que ofrezca al lector, además del desarrollo teórico pertinente, la oportunidad de acceder a recuadros de información complementaria donde se podrá encontrar desde reseñas históricas hasta datos relativos a las bases matemáticas indispensables para el desarrollo y comprensión cabal de los diferentes temas. Además, todos los capítulos muestran problemas resueltos distribuidos adecuadamente para ejemplificar la aplicación práctica de las diferentes ecuaciones utilizadas en la modelización matemática de la calidad del agua. Finalmente, los capítulos concluyen con una serie de problemas propuestos y la sección de bibliografía correspondiente.

La introducción ofrece una síntesis del esquema utilizado por la comunidad científica para expresar las mediciones de cantidades fundamentales y derivadas con sus correspondientes unidades y simbología estándar, en el marco del Sistema Internacional de Unidades. Adicionalmente, de manera muy breve, se presentan elementos para interpretar el aspecto dimensional de las variables involucradas y para realizar el despeje de incógnitas en una ecuación.

El capítulo uno trata de los elementos fundamentales relativos al estudio de la cinética de las reacciones en el agua y el diseño de reactores ideales, construyendo las distintas posibilidades de análisis del comportamiento de sustancias contaminantes del agua a partir de la manipulación de la ecuación del balance de masa. Cubre aspectos

básicos necesarios para interpretar la teoría y resultados de los siguientes capítulos.

El capítulo dos comprende los fundamentos necesarios para un entendimiento preliminar de los diferentes mecanismos y procesos mediante los cuales los contaminantes experimentan su transporte y destino en los cuerpos de agua receptores. La parte medular del capítulo comprende el análisis deductivo de la ecuación del transporte y del proceso de advección-difusión.

El tercer y último capítulo, indudablemente constituye el núcleo de la obra. Su extenso contenido hilvana minuciosa y secuencialmente los elementos teóricos que permiten entender sólidamente el origen, la estructura, las modificaciones posteriores y las diversas aplicaciones que caracterizan al modelo matemático pionero y más reconocido mundialmente en el estudio de la calidad del agua debido a procesos consumidores de oxígeno disuelto por degradación aerobia de la materia orgánica contaminante: el modelo de Streeter-Phelps.

## Introducción

El desarrollo y comprensión de los temas tratados en el presente libro requieren del uso de ciertas habilidades y conocimientos relativos al esquema de expresión del valor de las variables en el marco del sistema internacional de unidades (SI) y el sistema inglés de unidades; además de la importancia del análisis dimensional para determinar la homogeneidad de las ecuaciones empleadas en el estudio de la calidad del agua, así como la utilidad del despeje de variables, desde sus principios y reglas fundamentales. Cada una de estas habilidades y conocimientos previos que se tienen que reforzar con anterioridad a la revisión de los diferentes temas tratados en la presente obra, se detallarán con el alcance y la profundidad que se ha considerado necesarios para un curso satisfactorio de calidad del agua.

### **Sistema Internacional de Unidades**

Entre las frases célebres del eminente físico y matemático británico William Thomson, más conocido bajo el seudónimo de lord Kelvin por su título honorífico recibido tras sus múltiples aportaciones a la física, entre ellas la creación de la escala de temperatura absoluta en el año 1848, denominada precisamente kelvin, se cuenta una que representa la importancia de disponer de un sistema coherente en cuyo marco se puedan hacer mediciones de validez universal: *“cuando se puede medir aquello de lo que se habla y se puede expresar en números, se conoce algo del tema; pero cuando no se puede medir, cuando no se puede expresar en números, el conocimiento es pobre e insatisfactorio”* (Thompson, 2011). En este contexto, el proceso de medir, definido en términos sencillos por el Diccionario de la Real Academia de la Lengua Española como *comparar una cantidad con su respectiva unidad, con el fin de averiguar cuántas veces la segunda está contenida en la primera*, exige un conjunto integral y coherente de magnitudes, unidades y símbolos, incluyendo los principios

## 2 INTRODUCCIÓN

y reglas que hagan posible su correcto uso (Real Academia Española, 2014). De todo esto, el estudiante y el profesional (incluso el individuo profano) pueden advertir claramente la insoslayable importancia del Sistema Internacional de Unidades, al que el presente texto se referirá por su sigla SI.

La historia relacionada con el proceso de consolidación del SI y su adaptación temporal a las necesidades y exigencias de los conocimientos y tecnologías de cada época, cuenta que su origen se remonta al legendario Sistema Métrico Decimal, durante la Revolución Francesa, cuyo establecimiento simbólico y formal ocurrió el 22 de junio de 1799 con el depósito de dos estándares de platino (en realidad, una aleación de platino e iridio, con 10% del segundo en su composición), uno para el metro y otro para el kilogramo, en los Archivos de la República francesa, bajo la custodia de la Academia de Ciencias. El siguiente hecho trascendental en este proceso histórico fue la Convención del Metro, firmada en París el 20 de mayo de 1875 por diecisiete Estados, que creó la Oficina Internacional de Pesas y Medidas (BIMP, por sus siglas en francés, provenientes de la denominación *Bureau International des Poids et Mesures*), cuyo trabajo se realiza bajo la autoridad y supervisión de la Conferencia General de Pesas y Medidas (CGPM) y del Comité Internacional de Pesas y Medidas (CIPM), respectivamente. Desde entonces y hasta la actualidad, se han efectuado veintiséis asambleas de la CGPM (BIMP, 2019).

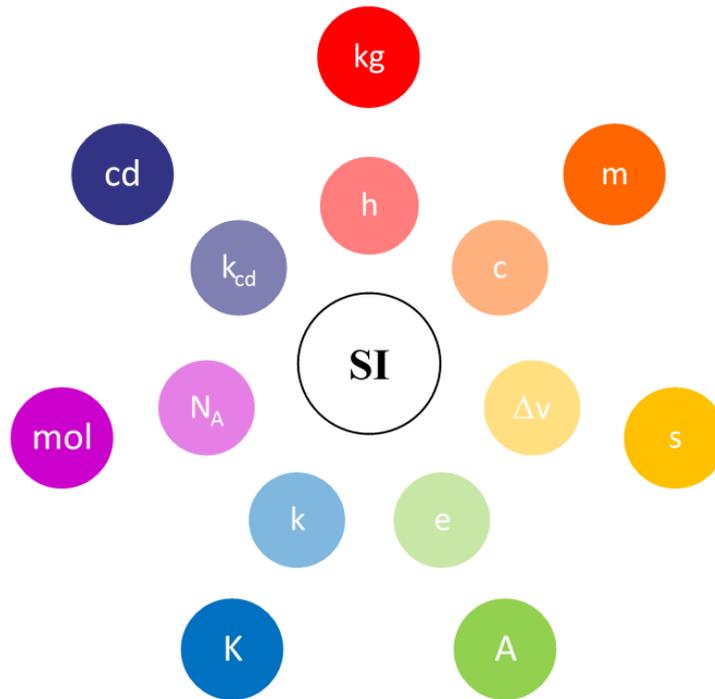
El nombre del SI, que perdura hasta ahora, se instituyó formalmente al cabo de la 11ª CGPM, que se desarrolló en el año 1960. Hasta ese entonces, el legado del Sistema Métrico Decimal había experimentado una ampliación desde el sistema tridimensional de unidades, compuesto por el metro, el kilogramo y el segundo (sistema MKS, aprobado en la 1ª CGPM en 1889), pasando por una transición hacia un sistema tetradimensional de unidades que integraba, además de las unidades tradicionales, al amperio como unidad fundamental de los fenómenos eléctricos (sistema MKSA, aprobado en 1946, y posteriormente definido en la 9ª CGPM en 1948), hasta la

conformación de un sistema hexadimensional presentado en el informe de la BIMP durante la 10ª CGPM, el cual consideraba dos unidades adicionales: el kelvin y la candela, para la temperatura termodinámica y la intensidad luminosa, respectivamente. A lo largo de los años y con el pasar de las CGPM, las definiciones de las unidades fundamentales han sido revisadas y refinadas para responder a las exigencias de los tiempos modernos y contemporáneos (BIMP, 2019).

En la actualidad, el SI se compone de siete unidades básicas (tabla i-1), incluyendo al mol, el cual fue adoptado como unidad fundamental relativa a la magnitud química denominada cantidad de sustancia, en la 14ª CGPM celebrada en el año 1971. Durante la última asamblea de la CGPM, la versión veintiséis, se aprobó la redefinición del kilogramo, el amperio, el kelvin y el mol, en términos de constantes universales: la constante de Planck, la carga elemental, la constante de Boltzmann y el número de Avogadro, respectivamente. Previamente, el metro había sido definido en función de la velocidad de la luz en el vacío, durante la 17ª CGPM desarrollada en el año 1983.

**Tabla i-1. Unidades básicas del Sistema Internacional de Unidades**

Cantidad fundamental	Unidad base	Símbolo
Tiempo ( $t$ )	segundo	s
Longitud ( $l, x, r, \text{etc.}$ )	metro	m
Masa ( $m$ )	kilogramo	kg
Intensidad de corriente eléctrica ( $I$ )	amperio	A
Temperatura ( $T$ )	kelvin	K
Cantidad de sustancia ( $n$ )	mol	mol
Intensidad luminosa ( $I_v$ )	candela	cd



**Figura i-0-1.** Relación entre las unidades base del SI y las constantes que las definen.

El SI comprende, además de las unidades base, una serie de unidades derivadas, las cuales son definidas por el BIPM como potencias de los productos de las unidades base. Así, por ejemplo, la velocidad, que es una cantidad derivada de dividir la longitud recorrida por un objeto entre la unidad de tiempo seleccionada, es decir una comparación entre dos cantidades fundamentales, en el formalismo del SI tiene por unidad el  $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$  (m/s). El conjunto de las siete unidades base y veintidós unidades derivadas a las que el BIPM ha dado nombres especiales y trata por separado, constituye el almacén primordial del SI, a partir del cual se pueden expresar todas las demás unidades derivadas. En este contexto, las unidades derivadas de relevancia en el estudio de la calidad del agua se resumen en la tabla i-2:

**Tabla i-2. Unidades derivadas del SI relevantes en el estudio de la calidad del agua**

Cantidad derivada	Unidad derivada	Símbolo
Fuerza ( $F$ )	newton	$N = \text{kg m s}^{-2}$
Energía ( $E$ )	joule	$J = N \text{ m} = \text{kg m}^2 \text{ s}^{-2}$
Presión ( $p$ )	pascal	$\text{Pa} = \text{kg m}^{-1} \text{ s}^{-2}$
Temperatura Celsius ( $T$ °C)	grado Celsius	$^{\circ}\text{C} = \text{K}$
Área ( $A$ )	metro cuadrado	$\text{m}^2$
Volumen ( $V$ )	metro cúbico	$\text{m}^3$
Velocidad ( $v$ )	metro por segundo	$\text{m s}^{-1}$ (m/s)
Aceleración ( $a$ )	metro por segundo cuadrado	$\text{m s}^{-2}$ (m/s <sup>2</sup> )
Densidad ( $\rho$ )	kilogramo por metro cúbico	$\text{kg m}^3$ (kg/m <sup>3</sup> )
Concentración (másica) ( $\rho_c$ )	kilogramo por metro cúbico	$\text{kg m}^3$ (kg/m <sup>3</sup> )
Flujo volumétrico o caudal ( $Q$ )	metro cúbico por segundo	$\text{m}^3 \text{ s}^{-1}$ (m <sup>3</sup> /s)
Flujo o carga másicos ( $\dot{m}$ )	kilogramo por segundo	$\text{kg s}^{-1}$ (kg/s)
Viscosidad dinámica ( $\mu$ )	pascal segundo	$\text{Pa s} = \text{kg m}^{-1} \text{ s}^{-1}$

A continuación, se presentará una comparación entre las definiciones anteriores y actuales de las unidades básicas de relevancia en la calidad del agua, tomando como fuente la Oficina Internacional de Pesas y Medidas:

**Tabla i-3. Definiciones anteriores y actuales de las unidades básicas del SI**

Unidad	Definición anterior	Definición actual
segundo	Duración de 9 192 631 770 periodos de la radiación correspondiente a la transición entre los dos niveles hiperfinos del estado fundamental del átomo de cesio 133 (1967)	El segundo, símbolo s, es la unidad de tiempo SI. Se define fijando el valor numérico de la frecuencia de la transición hiperfina del átomo de cesio-133 en el estado fundamental no perturbado, en 9 192 631 770 Hz, donde Hz es igual a s <sup>-1</sup> .

Unidad	Definición anterior	Definición actual
metro	longitud de la trayectoria recorrida por la luz en el vacío durante un intervalo de tiempo de 1/299 792 458 de segundo (1983)	El metro, símbolo m, es la unidad de longitud SI. Se define fijando el valor numérico de la velocidad de la luz en el vacío $c$ en 299 792 458 $\text{m s}^{-1}$ , donde el segundo se define en función de la frecuencia del Cesio $\Delta\nu_{\text{Cs}}$ .
kilogramo	Masa igual a la del prototipo internacional del kilogramo (1889)	El kilogramo, símbolo kg, es la unidad de masa SI. Se define fijando el valor numérico de la constante de Planck $h$ en 6,626 070 15 $\times 10^{-34}$ cuando se expresa en la unidad J.s, igual a $\text{kg m}^2 \text{s}^{-1}$ , donde el metro y el segundo se definen en función de $c$ y $\Delta\nu_{\text{Cs}}$ .
kelvin	fracción 1/273.16 de la temperatura termodinámica del punto triple del agua (1973)	El kelvin, símbolo K, es la unidad SI de temperatura termodinámica. Se define fijando el valor numérico de la constante de Boltzmann $k$ como 1,380 649 $\times 10^{-23}$ $\text{JK}^{-1}$ , igual a $\text{kg m}^2 \text{s}^{-2} \text{K}^{-1}$ , donde el kilogramo, metro y segundo se definen en términos de $h$ , $c$ y $\Delta\nu_{\text{Cs}}$ .

Fuente: BIMP

### Dimensiones de las cantidades

Además de su valor numérico, o magnitud, y su unidad de expresión, las cantidades tienen un atributo importante denominado dimensión, que es una especie de unidad generalizada o estándar para distinguir la naturaleza de lo que se mide o cuantifica, y se expresa mediante un símbolo característico de cada cantidad fundamental, de modo que, consecuentemente, la dimensión de todas las cantidades derivadas se puede expresar en función de las primeras, aunque es posible que haya cantidades adimensionales. Es importante señalar también que las dimensiones son independientes del sistema de unidades empleado. Algo muy importante de las dimensiones es que constituyen un eficaz criterio

para verificar la homogeneidad de las ecuaciones, ya que siempre se debe cumplir que los dos lados de una ecuación sean dimensionalmente coherentes.

Las dimensiones de las cantidades empleadas frecuentemente en el estudio de la calidad del agua incluyen sólo una o más de las siguientes cuatro dimensiones: M (masa), L (longitud), T (tiempo) y  $\theta$  (temperatura). Sin embargo, la tabla i-4 muestra la dimensión de las siete cantidades fundamentales del SI:

**Tabla i-4. Dimensiones de las cantidades base del SI**

Cantidad	Símbolo	Dimensión
Tiempo	$t$	T
Longitud	$l$	L
Masa	$m$	M
Corriente eléctrica	$I$	I
Temperatura	$T$	$\theta$
Cantidad de sustancia	$n$	N
Intensidad luminosa	$I_v$	J

Las magnitudes derivadas de importancia en el contexto de la calidad del agua tienen, evidentemente, dimensiones derivadas de las cuatro principales mostradas en la tabla i-5:

**Tabla i-5. Dimensiones de algunas cantidades derivadas del SI relevantes en el estudio de la calidad del agua**

Cantidad	Símbolo	Dimensión
Área	$A$	$L^2$
Volumen	$V$	$L^3$
Velocidad	$v$	$LT^{-1}$
Aceleración	$a$	$LT^{-2}$
Densidad	$\rho$	$ML^{-3}$
Concentración	$C$	$ML^{-3}$
Flujo volumétrico (caudal)	$Q$	$L^3T^{-1}$
Flujo másico (carga másica)	$\dot{m}$	$MT^{-1}$

## Referencias

BIMP (2019) *The International System of Units*. 9th edn. París: Bureau International des Poids et Mesures.

Real Academia Española (2014) *Diccionario de la lengua española*. 23rd edn. Espasa.

Thompson, S. P. (2011) *The Life of William Thomson, Baron Kelvin of Largs*. New York: Cambridge University Press.

# Capítulo 1. CINÉTICA DE REACCIONES Y REACTORES IDEALES

## 1.1 Velocidad de una reacción

Las reacciones que ocurren en el agua, desde el punto de vista ambiental, implican la transformación de una sustancia contaminante en otras menos perjudiciales para el ambiente y las poblaciones. Su estudio requiere el conocimiento de fundamentos relativos a la velocidad con la que ocurren, incluyendo su dependencia de la temperatura y de la cantidad de las sustancias que intervienen, en lo que se ha denominado orden de la reacción.

A manera de antecedente histórico relativo a la evolución de la concepción científica de velocidad de reacción, es necesario remontarse hasta la segunda década del siglo XX, cuando, entre los años 1916 y 1918, por separado, el químico alemán Max Trautz y el fisicoquímico británico William McCullagh-Lewis, propusieron la denominada teoría de las colisiones moleculares como esquema teórico explicativo de la ocurrencia de las reacciones químicas y sus velocidades. En resumen, de acuerdo con los

### Historia complementaria

A pesar del éxito de la teoría de las colisiones con la predicción de algunas reacciones elementales, eran notables sus falencias cuando se trataba de estudiar reacciones más complejas. Con este panorama, surgió la teoría del estado de transición (teoría de complejo activado) hacia el año 1935, gracias al trabajo del norteamericano de origen mexicano Henry Eyring, desde la Universidad de Princeton, y del erudito austrohúngaro Michael Polanyi, por entonces profesor de fisicoquímica en la Universidad de Manchester, Inglaterra. Además, se cuenta la contribución del fisicoquímico británico Meredith Gwynne Evans, también desde Manchester.

La contribución a la comprensión de la cinética química inició en 1931 con el análisis de reacciones químicas bimoleculares mediante superficies de energía potencial (SEP). Este modelo cinético, desarrollado cuando Eyring era un becario por la Universidad de Wisconsin y Polanyi era profesor de química en el Instituto Kaiser Guillermo de Berlín, supone la creación de una supermolécula (carente de equilibrio estable o en cuasiequilibrio debido a su alta energía) o complejo activado, como producto de la interacción o encuentro entre dos moléculas, denominándose a esta reacción química elemental, la cual implica la reorganización de enlaces y ángulos mientras dure la interacción entre las moléculas reactivas.

En la teoría del estado de transición, la formación de los productos está condicionada a que los reactivos superen la barrera energética establecida en el estado de transición de la SEP, mientras se forma el complejo activado. Asimismo, la velocidad de la reacción se estima evaluando el tránsito del complejo activado por la cima de la SEP.

postulados de la teoría de las colisiones, una reacción química ocurre cuando dos o más moléculas chocan con suficiente energía, superior a un valor mínimo denominado energía de activación, ocasionando el rompimiento de enlaces en las moléculas reactivas para formar nuevas moléculas. No obstante, además del factor energético que está relacionado con la temperatura de las moléculas reaccionantes, una reacción química tiene más probabilidad de ocurrir si la frecuencia de los choques moleculares es alta, es decir, a mayor concentración de los reactivos, la interacción entre las moléculas es más reactiva, de modo que la velocidad de la reacción es proporcional al número de colisiones por unidad de tiempo y por unidad de volumen (Izquierdo *et al.*, 2013).

Con base en lo anterior hay elementos teóricos para establecer que la velocidad de una reacción química es una variable que depende de la cantidad de la o las sustancias que reaccionan y de otros factores, principalmente la temperatura. Una definición adecuada de la misma se presenta a continuación:

### **Definición 1.1**

*La velocidad de una reacción es el cambio en la concentración de las sustancias en interacción molecular eficaz, que provoca su disminución por unidad de tiempo y, simultáneamente, el incremento de las sustancias nuevas formadas o productos; bajo la influencia determinante y directamente proporcional de la temperatura y la concentración inicial de los reactivos.*

Matemáticamente, la velocidad de una reacción se puede expresar, en primera instancia, como una función de la temperatura y la concentración de los reactivos. Sin embargo, la historia formal de la cinética química reconoce a dos científicos noruegos, profesores de la Universidad de Oslo (en aquel entonces Universidad de Cristianía), como los autores de la primera relación matemática para la velocidad de una reacción. Los químicos Cato Maximilian Guldberg y Peter Waage propusieron en 1864 la denominada *Ley de acción de masas*, que en resumen establece que la velocidad de una reacción química es directamente proporcional al

producto de lo que llamaron “masas activas” y que, por simplicidad, podemos concebir como concentraciones de los reactivos. Su trabajo se enfocó en reacciones reversibles de la forma



Sobre la base del trabajo de Gulberg y Waage, y asumiendo que la reacción es elemental, o de un solo paso, la expresión matemática para la velocidad de las reacciones químicas adquiere la siguiente forma:

$$r = k[A]^a[B]^b \quad \text{Ec. [1.2]}$$

donde  $r_A$  es la velocidad de desaparición de la sustancia A,  $k$  representa una constante de reacción dependiente de la temperatura,  $[A]$  y  $[B]$  son las concentraciones de sustancias reactivas, y los exponentes  $a$  y  $b$  son los coeficientes estequiométricos de las sustancias A y B, respectivamente.

Aunque la velocidad de la reacción es siempre positiva, la ecuación [1.2] debe incorporar un signo menos delante de la constante cinética para indicar que desaparece la sustancia A en función del tiempo, de modo que con respecto al reactivo A, la variable  $r_A$  es su velocidad de desaparición:

$$r_A = -k[A]^a[B]^b \quad \text{Ec. [1.3]}$$

Sin embargo, es posible expresar la ley de velocidad para la formación o generación de un producto; así tendríamos que

$$r_C = +k[A]^a[B]^b \quad \text{Ec. [1.4]}$$

En general, podemos relacionar las velocidades de reacción para cada uno de los reactivos y productos de la reacción general, como sigue

$$\frac{-r_A}{a} = \frac{-r_B}{b} = \frac{r_C}{c} = \frac{r_D}{d} \quad \text{Ec. [1.5]}$$

## 1.2 Orden de una reacción

Es importante tener en cuenta que no siempre los exponentes a los que están elevadas las concentraciones en la ecuación de velocidad de la reacción corresponden exactamente a los coeficientes estequiométricos  $a$  y  $b$ . Por ello, de forma más general, la ecuación [1.3], que podría, por ejemplo, representar la velocidad de desaparición de un contaminante en el agua, se puede expresar con la siguiente notación:

$$r_A = -k[A]^m[B]^n \quad \text{Ec. [1.6]}$$

donde,  $m$  y  $n$  son el orden específico de la reacción en relación con reactivo A y en relación con el reactivo B, respectivamente. El orden general o global de reacción es la suma de los órdenes particulares, es decir,  $m + n$ .

Por otro lado, es importante puntualizar que la velocidad de una reacción y su dependencia de la concentración de los reactivos, en los términos planteados, es una variable cuantificada mediante observaciones experimentales en laboratorios, en lo que en secciones posteriores de este capítulo llamaremos reactores batch o cerrados. Con esta premisa, tomando como referencia la ecuación [1.2], en la que la dependencia de la velocidad con respecto a la cantidad de las sustancias se expresa como el producto de la concentración de ellas, se puede establecer la siguiente definición:

### **Definición 1.2**

*El orden de una reacción es un número entero positivo o cero que se determina experimentalmente y establece la potencia o el número de veces que se multiplica entre sí la concentración de la sustancia reaccionante en la ley de velocidad de la reacción, cumpliendo la función de indicar la intensidad de la dependencia de la velocidad en relación con la concentración del reactivo.*

**Clasificación de las reacciones**

En el ambiente y en sistemas artificiales, las reacciones químicas o biológicas pueden clasificarse en varios tipos. Los más importantes son:

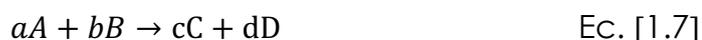
Reacciones homogéneas: aquéllas que se realizan en una sólo fase, por ejemplo, en el medio acuático.

Reacciones heterogéneas: se producen por la interacción de los reactivos en diferentes fases, por ejemplo, la disolución del oxígeno en el agua.

Reacciones irreversibles: ocurren en una sola dirección, es decir, los reactivos formarán los productos, pero los productos no podrán generar nuevamente los reactivos. Su formato general se caracteriza por la flecha en dirección de los reactivos a los productos  $aA + bB \rightarrow cC + dD$ .

Reacciones reversibles: implican la conversión incompleta de los reactivos en productos, y un proceso de reacción de los productos para volver a formar los reactivos, hasta alcanzar el equilibrio químico. Su forma general contiene una flecha de doble sentido entre los reactivos y los productos,  $aA + bB \leftrightarrow cC + dD$

Antes de abordar el proceso de deducción de las diferentes ecuaciones cinéticas para reacciones de diferente orden, es importante recordar que la ley de velocidad expresada por la ecuación [1.6], corresponde a reacciones que desarrollan en un paso simple, y que, además, las reacciones de importancia en el estudio de la calidad del agua son irreversibles y homogéneas. Así, para lo fines del uso de la cinética química a lo largo de este libro, se entenderá que las reacciones químicas se describen mediante la siguiente ecuación general:



Y que, por lo tanto, valiéndose de la premisa de que se trata de una tasa de cambio de la variable concentración en relación con la variable tiempo, la velocidad de una reacción también puede ser expresada como la derivada de la concentración con respecto al tiempo

$$r_A = -\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^m[B]^n \quad \text{Ec. [1.8]}$$

Además, en el caso más simple posible de una reacción elemental, el reactivo B podría presentarse en exceso en comparación con la concentración del reactivo A, por lo tanto, la ley de velocidad se reduce a

$$r_A = -\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^n \quad \text{Ec. [1.9]}$$

O, simplemente, y de una forma mucho más general para representar mediante el símbolo C la concentración de un contaminante que se está degradando en el medio acuoso:

$$r = -\frac{dC}{dt} = -kC^n \quad \text{Ec. [1.10]}$$

Luego de estas necesarias precisiones, el estudiante debe saber que la gran mayoría de las reacciones químicas o biológicas de importancia que ocurren en el agua se estudian como reacciones elementales, y que, además, suelen ser irreversibles y homogéneas.

### 1.2.1 Reacciones de orden cero

En una reacción de orden cero, la ley de velocidad para una reacción elemental e irreversible, expresada en la ecuación [1.10], se reduce a una ecuación en la que la tasa de desaparición o eliminación del contaminante no depende de la concentración, debido a que el exponente  $n$  adquiere un valor de cero y, consecuentemente, la potencia de la concentración se hace igual a la unidad. Así, tenemos que

$$\frac{dC}{dt} = -k \quad \text{Ec. [1.11]}$$

Luego, se resuelve la ecuación diferencial anterior, separando las variables y tomando la integral definida a ambos lados, con la condición inicial de que para un tiempo  $t = 0$  la concentración es igual a su valor inicial ( $C = C_0$ ). Los pasos sucesivos de la integración son:

$$\int_{C_0}^C dC = -k \int_0^t dt \quad \text{Ec. [1.12]}$$

$$C|_{C_0}^C = -kt|_0^t \quad \text{Ec. [1.13]}$$

$$C - C_0 = -k(t - 0) \quad \text{Ec. [1.14]}$$

De modo que la concentración final al cabo de un tiempo  $t$ , se calcula mediante la ecuación

$$\therefore C = C_0 - kt \quad \text{Ec. [1.15]}$$

Las reacciones de primer orden son poco comunes en el medio natural; sin embargo, algunos ejemplos están relacionados con procesos de fotodegradación de contaminantes orgánicos persistentes, tales como los plaguicidas. En este contexto, hay investigaciones científicas que reportan que la fotodegradación del paraquat (Moctezuma, Zamarripa y Leyva, 2003), y la degradación del herbicida 2,4-D (2,4-diclorofenoxiacético) por acción de luz ultravioleta de alta intensidad (Kundu, Pal y Dikshit, 2005), y la degradación fotocatalítica del herbicida diquat en el agua (Shibin, Yesodharan y Yesodharan, 2015), constituyen reacciones que siguen una cinética de orden cero, por lo menos bajo ciertas condiciones.

En general, cuando se requiere de catalizadores y hay saturación de los reactivos, usualmente las reacciones seguirán una cinética de orden cero. Sobre este último aspecto, la saturación, se ha demostrado que las enzimas en el cuerpo humano que metabolizan el alcohol a menudo están saturadas por la cantidad de alcohol que se ingiere, por lo que el metabolismo del alcohol es una reacción de orden cero.

Las dimensiones de la constante de reacción  $k$  en la ecuación cinética de orden cero son  $\frac{M}{L^3.T}$  o. Por lo tanto, sus unidades usuales pueden ser  $\frac{mg}{l.d}$ ,  $\frac{kg}{m^3.d}$ , etc.

### 1.2.2 Reacciones de primer orden

Cuando las reacciones son de primer orden, el valor del exponente en la ley de velocidad se sustituye por la unidad, de tal manera que la rapidez de la reacción resulta expresada como una función de la concentración de una sustancia determinada:

$$\frac{dC}{dt} = -kC \quad \text{Ec. [1.16]}$$

La ecuación diferencial [1.16] se resuelve también por integración mediante separación de variables, teniendo en cuenta una vez más la condición inicial de que para un tiempo  $t = 0$  la concentración es igual al valor inicial de la concentración ( $C = C_0$ ), valores que representan los límites inferiores de la integral definida del lado izquierdo y derecho de la ecuación diferencial, respectivamente. Además, los límites superiores se establecen bajo la condición de que para todo tiempo posterior  $t$  la concentración de la sustancia reactiva tiene un valor de  $C$ . Así, el resultado de la integración es

$$\int_{C_0}^C \frac{dC}{C} = -k \int_0^t dt \quad \text{Ec. [1.17]}$$

$$\ln C \Big|_{C_0}^C = -kt \Big|_0^t \quad \text{Ec. [1.18]}$$

$$\ln C - \ln C_0 = -k(t - 0) \quad \text{Ec. [1.19]}$$

$$\ln \left( \frac{C}{C_0} \right) = -kt \quad \text{Ec. [1.20]}$$

$$\therefore C = C_0 e^{-kt} \quad \text{Ec. [1.21]}$$

La ecuación cinética resultante denota que la concentración de la sustancia reaccionante es función de un término exponencial de exponente negativo ( $e^{-kt}$ ), por lo que su valor disminuirá a partir de la concentración inicial hasta valores que tenderán a cero a medida que

transcurra el tiempo. Su gráfica, precisamente, es una curva descendente que parte de un punto en el eje de las ordenadas y se dirige hacia el eje de las abscisas.

La mayoría de las reacciones en el ambiente, y las de mayor importancia en el agua, siguen una cinética de primer orden. El mejor ejemplo es la degradación de la materia orgánica en cuerpos de agua, medida mediante la tasa de agotamiento del oxígeno consumido por microorganismos. Más adelante se detallará esto cuando se trate la cinética de la demanda bioquímica de oxígeno o DBO. Por otro lado, diferentes investigadores han estudiado la cinética del decaimiento del cloro en el agua, principalmente en redes de distribución, y han coincidido en que originalmente la eliminación del cloro se estudiaba utilizando una ecuación cinética de primer orden (AWWARF, 1996). No obstante, la tendencia desde hace algunos años ha sido el diseño de cinéticas diferentes, principalmente cinéticas de segundo orden y de orden mixto (primer y segundo orden) (Hua *et al.*, 1999; Kastl, Fisher y Jegatheesan, 1999; Kowalska, Kowalski y Musz, 2006).

Las dimensiones de la constante de reacción  $k$  en la ecuación cinética de segundo orden son  $\frac{1}{T}$  o  $T^{-1}$ . Por lo tanto, sus unidades usuales son  $d^{-1}$ ,  $h^{-1}$ ,  $min^{-1}$ ,  $s^{-1}$ , etc.

### 1.2.3 Reacciones de segundo orden

Las reacciones de segundo orden implican una dependencia de la velocidad de la reacción con el cuadrado de la concentración de la sustancia reaccionante. La resolución de la ecuación diferencial resultante es similar a las anteriores en la separación de las variables y la selección de los límites de integración; sin embargo, se aplicará ahora la regla de la potencia  $\int x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1} + C$ . El procedimiento de deducción de la ecuación cinética resultante para la concentración a cualquier instante de tiempo se presenta a continuación:

$$\frac{dC}{dt} = -kC^2 \quad \text{Ec. [1.22]}$$

$$\frac{dC}{C^2} = -kdt \quad \text{Ec. [1.23]}$$

$$\int_{C_0}^C C^{-2} dC = -k \int_0^t dt \quad \text{Ec. [1.24]}$$

$$\left( \frac{C^{-1}}{-1} \right) \Big|_{C_0}^C = -kt \Big|_0^t \quad \text{Ec. [1.25]}$$

$$-\frac{1}{C} \Big|_{C_0}^C = -k(t - 0) \quad \text{Ec. [1.26]}$$

$$-\frac{1}{C} - \left( -\frac{1}{C_0} \right) = -kt \quad \text{Ec. [1.27]}$$

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_0} + kt \quad \text{Ec. [1.28]}$$

$$\therefore C = \frac{C_0}{1 + kC_0t} \quad \text{Ec. [1.29]}$$

La ecuación [1.29] da la variación de la concentración de la sustancia reaccionante como una función algebraica racional del tiempo y, consecuentemente, su gráfica es una hipérbola decreciente en el tiempo.

La cinética de segundo orden, aunque es mucho menos común que la de primer orden para los procesos en el agua, es utilizada incluso para modelizar la degradación de la materia orgánica. Aunque se indicó en la sección 1.2.3 que la cinética de la DBO tradicionalmente se ha estudiado asumiendo que se trata de una reacción de primer orden, desde hace algunas décadas diferentes trabajos investigativos han cuestionado tal supuesto y han defendido que la cinética de segundo orden es la mejor opción para describir la estabilización de la materia orgánica en aguas residuales y corrientes naturales contaminadas (Adrian y Sanders, 1998).

Las dimensiones de la constante de reacción  $k$  en la ecuación cinética de segundo orden son  $\frac{L^3}{M.T}$  o. Por lo tanto, sus unidades usuales pueden ser  $\frac{l}{m.g.d'}$ ,  $\frac{m^3}{kg.d'}$ , etc.

### 1.2.4 Reacciones de orden superior

Aunque las reacciones de tercer orden son muy raras, y las de orden superior no tienen ejemplos reales, a continuación, se deduce la ecuación cinética para cualquier orden de reacción

$$\frac{dC}{dt} = -kC^n \quad \text{Ec. [1.30]}$$

$$\int_{C_0}^C C^{-n} dC = -k \int_0^t dt \quad \text{Ec. [1.31]}$$

$$\left( \frac{C^{-n+1}}{-n+1} \right) \Big|_{C_0}^C = -kt \Big|_0^t \quad \text{Ec. [1.32]}$$

$$-\left( \frac{C^{-n+1}}{n-1} \right) \Big|_{C_0}^C = -k(t-0) \quad \text{Ec. [1.33]}$$

$$-\frac{1}{(C^{n-1})(n-1)} - \left[ -\frac{1}{(C_0^{n-1})(n-1)} \right] = -kt \quad \text{Ec. [1.34]}$$

$$-\frac{1}{(n-1)} \left[ \frac{1}{(C^{n-1})} - \frac{1}{(C_0^{n-1})} \right] = -kt \quad \text{Ec. [1.35]}$$

$$\frac{1}{(C^{n-1})} - \frac{1}{(C_0^{n-1})} = (n-1)kt \quad \text{Ec. [1.36]}$$

$$\frac{1}{(C^{n-1})} = \frac{1}{(C_0^{n-1})} + (n-1)kt \quad \text{Ec. [1.37]}$$

$$C^{n-1} = \frac{C_0^{n-1}}{1 + kC_0^{n-1}t} \quad \text{Ec. [1.38]}$$

$$\therefore C = \frac{C_0}{\sqrt[n-1]{1 + kC_0^{n-1}t}} \quad \text{Ec. [1.39]}$$

La ecuación [1.39] da la variación de la concentración de la sustancia reaccionante como una función algebraica racional del tiempo y, consecuentemente, su gráfica es una hipérbola decreciente en el tiempo.

En el campo de la ingeniería ambiental, algunos estudios relativos a la cinética de la DBO han concluido que ésta, a diferencia de su venerable y aún vigente modelo cinético de decaimiento basado en el primer orden, puede describir mejor los datos empíricos si se asume cinéticas multiórdenes, incluso de tercer y cuarto orden (Hewitt, Hunter y Lockwood, 1979; Adrian, Roider y Sanders, 2004).

Las dimensiones de la constante de reacción  $k$  en la ecuación cinética de segundo orden son  $\frac{L^3}{M.T}$  o. Por lo tanto, sus unidades usuales son  $\frac{l}{mg.d}$ ,  $\frac{m^3}{g.d}$ , etc.

### 1.2.5 Método integral para determinar el orden de la reacción

Uno de los métodos más populares y prácticos para determinar el orden de una reacción es el método integral, el cual se basa en un análisis de regresión lineal simple a los datos de variación de la concentración de una sustancia con respecto al tiempo de reacción. Su procedimiento implica suponer cada uno de los órdenes posibles (generalmente orden cero, primer orden y segundo orden) y utilizar el valor del coeficiente de determinación ( $R^2$ ) como criterio de determinación, de tal manera que el orden de la reacción corresponderá a aquella con el valor más alto de  $R^2$ .

Tabla 1-1 Resumen de ecuaciones cinéticas y elementos del método integral

Orden	Ecuación cinética	Ecuación lineal	Variable dependiente	Variable independiente	Intercepto	Pendiente
0	$C = C_0 - kt$	$C = C_0 - kt$	$C$	$t$	$C_0$	$-k$
1	$C = C_0 e^{-kt}$	$\ln C = \ln C_0 - kt$	$\ln C$	$t$	$\ln C_0$	$-k$
2	$C = \frac{C_0}{1 + kC_0 t}$	$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_0} + kt$	$\frac{1}{C}$	$t$	$\frac{1}{C_0}$	$+k$

**Ejercicio 1.1**

Una sustancia contaminante del agua se degrada de acuerdo con los datos mostrados a continuación, y que relacionan el cambio de su concentración medido a una frecuencia de dos días:

t (d)	0	2	4	6	8	10
C (mg/l)	22,5	19,3	15,4	12,1	9,4	7,8

Determine el orden de la reacción, empleando el método integral.

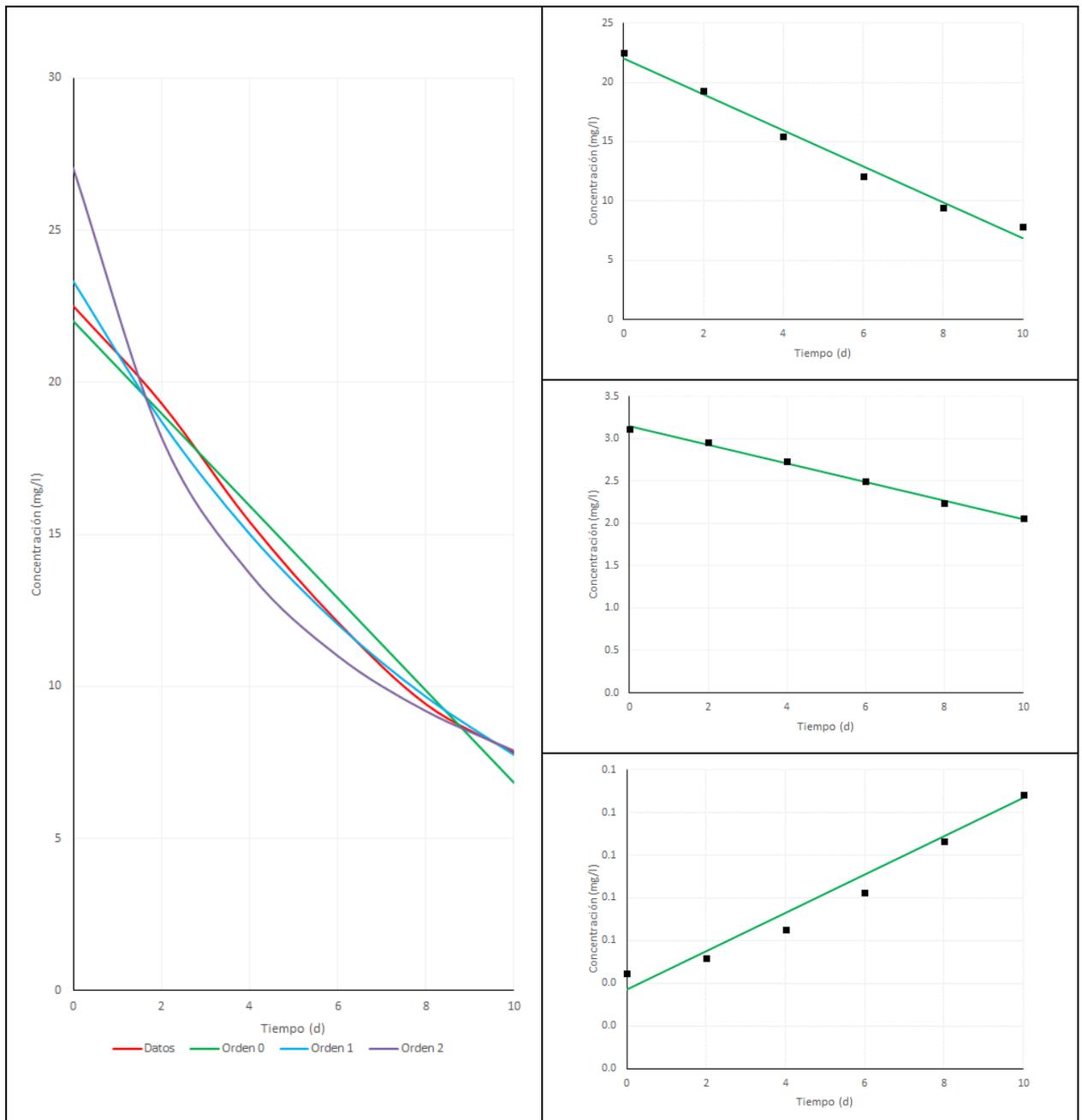
**Solución:**

Se realiza una regresión lineal simple a los datos tabulados, suponiendo cada uno de los tres órdenes posibles seleccionados, y luego se escriben las ecuaciones cinéticas y lineales de acuerdo con lo mostrado en la tabla 1-1:

	Orden cero	Primer orden	Segundo orden
a	-1,521	-0,110	0,009
b	22,024	3,149	0,037
r	-0,993	-0,997	0,989
R <sup>2</sup>	0,985	0,995	0,978

Luego, se escriben las ecuaciones lineales y cinéticas reales para cada caso, considerando la tabla 1-1:

Orden	Ecuación lineal	Ecuación cinética
0	$C = 22,024 - 1,521t$	$C = 22,024 - 1,521t$
1	$\ln C = 3,149 - 0,110t$	$C = 23,313e^{-0,110t}$
2	$\frac{1}{C} = 0,037 + 0,009t$	$C = \frac{27,027}{1 + 0,243t}$



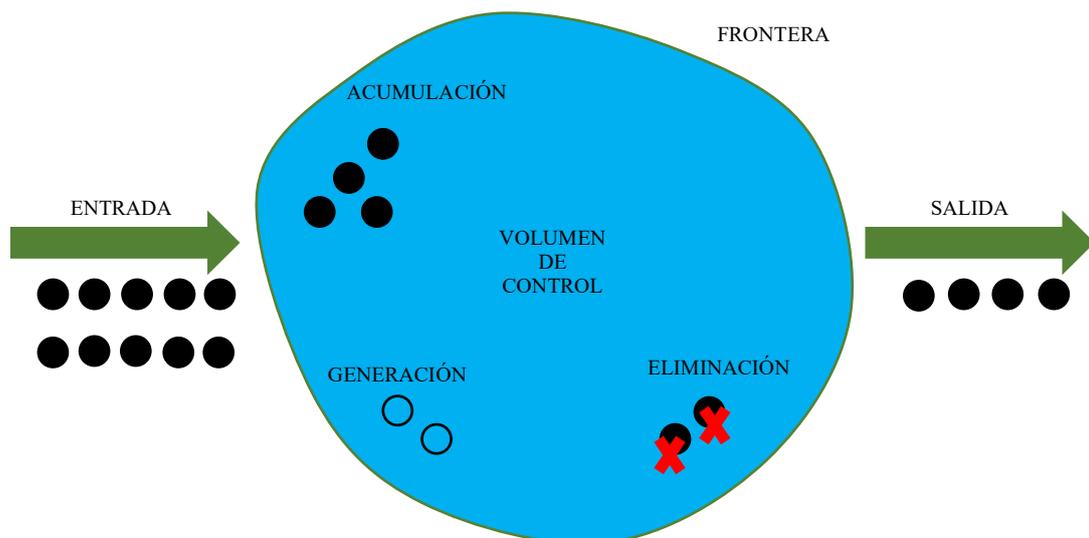
**Figura 1-1** Resumen gráfico de la aplicación del método integral para el problema resuelto: (a) curvas de concentración; (b) recta de orden cero; (c) recta de primer orden; (d) recta de segundo orden.

De acuerdo con los resultados mostrados en la figura 1-1, resulta evidente, comparando las rectas de (b), (c), y (d), que el gráfico lineal correspondiente a la suposición de primer orden (b) para la reacción, se aproxima más a los puntos de la dispersión de los datos de laboratorio. Esto confirma el valor superior de  $R^2$  (0,995) para el supuesto de reacción de primer orden en relación con el correspondiente valor de tal criterio para los supuestos de orden cero y segundo orden (0,985 y 0,978; respectivamente). La conclusión es que la reacción descrita por los datos se ajusta a una cinética de primer orden y que su ecuación cinética aproximada es  $C = 23,313e^{-0,110t}$ .

### 1.3 Balance de masa

#### 1.3.1 La ecuación general del balance de masa

Una de las más importantes herramientas del ingeniero ambiental y, de hecho, de cualquier ingeniería, es el balance de masa. Este balance que, como su nombre lo revela, es un método mediante el cual se hace una evaluación o recuento de los ingresos, salidas y cambios temporales de una sustancia en un sistema dentro de ciertos límites, puede expresarse a partir del principio de conservación de la masa: *la materia no se crea ni se destruye, solo se transforma*. Así, el balance de masa evalúa la variación temporal de la masa de una sustancia, en otras palabras, su flujo másico, en cinco estados o componentes posibles con respecto al sistema: entrada, salida, acumulación, generación y eliminación. Es preciso puntualizar, además, que el sistema se caracteriza por un límite o frontera que lo separa o aísla de su entorno, y el espacio encerrado dentro de su límite al que usualmente se le denomina volumen de control (Figura 1-2).



**Figura 1-2** Representación esquemática general de un balance de masa en el agua.

Matemáticamente, un balance de masa se expresa de la siguiente forma:

$$\text{Acumulación} = \text{Entrada} - \text{Salida} \pm \text{Reacción} \quad \text{Ec. [1.40]}$$

$$\text{Acumulación} = \text{Entrada} - \text{Salida} + \text{Generación} - \text{Eliminación} \quad \text{Ec. [1.41]}$$

$$V \frac{dC}{dt} = Q_i C_i - QC + r_G V - r_E V \quad \text{Ec. [1.42]}$$

La ecuación general del balance de masa expresada mediante [1.42] establece que la tasa de acumulación de una sustancia en un volumen de control dado es igual a la diferencia entre lo que ha ingresado y ha salido del sistema, más y menos lo que se ha formado y desaparecido por reacción, respectivamente. En la referida ecuación [1.42],  $V$  es el volumen,  $dC/dt$  es la tasa temporal de cambio de la concentración dentro del volumen de control,  $Q_i$  y  $C_i$  son el caudal y la concentración de la sustancia en la corriente que ingresa al sistema, en ese orden,  $Q$  y  $C$  son el caudal y la concentración de la sustancia en la corriente de salida del sistema, respectivamente;  $r_G$  es la velocidad de generación de la sustancia y  $r_E$  es la velocidad de eliminación o desaparición de la sustancia en el volumen de control.

Haciendo un análisis dimensional de los diferentes términos de la ecuación general del balance de masa se comprueba que se trata de un recuento de las cantidades de una sustancia en términos de su flujo másico:

$$L^3 \left( \frac{M}{L^3 T} \right) = \left( \frac{L^3}{T} \right) \left( \frac{M}{L^3} \right) - \left( \frac{L^3}{T} \right) \left( \frac{M}{L^3} \right) + \left( \frac{M}{L^3 T} \right) L^3 - \left( \frac{M}{L^3 T} \right) L^3 \quad \text{Ec. [1.43]}$$

$$\frac{M}{T} = \frac{M}{T} - \frac{M}{T} + \frac{M}{T} - \frac{M}{T} \quad \text{Ec. [1.44]}$$

Finalmente, es importante también señalar que el balance de masa puede realizarse en dos estados o condiciones diferentes: (a) en **estado estacionario**, cuando no hay cambios temporales de las variables dentro del sistema, en otras palabras, no hay acumulación de sustancias; y (b) en **estado no estacionario**, cuando la concentración dentro del sistema va

cambiando respecto del tiempo y, consecuentemente, se produce la acumulación de la sustancia dentro del volumen de control.

### 1.3.2 Balance de masa en estado estacionario

#### 1.3.2.1 Mezcla de corrientes

Cuando dos o más corrientes se encuentran en un volumen de control definido, la concentración resultante de su mezcla se calcula mediante la mayor simplificación de la ecuación general del balance de masa:

$$\text{Entrada} = \text{Salida} \quad \text{Ec. [1.45]}$$

El término entrada de la ecuación [1.45] se compone mínimo de dos corrientes que se mezclan en un volumen de control específico. No obstante, el total de entradas puede ser cualquier número entero superior a dos. Así,

$$\text{Entrada 1} + \text{Entrada 2} = \text{Salida} \quad \text{Ec. [1.46]}$$

$$Q_1 C_1 + Q_2 C_2 = Q C \quad \text{Ec. [1.47]}$$

A partir del sencillo balance de masa mostrado en la ecuación [1.47], se obtiene la expresión para calcular la concentración de un contaminante del agua como resultado de la mezcla de dos corrientes:

$$C = \frac{Q_1 C_1 + Q_2 C_2}{Q_1 + Q_2} \quad \text{Ec. [1.48]}$$

donde,  $Q_1 + Q_2 = Q$ ; esto es, el caudal de salida es la suma de los caudales de entrada al sistema. Para más de dos corrientes mezclándose, la ecuación [1.48] puede ampliarse cada vez más de acuerdo con el siguiente formato

$$C = \frac{\sum_2^n Q_i C_i}{\sum_2^n Q_i} \quad \text{Ec. [1.49]}$$

Por ejemplo, la concentración resultante de la mezcla de tres corrientes se expresa como

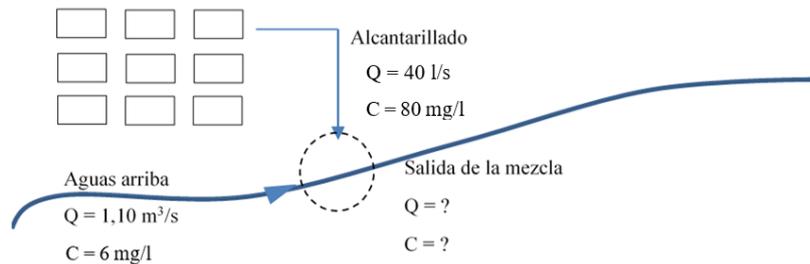
$$C = \frac{Q_1 C_1 + Q_2 C_2 + Q_3 C_3}{Q_1 + Q_2 + Q_3} \quad \text{Ec. [1.50]}$$

### Ejercicio 1.2

Un sistema de alcantarillado sanitario descarga las aguas residuales domésticas de una población urbana a razón de 40 l/s, las cuales contienen 80 mg/l de una sustancia contaminante. Aguas arriba de la descarga, el río fluye con un caudal de 1,10 m<sup>3</sup>/s y transporta el mismo contaminante arrojado por el alcantarillado, pero con una pequeña concentración de 6 mg/l. Determine la concentración del contaminante en el punto de mezcla de las dos corrientes.

#### Solución:

Siempre es útil representar los datos y condiciones del problema en un diagrama. Así, el enunciado del problema se puede ilustrar como sigue:



Por tratarse de un problema de mezcla de dos corrientes, se emplea la ecuación [1.48] para calcular la concentración del contaminante que sale del punto de mezcla:

$$C = \frac{Q_1 C_1 + Q_2 C_2}{Q_1 + Q_2} = \frac{\left(1100 \frac{l}{s}\right) \left(6 \frac{mg}{l}\right) + \left(40 \frac{l}{s}\right) \left(80 \frac{mg}{l}\right)}{1100 \frac{l}{s} + 40 \frac{l}{s}} = \frac{9800 \frac{mg}{s}}{1140 \frac{l}{s}}$$

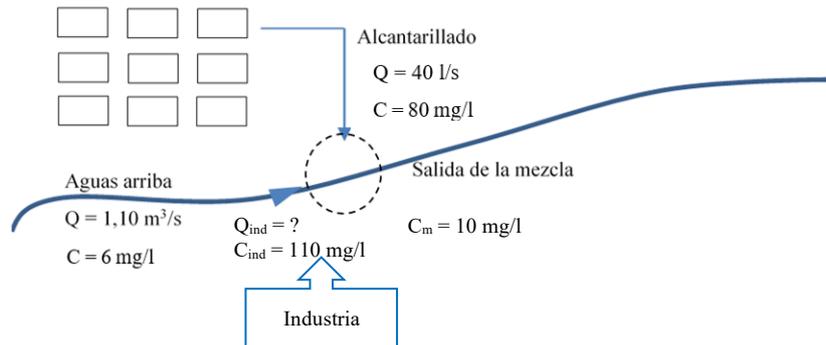
$$\therefore C = 8,60 \frac{mg}{l}$$

### Ejercicio 1.3

Suponga que además del alcantarillado del ejercicio 1.2, el río es el cuerpo receptor de las aguas residuales de una industria localizada justo frente a la descarga municipal (en la otra orilla), cuyos efluentes sin tratar van directamente al río transportando una concentración del mismo contaminante igual a 110 mg/l. ¿Cuál debería ser el caudal de la descarga industrial que permita cumplir el estándar ambiental (límite máximo permisible) del contaminante en el río, que establece que su concentración no debe superar los 10 mg/l?

**Solución:**

**Se debe actualizar el diagrama para ilustrar la nueva situación en el punto de mezcla:**



**Atendiendo a la notación de la ecuación [1.50]** y asumiendo que la entrada uno es la corriente aguas arriba del río, la entrada dos es la descarga del sistema de alcantarillado y la tercera descarga es el efluente industrial (o cualquier orden que se desee), se despeja la variable  $Q_3$  que representa el caudal de la descarga industrial. Entonces, su valor se obtiene como se muestra a continuación:

$$C = \frac{Q_1 C_1 + Q_2 C_2 + Q_3 C_3}{Q_1 + Q_2 + Q_3}$$

$$C(Q_1 + Q_2 + Q_3) = Q_1 C_1 + Q_2 C_2 + Q_3 C_3$$

$$Q_3 C - Q_3 C_3 = Q_1 C_1 - Q_1 C + Q_2 C_2 - Q_2 C$$

$$Q_3 (C - C_3) = Q_1 (C_1 - C) + Q_2 (C_2 - C)$$

$$Q_3 = \frac{Q_1 (C_1 - C) + Q_2 (C_2 - C)}{C - C_3}$$

$$Q_3 = \frac{1100 \frac{\text{l}}{\text{s}} \left( 6 \frac{\text{mg}}{\text{l}} - 10 \frac{\text{mg}}{\text{l}} \right) + 40 \frac{\text{l}}{\text{s}} \left( 80 \frac{\text{mg}}{\text{l}} - 10 \frac{\text{mg}}{\text{l}} \right)}{10 \frac{\text{mg}}{\text{l}} - 110 \frac{\text{mg}}{\text{l}}}$$

$$Q_3 = \frac{-1600 \frac{\text{mg}}{\text{s}}}{-100 \frac{\text{mg}}{\text{l}}}$$

$$\therefore Q_3 = 16,0 \frac{\text{l}}{\text{s}}$$

### 1.3.2.2 Estado estacionario y sustancia no conservativa

Como se explicó en la sección 1.2 del presente capítulo, las reacciones se rigen a una determinada ley de velocidad caracterizada por la dependencia de la rapidez de aquella con respecto a la concentración de una sustancia, denominada orden de la reacción. En este contexto, es preciso recordar que cuando una sustancia no conservativa ingresa a un cuerpo de agua puede experimentar reacciones de orden cero, primer orden y segundo orden, principalmente. Cabe aclarar, además, que los

balances de masa que el ingeniero ambiental estudia en el medio acuático son aquellos donde la sustancia involucrada es un contaminante ambiental y, por lo tanto, será de interés la eliminación de aquél, más que su posible generación, si la hubiere; en otras palabras, el término generación se suele ignorar. Esto permite establecer tres casos posibles de balance de masa en estado estacionario para una sustancia contaminante que reacciona en el agua.

### 1.3.2.2.1 Sustancia no conservativa con reacción de orden cero

Este caso de balance de masa en estado estacionario se describe como

$$0 = \text{Entrada} - \text{Salida} - \text{Eliminación} \quad \text{Ec. [1.51]}$$

$$Q_i C_i - QC - r_E V = 0 \quad \text{Ec. [1.52]}$$

Cuando la reacción es de orden cero, el término  $r_E$  de la ecuación [1.52] puede expresarse como  $-k$ , de modo que la concentración final o de salida del sistema es

$$QC = Q_i C_i + r_E V \quad \text{Ec. [1.53]}$$

Se asume  
siempre que  
 $Q_i = Q$

$$C = \frac{Q C_i - kV}{Q} \quad \text{Ec. [1.54]}$$

No obstante, si al volumen de control ingresa más de una entrada, es fácil demostrar que a partir de la ecuación [1.52] ampliada para abarcar, por ejemplo, una segunda entrada, la concentración de salida del contaminante se obtiene de la siguiente forma:

$$QC = Q_{i1} C_{i1} + Q_{i2} C_{i2} + r_E V \quad \text{Ec. [1.55]}$$

$$C = \frac{Q_{i1} C_{i1} + Q_{i2} C_{i2} - kV}{Q} \quad \text{Ec. [1.56]}$$

Resulta evidente de la ecuación [1.56] que la existencia de más de dos entradas implica simplemente la adición de más productos de la forma  $Q_{in}C_{in}$  en el numerador antes del término del producto negativo  $kV$ .

### 1.3.2.2.2 Sustancia no conservativa con reacción de primer orden

El balance de masa en estado estacionario para una sustancia no conservativa que experimenta una reacción de primer orden (desaparece del sistema de acuerdo con una cinética que depende de la concentración de la sustancia) se expresa así

$$\text{Entrada} - \text{Salida} - \text{Eliminación} = 0 \quad \text{Ec. [1.57]}$$

$$Q_i C_i - QC - kCV = 0$$

$$QC = Q_i C_i + r_E V = Q_i C_i - kCV \quad \text{Ec. [1.58]}$$

$$QC + kVC = Q_i C_i \quad \text{Ec. [1.59]}$$

$$C(Q + kV) = Q_i C_i \quad \text{Ec. [1.60]}$$

Se asume  
siempre que  
 $Q_i = Q$

$$C = \frac{Q C_i}{Q + kV} \quad \text{Ec. [1.61]}$$

Asimismo, si al volumen de control ingresan dos corrientes, la ecuación [1.61] se amplía a

$$C = \frac{Q_{i1} C_{i1} + Q_{i2} C_{i2}}{Q + kV} \quad \text{Ec. [1.62]}$$

Resulta evidente de la ecuación [1.61] que la existencia de más de dos entradas implica simplemente la adición de más productos de la forma  $Q_{in}C_{in}$  en el numerador.

### 1.3.2.2.3 Sustancia no conservativa con reacción de segundo orden

Cuando el balance de masa se plantea para evaluar el transporte y destino de una sustancia no conservativa que experimenta una reacción de segundo orden en estado estacionario, la ecuación [1.52] cambia a

$$\begin{aligned} \text{Entrada} - \text{Salida} - \text{Eliminación} &= 0 \\ Q_i C_i - QC - kC^2 V &= 0 \end{aligned} \quad \text{Ec. [1.63]}$$

Y la concentración de salida del sistema se expresa como

Ecuación  
cuadrática de la  
forma  
 $ax^2 + bx + c = 0$

$$kVC^2 + QC - Q_i C_i = 0 \quad \text{Ec. [1.64]}$$

$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$   
 $a = kV$   
 $b = Q$   
 $c = -Q_i C_i$

$$C = \frac{-Q + \sqrt{Q^2 + 4Q_i C_i kV}}{2kV} \quad \text{Ec. [1.65]}$$

Aunque una ecuación cuadrática puede tener dos soluciones distintas dependiendo del signo de la raíz cuadrada del término discriminante  $\sqrt{b^2 - 4ac}$ , la concentración de salida siempre se calcula empleando la solución con el signo más antes del radical, tal como está en la ecuación [1.65]; de lo contrario, sería posible obtener una concentración de signo negativo, que carece de sentido absoluto.

De manera similar a los dos casos anteriores, si hay una entrada adicional, es sencillo demostrar, a partir de la ecuación [1.64], que la concentración de salida se expresa como

$$kVC^2 + QC - (Q_{i1} C_{i1} + Q_{i2} C_{i2}) = 0 \quad \text{Ec. [1.66]}$$

$$C = \frac{-Q + \sqrt{Q^2 + 4(Q_{i1} C_{i1} + Q_{i2} C_{i2})kV}}{2kV} \quad \text{Ec. [1.67]}$$

Resulta evidente de la ecuación [1.67] que la existencia de más de dos entradas implica simplemente la adición de más productos de la forma  $Q_{in} C_{in}$  dentro del factor que forma parte del segundo término dentro del radical.

**Ejercicio 1.4**

En una laguna de 100 000 m<sup>3</sup> de volumen es alimentada permanentemente por un riachuelo prístino que desemboca en ella con un caudal de 0,085 m<sup>3</sup>/s. La laguna es utilizada como cuerpo receptor de la descarga de las aguas residuales de una industria localizada en la cercanía; tal descarga se produce a razón de 10 l/s y llevando un contaminante con una concentración igual a 100 mg/l. Si se puede suponer que se produce la mezcla completa del contaminante dentro de la laguna y que no hay cambios temporales en el sistema (estado estacionario), determine el valor de la constante de reacción, expresando el tiempo en días (d), el volumen en litros (l) y la masa en miligramos (mg), si se debe cumplir un estándar ambiental de 2 mg/l, y el contaminante no conservativo desaparece conforme a una cinética de (a) orden cero, (b) primer orden, y (c) segundo orden.

**Solución:**

**(a) Se debe despejar la constante de la ecuación** [1.56], por haber dos entradas a la laguna y tratarse de una reacción de orden cero:

$$C = \frac{Q_{i1}C_{i1} + Q_{i2}C_{i2} - kV}{Q}$$

$$QC = Q_{i1}C_{i1} + Q_{i2}C_{i2} - kV$$

$$kV = Q_{i1}C_{i1} + Q_{i2}C_{i2} - QC$$

$$k = \frac{Q_{i1}C_{i1} + Q_{i2}C_{i2} - QC}{V}$$

Luego, reemplazando los valores dados para cada variable se obtiene

$$k = \frac{\left(85 \frac{l}{s}\right)\left(0 \frac{mg}{l}\right) + \left(10 \frac{l}{s}\right)\left(100 \frac{mg}{l}\right) - \left(85 \frac{l}{s} + 10 \frac{l}{s}\right)\left(2 \frac{mg}{l}\right)}{100000 m^3}$$

$$k = \frac{810 \frac{mg}{s}}{100000 m^3 \left(\frac{1000 l}{1 m^3}\right)} = 8,1 \times 10^{-6} \frac{mg}{s \cdot l} \left(\frac{86400 s}{1 d}\right)$$

$$\therefore k = 0,70 \frac{mg}{l \cdot d}$$

**(b) Despejando la constante cinética de la ecuación** [1.62], la concentración de salida se calcula como sigue

$$C = \frac{Q_{i1}C_{i1} + Q_{i2}C_{i2}}{Q + kV}$$

$$Q + kV = \frac{Q_{i1}C_{i1} + Q_{i2}C_{i2}}{C}$$

$$k = \frac{Q_{i1}C_{i1} + Q_{i2}C_{i2}}{VC} - \frac{Q}{V}$$

Luego, reemplazando los valores dados para cada variable se obtiene

$$k = \frac{\left(85 \frac{l}{s}\right)\left(0 \frac{mg}{l}\right) + \left(10 \frac{l}{s}\right)\left(100 \frac{mg}{l}\right)}{100000 m^3 \left(\frac{1000 l}{1 m^3}\right)\left(2 \frac{mg}{l}\right)} - \frac{85 \frac{l}{s} + 10 \frac{l}{s}}{100000 m^3 \left(\frac{1000 l}{1 m^3}\right)}$$

$$k = \frac{10^3 \frac{mg}{s}}{2 \times 10^8 mg} - \frac{95 \frac{l}{s}}{10^8 l} = 5 \times 10^{-6} \frac{1}{s} - 0,95 \times 10^{-6} \frac{1}{s} = 4,05 \times 10^{-6} \frac{1}{s}$$

$$k = 4,905 \times 10^{-6} \frac{1}{s} \left(\frac{86400 s}{1 d}\right)$$

$$\therefore k = 0,35 d^{-1}$$

(c) A diferencia de los dos casos anteriores en los que se despeja la constante cinética en la ecuación de la concentración de salida, aunque ciertamente es posible hacerlo a partir de la ecuación [1.67], es más sencillo despejar la constante utilizando la ecuación cuadrática igualada a cero, ecuación [1.66], de modo que

$$kVC^2 + QC - (Q_{i1}C_{i1} + Q_{i2}C_{i2}) = 0$$

$$k = \frac{(Q_{i1}C_{i1} + Q_{i2}C_{i2}) - QC}{VC^2}$$

Luego, reemplazando los valores dados para cada variable se obtiene

$$k = \frac{\left(85 \frac{l}{s}\right)\left(0 \frac{mg}{l}\right) + \left(10 \frac{l}{s}\right)\left(100 \frac{mg}{l}\right) - \left(85 \frac{l}{s} + 10 \frac{l}{s}\right)\left(2 \frac{mg}{l}\right)}{100000 m^3 \left(\frac{1000 l}{1 m^3}\right)\left(2 \frac{mg}{l}\right)^2} = \frac{810 \frac{mg}{s}}{4 \times 10^8 \frac{mg^2}{l}}$$

$$\therefore k = 4,05 \times 10^{-6} \frac{l}{mg \cdot s} \left(\frac{86400 s}{1 d}\right)$$

$$\therefore k = 0,175 \frac{l}{mg \cdot d}$$

### 1.3.3 Balance de masa en estado no estacionario

#### 1.3.3.1 Estado no estacionario y sustancia conservativa (volumen constante)

Como se recordará de la sección 1.3.1, el estado no estacionario implica la acumulación de una sustancia dentro del volumen de control, debido a que hay un cambio temporal de la concentración, esto es la derivada localizada en el lazo izquierdo de la ecuación [1.41], en este caso, tendrá siempre un valor diferente de cero. Si el contaminante evaluado en el sistema es conservativo y el volumen permanece constante, entonces la ecuación que da el valor de la concentración final se obtiene así

$$V \frac{dC}{dt} = QC_i - QC \quad \text{Ec. [1.68]}$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{Q(C_i - C)}{V} \quad \text{Ec. [1.69]}$$

Separación de variables

$$\frac{dC}{C_i - C} = \frac{Q}{V} dt \quad \text{Ec. [1.70]}$$

Sea  $u = C_i - C$ , de modo que  $\frac{du}{dC} = -1$ , resultando  $du = -dC$ . Luego, se hacen las sustituciones correspondientes en el lado izquierdo de la ecuación [1.70] para obtener la expresión integrable  $\frac{du}{u}$ ; tome en cuenta que, para ello, es

necesario añadir un signo menos al diferencial de la concentración ( $dC$ ) para que sea posible sustituirlo en el numerador por  $du$  y, además, cambiar el signo de la fracción a negativo para no alterar su signo positivo original ( $- \times - = +$ ). Así, los pasos deductivos sucesivos son:

$$-\frac{dC}{u} = \frac{Q}{V} dt \quad \text{Ec. [1.71]}$$

Integración  
por separación  
de variables

$$\int_{C_0}^C \frac{du}{u} = -\frac{Q}{V} \int_0^t dt \quad \text{Ec. [1.72]}$$

$$\ln u \Big|_{C_0}^C = -\left(\frac{Q}{V}\right) t \Big|_0^t \quad \text{Ec. [1.73]}$$

Sustitución de  
la variable  
auxiliar por la  
original

$$\ln(C_i - C) \Big|_{C_0}^C = -\left(\frac{Q}{V}\right) (t - 0) \quad \text{Ec. [1.74]}$$

Evaluación de  
la integral

$$\ln(C_i - C) - \ln(C_i - C_0) = -\left(\frac{Q}{V}\right) t \quad \text{Ec. [1.75]}$$

Propiedad del  
logaritmo de  
un cociente

$$\ln\left(\frac{C_i - C}{C_i - C_0}\right) = -\left(\frac{Q}{V}\right) t \quad \text{Ec. [1.76]}$$

Aplicación de  
exponenciales  
y propiedad  
 $e^{\ln x} = x$

$$\frac{C_i - C}{C_i - C_0} = e^{-\left(\frac{Q}{V}\right) t} \quad \text{Ec. [1.77]}$$

$$C_i - C = (C_i - C_0) e^{-\left(\frac{Q}{V}\right) t} \quad \text{Ec. [1.78]}$$

$$\therefore C = C_0 e^{-\left(\frac{Q}{V}\right) t} + C_i \left[1 - e^{-\left(\frac{Q}{V}\right) t}\right] \quad \text{Ec. [1.79]}$$

## NOTA DE INTERÉS

Los científicos utilizan las ecuaciones diferenciales como herramientas para la descripción matemática de los procesos o fenómenos de interés para la ingeniería o la ciencia; en otras palabras, las ecuaciones diferenciales son los modelos matemáticos utilizados para describir fenómenos naturales y procesos artificiales, bajo determinadas condiciones y supuestos. Teniendo en cuenta que las ecuaciones diferenciales pueden clasificarse de acuerdo con tres criterios (tipo, linealidad y orden), cualquier interesado en la modelización matemática de sistemas hídricos debe saber que un buen número de casos, como se verá a lo largo del libro, puede abordarse desde la manipulación de ecuaciones diferenciales lineales de primer orden. Este tipo de ecuaciones diferenciales ordinarias se define de la siguiente forma para la variable dependiente  $y$ :

$$a_1(x) \frac{dy}{dx} + a_0(x)y = h(x)$$

Sin embargo, por su utilidad, se prefiere expresar las ecuaciones diferenciales lineales de primer orden en su forma estándar o canónica

$$\frac{dy}{dx} + P(x)y = g(x)$$

Debe tenerse en cuenta que si la función  $g(x) = 0$ , entonces la ecuación diferencial es homogénea y fácilmente puede resolverse mediante el método de separación de variables. No obstante, existe un método más general que permite hallar la solución de la ecuación diferencial lineal de primer orden tanto cuando es homogénea como cuando es no homogénea, esto es, cuando  $g(x) \neq 0$ . Este método se denomina del factor integrante que se calcula mediante la expresión

$$e^{\int P(x)dx}$$

El procedimiento de resolución de una ecuación diferencial lineal de primer orden mediante el método del factor integrante requiere de multiplicar cada miembro de la forma estándar por el factor integrante, de modo que el lado izquierdo pueda expresarse como la derivada del producto entre la variable dependiente y el factor integrante; esto es

$$e^{\int P(x)dx} \frac{dy}{dx} + e^{\int P(x)dx} P(x)y = e^{\int P(x)dx} g(x)$$

$$\frac{d[e^{\int P(x)dx} y]}{dx} = e^{\int P(x)dx} g(x)$$

Integrando ambos lados de la ecuación diferencial resultante de aplicar el método del factor integrante, se obtiene una familia de soluciones de acuerdo con el siguiente formato:

$$y = e^{-\int P(x)dx} \int e^{\int P(x)dx} g(x)dx + ce^{-\int P(x)dx}$$

donde  $c$  es una constante de integración, cuyo valor se define con base en condiciones iniciales determinadas para cada situación particular.

Fuente: Zill and Wright, 2015

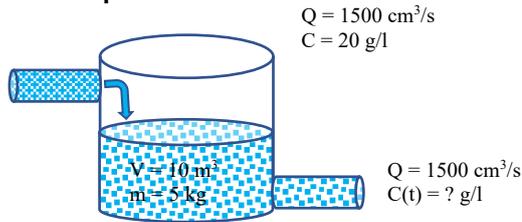
**Ejercicio 1.5**

Una solución de salmuera (sal disuelta en agua) ingresa a un tanque de dilución con un flujo volumétrico de 1500 cm<sup>3</sup>/s llevando una concentración de sal igual a 20 g/l. Previamente, el tanque contenía 10 m<sup>3</sup> de agua y 5 kg de sal disueltos en ella. Asumiendo que hay mezcla completa dentro del tanque, (a) evalúe la variación temporal de la concentración de sal dentro del tanque, (b) ¿cuánto tiempo deberá transcurrir para que la concentración de sal dentro del tanque sea la mitad de lo que ingresó?

Nota: la sal es una sustancia conservativa.

**Solución:**

Recuerde que un diagrama representativo del problema ayuda a visualizar mejor los detalles del problema



(a) Tome en cuenta que, si la mezcla es completa, la cantidad de sal dentro del tanque es la misma que en la corriente de salida. Entonces, utilizando la ecuación [1.79] se calcula la concentración de salida a varios instantes de tiempo para definir la tendencia de la variación; por ejemplo, a las 5 horas el resultado sería

$$C(5h) = \left(\frac{5kg}{10m^3}\right) \left(\frac{10^3g}{1kg}\right) \left(\frac{1m^3}{10^3l}\right) e^{-\left(\frac{1,5\frac{l}{s}}{10^4l}\right)5h\left(\frac{3600s}{1h}\right)} + 20\frac{g}{l} \left[1 - e^{-\left(\frac{1,5\frac{l}{s}}{10^4l}\right)5h\left(\frac{3600s}{1h}\right)}\right]$$

$$C(5h) = 18,69\frac{g}{l}$$

Este cálculo se repite tantas veces sean necesarias para trazar la curva representativa de la variación temporal de la concentración de sal dentro del tanque:

t (h)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
C (g/l)	0,50	8,64	13,38	16,14	17,75	18,69	19,24	19,55	19,74	19,85	19,91	19,95	19,97	19,98	19,99	19,99	20,00	20,00

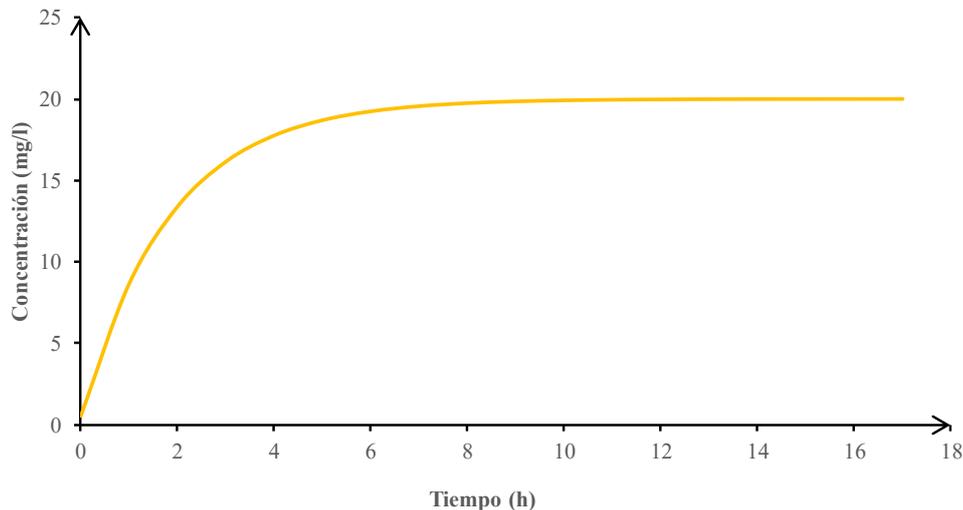


Figura 1-3 Curva de concentración resultante en el ejercicio 1.5.

Como se observa en el gráfico, la concentración de sal dentro del tanque tiende a estabilizarse alcanzando el valor de la concentración de entrada de la salmuera (20 mg/l). Esto siempre sucede en este caso.

(b) Para calcular el tiempo exacto cuando la concentración de sal dentro del tanque es igual a la mitad de la concentración de entrada, la opción es despejar la variable tiempo de la ecuación [1.79], o directamente de la ecuación [1.76], y hallar su valor cuando la concentración final tiene tal valor; esto es

$$t = \frac{V}{Q} \ln \left( \frac{C_i - C_0}{C_i - C} \right)$$

$$t = \frac{10m^3}{1,5 \frac{l}{s} \left( \frac{1m^3}{10^3l} \right)} \ln \left( \frac{20 \frac{g}{l} - 0,5 \frac{g}{l}}{20 \frac{g}{l} - 10 \frac{g}{l}} \right) = 4452 s \left( \frac{1 h}{3600 s} \right) = 1,24 h$$

$$t = 1 h y 14 min$$

### 1.3.3.2 Estado no estacionario y sustancia conservativa (volumen variable)

Cuando el volumen del sistema cambia con el tiempo, es preciso incorporarlo dentro de la derivada temporal que expresa la acumulación del contaminante. Esta condición hace que la ecuación [1.68] cambie a

$$\frac{d(VC)}{dt} = Q_i C_i - QC \quad \text{Ec. [1.80]}$$

$$V \frac{dC}{dt} + \frac{dV}{dt} C = Q_i C_i - QC \quad \text{Ec. [1.81]}$$

La resolución de la ecuación diferencial [1.81] requiere hacer un balance de volumen para determinar la expresión equivalente del volumen V:

$$\frac{dV}{dt} = Q_i - Q \quad \text{Ec. [1.82]}$$

$$\int_{V_0}^V dV = (Q_i - Q) \int_0^t dt \quad \text{Ec. [1.83]}$$

$$V - V_0 = (Q_i - Q)t \quad \text{Ec. [1.84]}$$

$$V = V_0 + (Q_i - Q)t \quad \text{Ec. [1.85]}$$

Entonces, reemplazando las ecuaciones [1.82] y [1.85] en la [1.81] se obtiene

$$[V_0 + (Q_i - Q)t] \frac{dC}{dt} + (Q_i - Q)C = Q_i C_i - QC \quad \text{Ec. [1.86]}$$

$$[V_0 + (Q_i - Q)t] \frac{dC}{dt} = Q_i C_i - QC - Q_i C + QC \quad \text{Ec. [1.87]}$$

Separación de variables

$$\frac{dC}{Q_i C_i - Q_i C} = \frac{dt}{V_0 + (Q_i - Q)t} \quad \text{Ec. [1.88]}$$

Factor común

$$\left( \frac{1}{Q_i} \right) \frac{dC}{C_i - C} = \frac{dt}{V_0 + (Q_i - Q)t} \quad \text{Ec. [1.89]}$$

$u = C_i - C$	$w = V_0 + (Q_i - Q)t$
$\frac{du}{dC} = -1$	$\frac{dw}{dC} = -(Q_i - Q)$
$du = -dC$	$dw = -(Q_i - Q)dC$

Factor común  $\left(-\frac{1}{Q_i}\right) \frac{-dC}{u} = \left(\frac{1}{Q_i - Q}\right) \frac{(Q_i - Q)dt}{w}$  Ec. [1.90]

$$\left(-\frac{1}{Q_i}\right) \frac{du}{u} = \left(\frac{1}{Q_i - Q}\right) \frac{dw}{w}$$
 Ec. [1.91]

$$\int_{C_0}^C \frac{du}{u} = -\left(\frac{Q_i}{Q_i - Q}\right) \int_0^t \frac{dw}{w}$$
 Ec. [1.92]

$$\ln u \Big|_{C_0}^C = -\left(\frac{Q_i}{Q_i - Q}\right) \ln w \Big|_0^t$$
 Ec. [1.93]

$$\ln(C_i - C) \Big|_{C_0}^C = -\left(\frac{Q_i}{Q_i - Q}\right) \ln[V_0 + (Q_i - Q)t] \Big|_0^t$$
 Ec. [1.94]

$$\ln(C_i - C) - \ln(C_i - C_0) = -\left(\frac{Q_i}{Q_i - Q}\right) \{\ln[V_0 + (Q_i - Q)t] - \ln[V_0]\}$$
 Ec. [1.95]

$$\ln\left(\frac{C_i - C}{C_i - C_0}\right) = -\left(\frac{Q_i}{Q_i - Q}\right) \ln\left[\frac{V_0 + (Q_i - Q)t}{V_0}\right]$$
 Ec. [1.96]

$$\frac{C_i - C}{C_i - C_0} = \left[\frac{V_0 + (Q_i - Q)t}{V_0}\right]^{-\left(\frac{Q_i}{Q_i - Q}\right)}$$
 Ec. [1.97]

$$\frac{C_i - C}{C_i - C_0} = \left[1 + \frac{(Q_i - Q)t}{V_0}\right]^{-\left(\frac{Q_i}{Q_i - Q}\right)}$$
 Ec. [1.98]

$$C_i - C = (C_i - C_0) \left[1 + \frac{(Q_i - Q)t}{V_0}\right]^{-\left(\frac{Q_i}{Q_i - Q}\right)}$$
 Ec. [1.99]

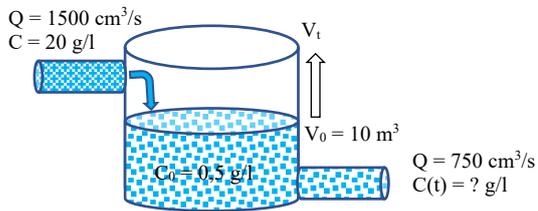
$$\therefore C = C_i - (C_i - C_0) \left[1 + \frac{(Q_i - Q)t}{V_0}\right]^{-\left(\frac{Q_i}{Q_i - Q}\right)}$$
 Ec. [1.100]

**Ejercicio 1.6**

Resuelva el ejercicio 1.5 suponiendo que el volumen dentro del tanque varíe haciendo que el caudal de salida sea la mitad del de entrada. ¿Cuál debería ser el volumen del tanque para que contenga la mitad de la concentración de salmuera que ingresa?

**Solución:**

El diagrama representativo del problema se actualiza así

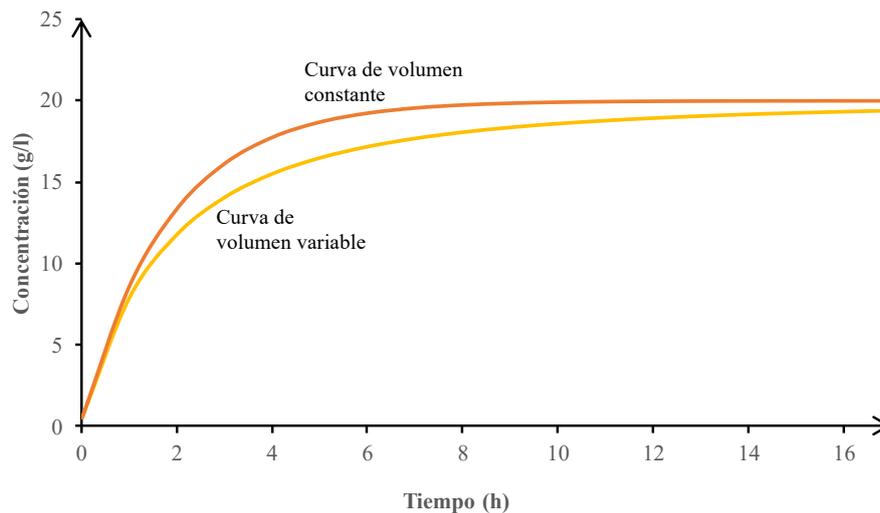


(a) Utilizando la ecuación [1.100] se calcula la concentración de sal dentro del tanque (igual a la de salida por la mezcla completa) a varios instantes de tiempo para definir la evolución de la concentración; por ejemplo, a los 5 h el resultado sería

$$C(5 h) = 20 \frac{g}{l} - \left(20 \frac{g}{l} - 0,5 \frac{g}{l}\right) \left[1 + \frac{\left(1,5 \frac{l}{s} - 0,75 \frac{l}{s}\right) 5 \text{ min} \left(\frac{60 s}{1 \text{ min}}\right)}{10 m^3 \left(\frac{10^3 l}{1 m^3}\right)}\right]^{-\left(\frac{1,5 \frac{l}{s}}{1,5 \frac{l}{s} - 0,75 \frac{l}{s}}\right)} = 16,47 \frac{g}{l}$$

La variación temporal de la concentración de sal dentro del tanque con volumen variable de solución se muestra en la siguiente tabla y gráfico:

t (h)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
C (g/l)	0,50	7,91	11,78	14,05	15,49	16,47	17,16	17,67	18,05	18,34	18,58	18,76	18,92	19,04	19,15	19,24	19,31	19,38



**Figura 1-4** Comparación entre las curvas de concentración resultantes en los ejercicios 1.5 y 1.6.

En comparación con la curva de estado no estacionario de volumen constante para una sustancia no conservativa, la curva de concentración para un volumen variable muestra una tendencia más lenta para alcanzar el estado estacionario: en este caso la concentración dentro del tanque iguala a la de entrada (20 g/l) luego de muchas más horas.

(b) El tiempo exacto que debe transcurrir para que la concentración de sal dentro del tanque sea igual a la mitad de la concentración de entrada es el obtenido a partir de la ecuación [1.100] tal como sigue:

$$t = \left( \frac{V_0}{Q_i - Q} \right) \left[ \left( \frac{C_i - C}{C_i - C_0} \right)^{\frac{Q_i - Q}{Q_i}} - 1 \right]$$

$$t = \frac{10m^3 \left( \frac{10^3 l}{1m^3} \right)}{1,5 \frac{l}{s} - 0,75 \frac{l}{s}} \left[ \left( \frac{20 \frac{g}{l} - 10 \frac{g}{l}}{20 \frac{g}{l} - 0,5 \frac{g}{l}} \right)^{\frac{1,5 \frac{l}{s} - 0,75 \frac{l}{s}}{1,5 \frac{l}{s}}} - 1 \right] = 5285,65 s = 1,468 h$$

$$t = 1 h \text{ y } 28 \text{ min}$$

(c) El volumen necesario del tanque para contener una concentración igual a 10 g/l se calcula con la ecuación [1.85] para el tiempo correspondiente:

$$V = 10m^3 + \left( 1,5 \frac{l}{s} - 0,75 \frac{l}{s} \right) (5285,65 s) \left( \frac{1m^3}{10^3 l} \right)$$

$$V = 14 m^3$$

### 1.3.3.3 Estado no estacionario y sustancia no conservativa

#### 1.3.3.3.1 Estado no estacionario para una reacción de orden cero

Cuando una sustancia no conservativa reacciona (desaparece) en el interior de un volumen de control en estado no estacionario de acuerdo con una cinética de orden cero, la ecuación del balance de masa, a partir de la ecuación [1.42], se expresa de la siguiente forma:

$$V \frac{dC}{dt} = QC_i - QC - kV \quad \text{Ec. [1.101]}$$

La resolución de la ecuación diferencial [1.101] se puede desarrollar mediante el método del factor integrante, para lo cual se debe expresarla en la forma estándar de una ecuación diferencial lineal de primer orden,  $\frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x)$ , y determinar su factor integrante:

$$\frac{dC}{dt} + \left( \frac{Q}{V} \right) C = \frac{Q}{V} C_i - k \quad \text{Ec. [1.102]}$$

Factor  
integrante

$$e^{\int \left( \frac{Q}{V} \right) dt} = e^{\left( \frac{Q}{V} \right) t} \quad \text{Ec. [1.103]}$$

De modo que, multiplicando ambos miembros de la ecuación por el factor de integración tenemos

$$\left[ \frac{dC}{dt} + \left( \frac{Q}{V} \right) C \right] e^{\left( \frac{Q}{V} \right) t} = \left( \frac{QC_i}{V} - k \right) e^{\left( \frac{Q}{V} \right) t} \quad \text{Ec. [1.104]}$$

Luego, el lado izquierdo de la ecuación diferencial se expresa como una derivada del producto, así

$$\frac{d \left[ e^{\left( \frac{Q}{V} \right) t} \cdot C \right]}{dt} = \left( \frac{QC_i}{V} - k \right) e^{\left( \frac{Q}{V} \right) t} \quad \text{Ec. [1.105]}$$

Al integrar ambos lados se obtiene

$$\int \frac{d(e^{\beta t} \cdot C)}{dt} = \left( \frac{QC_i}{V} - k \right) \int e^{\beta t} \quad \text{Ec. [1.106]}$$

$$e^{\beta t} \cdot C = \left( \frac{QC_i}{V} - k \right) \left( \frac{1}{\beta} \right) e^{\beta t} + I \quad \text{Ec. [1.107]}$$

El valor de la constante de integración se determina a partir de las condiciones iniciales  $t = 0 \rightarrow C = C_0$ . Entonces,

$$e^{(0)t} \cdot C_0 = \left( \frac{QC_i}{V} - k \right) \left( \frac{1}{\beta} \right) e^{(0)t} + I \quad \text{Ec. [1.108]}$$

$$C_0 = \left( \frac{QC_i}{V} - k \right) \left( \frac{1}{\beta} \right) + I \quad \text{Ec. [1.109]}$$

$$I = C_0 - \left( \frac{QC_i}{V\beta} - \frac{k}{\beta} \right) \quad \text{Ec. [1.110]}$$

Finalmente, reemplazando la constante de integración en la ecuación [1.107], se obtiene la ecuación que da la concentración de salida del volumen de control. Los pasos sucesivos son:

$$C = \frac{\left( \frac{QC_i}{V\beta} - \frac{k}{\beta} \right) e^{\beta t}}{e^{\beta t}} + \frac{\left[ C_0 - \left( \frac{QC_i}{V\beta} - \frac{k}{\beta} \right) \right]}{e^{\beta t}} \quad \text{Ec. [1.111]}$$

$$C = \left( \frac{QC_i}{V\beta} - \frac{k}{\beta} \right) + \left[ C_0 - \left( \frac{QC_i}{V\beta} - \frac{k}{\beta} \right) \right] e^{-\beta t} \quad \text{Ec. [1.112]}$$

$$C = \left( \frac{QC_i}{V\beta} - \frac{k}{\beta} \right) + C_0 e^{-\beta t} - \left( \frac{QC_i}{V\beta} - \frac{k}{\beta} \right) e^{-\beta t} \quad \text{Ec. [1.113]}$$

$$C = C_0 e^{-\beta t} + \left( \frac{QC_i}{V\beta} - \frac{k}{\beta} \right) (1 - e^{-\beta t}) \quad \text{Ec. [1.114]}$$

$$C = C_0 e^{-\left(\frac{Q}{V}\right)t} + \left[ \frac{QC_i}{V\left(\frac{Q}{V}\right)} - \frac{k}{\left(\frac{Q}{V}\right)} \right] \left( 1 - e^{-\left(\frac{Q}{V}\right)t} \right) \quad \text{Ec. [1.115]}$$

$$\therefore C = C_0 e^{-\left(\frac{Q}{V}\right)t} + \left( C_i - \frac{kV}{Q} \right) \left[ 1 - e^{-\left(\frac{Q}{V}\right)t} \right] \quad \text{Ec. [1.116]}$$

### 1.3.3.3.2 Estado no estacionario para una reacción de primer orden

Este caso de balance de masa también implica la formación de una ecuación diferencial lineal de primer orden a partir de la ecuación [1.42]. Por lo tanto, aplicando el método del factor integrante, el procedimiento deductivo de la ecuación de la concentración de salida es el siguiente:

$$V \frac{dC}{dt} = QC_i - QC - kCV \quad \text{Ec. [1.117]}$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{Q}{V} C_i - \frac{Q}{V} C - kC \quad \text{Ec. [1.118]}$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{Q}{V} C_i - C \left( \frac{Q}{V} + k \right) \quad \text{Ec. [1.119]}$$

$$\frac{dC}{dt} + \left( \frac{Q}{V} + k \right) C = \frac{Q}{V} C_i \quad \text{Ec. [1.120]}$$

Forma  
estándar de la  
ecuación  
diferencial  
lineal

$$\left[ \frac{dC}{dt} + \left( \frac{Q}{V} + k \right) C \right] e^{\left(\frac{Q}{V}+k\right)t} = \frac{Q}{V} C_i e^{\left(\frac{Q}{V}+k\right)t} \quad \text{Ec. [1.121]}$$

$$\frac{d \left[ e^{\left(\frac{Q}{V}+k\right)t} \cdot C \right]}{dt} = \frac{Q}{V} C_i e^{\left(\frac{Q}{V}+k\right)t} \quad \text{Ec. [1.122]}$$

$$\int \frac{d \left[ e^{\left(\frac{Q}{V}+k\right)t} \cdot C \right]}{dt} = \frac{Q}{V} C_i \int e^{\left(\frac{Q}{V}+k\right)t} \quad \text{Ec. [1.123]}$$

Cálculo de la integral indefinida

$$e^{(\frac{Q}{V}+k)t} \cdot C = \frac{Q}{V} C_i \left[ \frac{1}{(\frac{Q}{V} + k)} \right] e^{(\frac{Q}{V}+k)t} + I \quad \text{Ec. [1.124]}$$

Condiciones iniciales ( $t = 0 \rightarrow C = C_0$ )

$$e^{(0)t} \cdot C_0 = \frac{Q}{V} C_i \left[ \frac{1}{(\frac{Q}{V} + k)} \right] e^{(0)t} + I \quad \text{Ec. [1.125]}$$

$$C_0 = \frac{Q C_i}{V (\frac{Q}{V} + k)} + I \quad \text{Ec. [1.126]}$$

$$I = C_0 - \frac{Q C_i}{V (\frac{Q}{V} + k)} \quad \text{Ec. [1.127]}$$

$$C = \frac{\frac{Q C_i}{V (\frac{Q}{V} + k)} e^{(\frac{Q}{V}+k)t}}{e^{(\frac{Q}{V}+k)t}} + \frac{C_0 - \frac{Q C_i}{V (\frac{Q}{V} + k)}}{e^{(\frac{Q}{V}+k)t}} \quad \text{Ec. [1.128]}$$

$$C = \frac{Q C_i}{V (\frac{Q}{V} + k)} + \left[ C_0 - \frac{Q C_i}{V (\frac{Q}{V} + k)} \right] e^{-(\frac{Q}{V}+k)t} \quad \text{Ec. [1.129]}$$

$$C = \frac{Q C_i}{V (\frac{Q}{V} + k)} + C_0 e^{-(\frac{Q}{V}+k)t} - \frac{Q C_i}{V \beta} e^{-(\frac{Q}{V}+k)t} \quad \text{Ec. [1.130]}$$

$$C = C_0 e^{-(\frac{Q}{V}+k)t} + \frac{Q C_i}{V (\frac{Q}{V} + k)} \left[ 1 - e^{-(\frac{Q}{V}+k)t} \right] \quad \text{Ec. [1.131]}$$

$$\therefore C = C_0 e^{-(\frac{Q}{V}+k)t} + \frac{Q C_i}{Q + kV} \left[ 1 - e^{-(\frac{Q}{V}+k)t} \right] \quad \text{Ec. [1.132]}$$

### Ejercicio 1.7

Un estanque de  $5 \times 10^5 \text{ m}^3$  de volumen, alimentado permanentemente por un riachuelo prístino de  $0,2 \text{ m}^3/\text{s}$ , recibe un derrame de aguas residuales con un flujo promedio de  $0,05 \text{ m}^3/\text{s}$  durante un día. El efluente derramado contiene  $135 \text{ mg/l}$  de un contaminante químico que se degrada a una tasa de  $0,27 \text{ d}^{-1}$ . Suponiendo mezcla completa y que prácticamente hay un flujo de salida del estanque igual al de entrada, calcule (a) la concentración del contaminante en el momento en que se detiene el derrame, (b) ¿cuánto tiempo deberá transcurrir para que el estanque recupere su pureza original, (c) si el derrame durase muchos días, ¿en cuánto tiempo el estanque alcanzaría el estado estacionario?

#### Solución:

**(a)** En primer lugar, dado que la ecuación [1.132] está diseñada para admitir una sola entrada, es necesario calcular la concentración del contaminante químico como si el estanque recibiese una entrada producto de la mezcla del agua residual con la corriente del riachuelo:

$$C_M = \frac{Q_1 C_1 + Q_2 C_2}{Q_1 + Q_2} = \frac{\left(200 \frac{l}{s}\right) \left(0 \frac{mg}{l}\right) + \left(50 \frac{l}{s}\right) \left(135 \frac{mg}{l}\right)}{200 \frac{l}{s} + 50 \frac{l}{s}} = 27,00 \frac{mg}{l} = C_i$$

Luego, utilizando la ecuación [1.132] y omitiendo el primer término por el hecho de que la concentración inicial del contaminante en cuestión es cero dentro del estanque, porque su fuente superficial de agua antes del derrame es el riachuelo limpio, se calcula la concentración al cabo de un día de la siguiente forma:

$$C = \frac{250 \frac{l}{s} \left(27 \frac{mg}{l}\right)}{250 \frac{l}{s} + \left(0,27 \frac{1}{d}\right) \left(5 \times 10^5 m^3\right) \left(\frac{1d}{86400 s}\right) \left(\frac{10^3 l}{1m^3}\right)} \left\{ 1 - e^{-\left[\frac{250 \frac{l}{s} \left(\frac{86400 s}{1d}\right)}{5 \times 10^5 m^3 \left(\frac{10^3 l}{1m^3}\right)} + 0,27 \frac{1}{d}\right] 1d} \right\}$$

$$C(1d) = \frac{6750 \frac{mg}{s}}{250 \frac{l}{s} + 1562,5 \frac{l}{s}} [1 - e^{-0,3132}] = 3,72 \frac{mg}{l} (0,2689)$$

$$\therefore C(1d) = 1,00 \frac{mg}{l}$$

Sin embargo, una forma más directa de resolver el literal (a) es utilizar una forma modificada de la ecuación [1.132], que admita dos entradas al estanque, teniendo en cuenta que  $Q = Q_{i1} + Q_{i2}$ . Esto es,

$$C = C_0 e^{-\left(\frac{Q}{V} + k\right)t} + \frac{Q_{i1} C_{i1} + Q_{i2} C_{i2}}{(Q_{i1} + Q_{i2}) + kV} \left[ 1 - e^{-\left(\frac{Q}{V} + k\right)t} \right]$$

$$C(1d) = \frac{200 \frac{l}{s} \left(0 \frac{mg}{l}\right) + 50 \frac{l}{s} \left(135 \frac{mg}{l}\right)}{\left(200 \frac{l}{s} + 50 \frac{l}{s}\right) + \left(0,27 \frac{1}{d}\right) \left(5 \times 10^5 m^3\right) \left(\frac{1d}{86400 s}\right) \left(\frac{10^3 l}{1m^3}\right)} \left\{ 1 - e^{-\left[\frac{250 \frac{l}{s} \left(\frac{86400 s}{1d}\right)}{5 \times 10^5 m^3 \left(\frac{10^3 l}{1m^3}\right)} + 0,27 \frac{1}{d}\right] 1d} \right\}$$

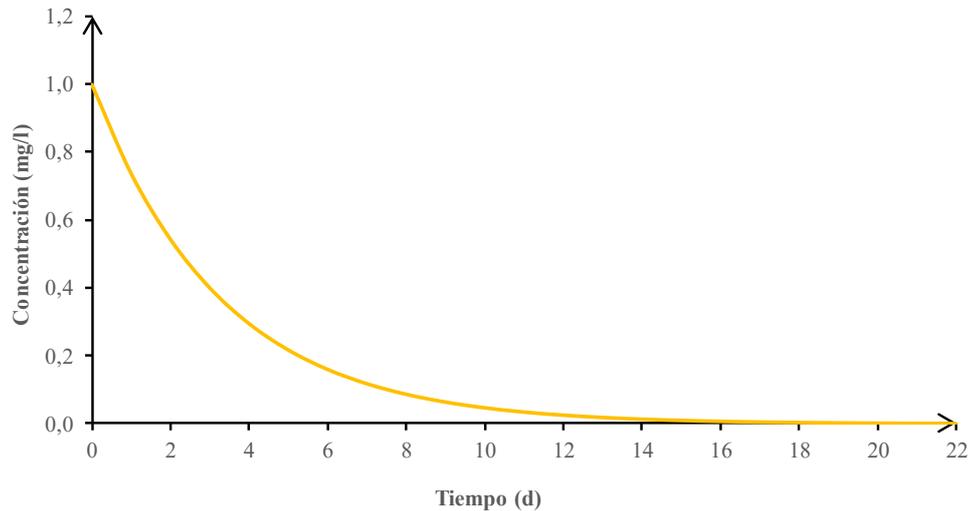
$$\therefore C(1d) = 1,00 \frac{mg}{l}$$

(b) En el momento en que se detiene el derrame (1 día) la concentración del contaminante químico dentro del estanque es 1 mg/l y la concentración de entrada del contaminante es nula, puesto sólo ingresaría la corriente del riachuelo prístino; de modo que, la ecuación [1.132] se reduce a

$$C = C_0 e^{-\left(\frac{Q}{V} + k\right)t}$$

Luego, dando diferentes valores al tiempo, el estanque recuperará su pureza original a los 18 días después de parar el derrame, tal como se indica en la tabla y gráfico siguientes:

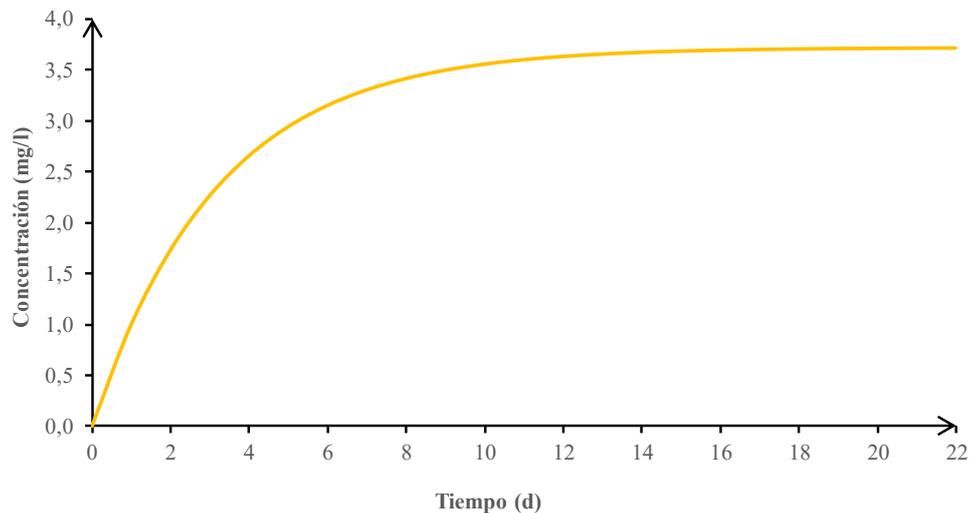
t (d)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
C (mg/l)	1,00	0,74	0,54	0,40	0,30	0,22	0,16	0,12	0,09	0,06	0,05	0,04	0,03	0,02	0,01	0,01	0,01	0,01	0,00	0,00	0,00



**Figura 1-5** Curva de concentración resultante en el literal b del ejercicio 1.7.

(c) Aplicando la ecuación [1.132], o su modificación para dos entradas, a diferentes instantes de tiempo en días, se obtiene la tabla de resultados mostrada abajo cuyo gráfico muestra la tendencia del estanque de alcanzar el estado estacionario a los 20 días después de iniciarse el derrame, con una concentración estable del contaminante químico de 3,72 mg/L:

t (d)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
C (mg/l)	0,00	1,00	1,73	2,27	2,66	2,95	3,16	3,31	3,42	3,50	3,56	3,61	3,64	3,66	3,68	3,69	3,70	3,71	3,71	3,71	3,72	3,72	3,72



**Figura 1-6** Curva de concentración resultante en el literal c del ejercicio 1.7.

## 1.4 Diseño de reactores homogéneos ideales

De acuerdo con la vigésima tercera edición del Diccionario de la lengua española, un reactor es un *recipiente diseñado para que en su interior se produzcan reacciones químicas o biológicas* (Real Academia Española,

2014). Sin embargo, una definición aún mejor puede enunciarse de la siguiente forma:

### **Definición 1.3**

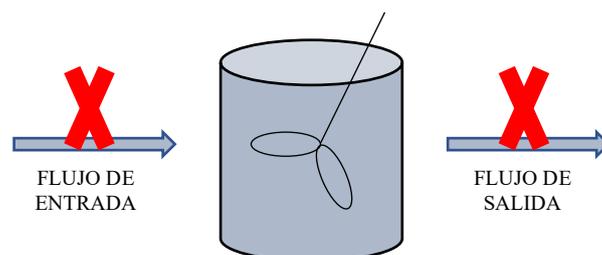
*Un reactor es un equipo, dispositivo o instalación diseñado para desarrollar en su interior reacciones químicas, biológicas, incluso nucleares, en determinada fase de la materia, operados bajo condiciones controladas, y con el propósito de obtener un resultado específico de interés sobre el comportamiento de la sustancia reaccionante para algún campo de la ciencia o ingeniería.*

En el campo de la ingeniería ambiental o hidrológica, ejemplos de resultados de interés en el diseño y uso de reactores son el tratamiento de aguas residuales, la potabilización de agua para suministro humano, y los procesos de contaminación y/o autodepuración de aguas superficiales y subterráneas.

La expresión **reactores homogéneos ideales** alude a aquellos reactores que operan teóricamente en condiciones ideales de mezcla y dinámica de fluidos, además de tener una sola fase (líquida o gaseosa). Estos reactores pueden ser de dos clases generales, según el modo de operación: (a) reactores discontinuos y (b) reactores continuos.

#### **1.4.1 Reactor discontinuo o Batch**

Los reactores discontinuos son tanques o recipientes agitados y cerrados que operan en estado no estacionario y que, por lo tanto, experimentan acumulación de la sustancia reaccionante (la concentración cambia con el tiempo), pero carecen de flujo de entrada y de salida.



**Figura 1-7** Esquema general de un reactor discontinuo.

Su ecuación de diseño se deduce a partir de la ecuación general del balance de masa, omitiendo los términos entrada, salida y generación:

$$\text{Acumulación} = -\text{Eliminación} \quad \text{Ec. [1.133]}$$

$$V \frac{dC}{dt} = -r_E V$$

Cancelación  
de los  
volúmenes

$$\frac{dC}{dt} = -r_E \quad \text{Ec. [1.134]}$$

La velocidad de eliminación  $r_E$ , como se recordará de la sección 1.2, depende del orden de la reacción. Además, el procedimiento deductivo de las ecuaciones de diseño de un reactor batch es el desarrollado para obtener las ecuaciones cinéticas de la sección 1.2 que se utilizaron para estudiar la velocidad y el orden de las reacciones en condiciones de laboratorio; de modo que, aquí solo se presentarán las ecuaciones despejadas para el producto  $kt$ , una forma muy útil en la resolución de problemas de diseño de reactores:

Reacción de orden cero

Ec. 1.15 $C = C_0 - kt$	$kt = C_0 - C$	Ec. [1.135]
----------------------------	----------------	-------------

Reacción de primer orden

Ec. 1.21 $C = C_0 e^{-kt}$	$kt = \ln\left(\frac{C_0}{C}\right)$	Ec. [1.136]
-------------------------------	--------------------------------------	-------------

Reacción de segundo orden

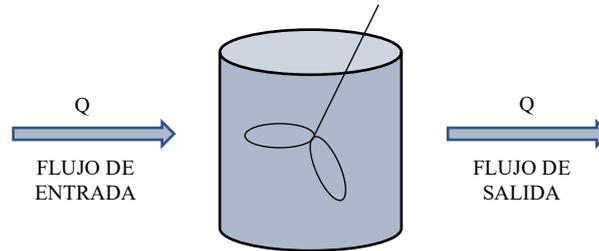
Ec. 1.29 $C = \frac{C_0}{1 + kC_0 t}$	$kt = \frac{1}{C} - \frac{1}{C_0}$	Ec. [1.137]
--	------------------------------------	-------------

## 1.4.2 Reactores continuos

### 1.4.2.1 Reactor de tanque de mezcla completa (RTMC)

Un reactor de mezcla completa es cualquier tanque cerrado (cuadrado, rectangular o cilíndrico) cuyo interior está perfectamente mezclado y los flujos de salida son iguales e invariables, pues se diseñan para trabajar en

estado estacionario. No obstante, teniendo en cuenta su configuración geométrica, se puede afirmar que los sistemas acuáticos cerrados tales como lagos, lagunas y estanques, se pueden modelizar como si fuesen reactores de mezcla completa ideales.



**Figura 1-8** Esquema general de un reactor de mezcla completa.

Sus ecuaciones de diseño se deducen a partir de las ecuaciones obtenidas en la sección correspondiente al balance de masa en estado estacionario para una sustancia no conservativa, puesto que tales balances se han realizado bajo el supuesto de mezcla completa y sistemas completamente agitados. Sin embargo, es preciso ahora presentar una nueva variable, denominada tiempo de retención hidráulica y denotada por  $\theta$ , y que resulta de dividir el volumen entre el caudal. Así,

$$\theta = \frac{V}{Q} \quad \text{Ec. [1.138]}$$

De modo que, dependiendo del orden de la reacción, se tiene que

Reacción de orden cero

Ec. 1.54

$$C = \frac{QC_i - kV}{Q}$$

$$C = C_i - k\theta$$

Ec. [1.139]

Despejado para el producto  $k\theta$

$$k\theta = C_i - C$$

Ec. [1.140]

Reacción de primer orden

Ec. 1.61

$$C = \frac{QC_i}{Q + kV}$$

$$C = \frac{\frac{QC_i}{Q}}{\frac{Q}{Q} + \frac{kV}{Q}}$$

Ec. [1.141]

Sustitución de  
ecuación 1.138

$$\therefore C = \frac{C_i}{1 + k\theta}$$

Ec. [1.142]

Despejado  
para el  
producto  $k\theta$ 

$$k\theta = \frac{C_i}{C} - 1$$

Ec. [1.143]

Reacción de segundo orden

Ec. 1.65

$$C = \frac{-Q + \sqrt{Q^2 + 4Q_i C_i kV}}{2kV}$$

$$C = \frac{-\frac{Q}{Q} + \sqrt{\frac{Q^2}{Q^2} + \frac{4QC_i kV}{Q^2}}}{2\frac{kV}{Q}}$$

Ec. [1.144]

Sustitución de  
ecuación 1.138

$$\therefore C = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4C_i k\theta}}{2k\theta}$$

Ec. [1.145]

Aquí, no obstante, es conveniente utilizar la ecuación [1.64] para obtener la ecuación de diseño despejada para el producto  $k\theta$ . Entonces,

División de cada  
término entre el  
caudal  $Q$ .  
Además,  
recuerde que  
 $Q_i = Q$ 

$$\frac{kVC^2}{Q} + \frac{QC}{Q} - \frac{Q_i C_i}{Q} = 0$$

Ec. [1.146]

$$k\theta C^2 = C_i - C$$

Ec. [1.147]

División por  $C^2$ 

$$k\theta = \frac{C_i}{C} - \frac{1}{C}$$

Ec. [1.148]

Factor común

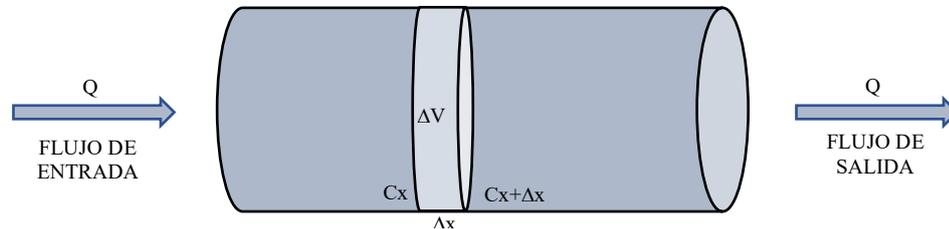
$$\therefore k\theta = \frac{1}{C} \left( \frac{C_i}{C} - 1 \right)$$

Ec. [1.149]

### 1.4.2.2 Reactor tubular de flujo pistón (RFP)

Un reactor tubular de flujo pistón se caracteriza porque la concentración de la sustancia reaccionante está uniformemente distribuida en la sección transversal de cada volumen diferencial que circula por su interior desde la entrada hasta la salida; en otras palabras, el cambio en la concentración sólo ocurre axialmente, esto es, en el sentido longitudinal impuesto por el flujo. De manera similar al caso de los reactores de mezcla completa, si se tiene en cuenta su configuración geométrica (que no sólo puede ser cilíndrica sino también, por ejemplo, prismas rectangulares o trapezoidales), los cuerpos de agua superficial que fluyen en una determinada dirección,

tales como los ríos, arroyos y riachuelos, o incluso canales artificiales, se pueden modelizar mediante las ecuaciones de diseño de los reactores de flujo pistón.



**Figura 1-9** Esquema general de un reactor de flujo pistón.

Su ecuación general de diseño se obtiene aplicando un balance en estado estacionario para el volumen diferencial mostrado en la figura 1-9, donde  $C_x$  es la concentración de la sustancia que ingresa al volumen diferencial y  $C_{x+\Delta x}$  es la concentración final o de salida del volumen diferencial. De modo que

$$\text{Acumulación} = \text{Entrada} - \text{Salida} - \text{Eliminación} \quad \text{Ec. [1.150]}$$

$$0 = QC_x - QC_{x+\Delta x} - r_{E_x}V$$

$$r_{E_x}(A\Delta x) = Q(C_x - C_{x+\Delta x}) \quad \text{Ec. [1.151]}$$

$$r_{E_x} \left( \frac{A}{Q} \right) = - \frac{C_{x+\Delta x} - C_x}{\Delta x} \quad \text{Ec. [1.152]}$$

$$r_E \left( \frac{A}{Q} \right) = - \frac{dC}{dx} \quad \text{Ec. [1.153]}$$

$$dC = -r_E \left( \frac{A dx}{Q} \right) \quad \text{Ec. [1.154]}$$

$$dC = -r_E \left( \frac{dV}{Q} \right) \quad \text{Ec. [1.155]}$$

A partir de la ecuación [1.155] se deducen las ecuaciones cinéticas específicas para cada uno de los órdenes de reacción más comunes en la ingeniería ambiental. Tales ecuaciones son:

Reacción de orden cero

$$r_E = k \quad \int_{C_i}^C dC = -\frac{k}{Q} \int_0^V dV \quad \text{Ec. [1.156]}$$

$$C - C_i = -\frac{k}{Q} V \quad \text{Ec. [1.157]}$$

$$\therefore C = C_i - k\theta \quad \text{Ec. [1.158]}$$

O despejado  
para el  
producto  $k\theta$ 

$$k\theta = C_i - C \quad \text{Ec. [1.159]}$$

Reacción de primer orden

$$r_E = kC \quad \int_{C_i}^C \frac{dC}{C} = -\frac{k}{Q} \int_0^V dV \quad \text{Ec. [1.160]}$$

$$\ln\left(\frac{C}{C_i}\right) = -k\left(\frac{V}{Q}\right) \quad \text{Ec. [1.161]}$$

$$\therefore C = C_i e^{-k\theta} \quad \text{Ec. [1.162]}$$

O despejado  
para el  
producto  $k\theta$ 

$$k\theta = \ln\left(\frac{C_i}{C}\right) \quad \text{Ec. [1.163]}$$

Reacción de segundo orden

$$r_E = kC^2 \quad \int_{C_i}^C C^{-2} dC = -\frac{k}{Q} \int_0^V dV \quad \text{Ec. [1.164]}$$

Recuerde  
resolución de  
ecuación  
[1.24]

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_i} + k\theta \quad \text{Ec. [1.165]}$$

$$\therefore C = \frac{C_i}{1 + C_i k\theta} \quad \text{Ec. [1.166]}$$

O despejado  
para el  
producto  $k\theta$ 

$$k\theta = \frac{1}{C} - \frac{1}{C_i} \quad \text{Ec. [1.167]}$$

Las ecuaciones cinéticas del reactor de flujo pistón tienen la misma estructura que las correspondientes a un reactor batch, con dos pequeñas, pero notables diferencias: en el primero la concentración  $C_0$  se sustituye por

$C_i$ , denominada concentración de entrada, por tratarse de un reactor de flujo continuo; y, además, en lugar del tiempo clásico, las ecuaciones de diseño del RFP incorporan el tiempo de retención hidráulica.

La tabla 1-2 muestra un panorama general de las diferentes ecuaciones cinéticas de diseño para los reactores homogéneos ideales considerados en la presenta sección:

**Tabla 1-2 Ecuaciones cinéticas de diseño para los reactores ideales homogéneos**

Orden de reacción	REACTOR BATCH	RTMC	RFP
0	$C = C_0 - kt$	$C = C_i - k\theta$	$C = C_i - k\theta$
1	$C = C_0 e^{-kt}$	$C = \frac{C_i}{1 + k\theta}$	$C = C_i e^{-k\theta}$
2	$C = \frac{C_0}{1 + C_0 kt}$	$C = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 4C_i k\theta}}{2k\theta}$	$C = \frac{C_i}{1 + C_i k\theta}$

Asimismo, en resumen, las ecuaciones cinéticas de los reactores ideales homogéneos expresadas para el producto de la constante cinética por el tiempo de retención hidráulica (o para el producto entre  $k$  y el tiempo clásico, en el caso del reactor discontinuo) se muestran en la tabla 1-3:

**Tabla 1-3 Ecuaciones cinéticas de diseño para los reactores ideales homogéneos expresadas para el producto de la constante cinética por el tiempo**

Orden de reacción	REACTOR BATCH	RTMC	RFP
0	$kt = C_0 - C$	$k\theta = C_i - C$	$k\theta = C_i - C$
1	$kt = \ln\left(\frac{C_0}{C}\right)$	$k\theta = \frac{C_i}{C} - 1$	$k\theta = \ln\left(\frac{C_i}{C}\right)$
2	$kt = \frac{1}{C} - \frac{1}{C_0}$	$k\theta = \frac{1}{C}\left(\frac{C_i}{C} - 1\right)$	$k\theta = \frac{1}{C} - \frac{1}{C_i}$

### Ejercicio 1.8

Un flujo de aguas residuales de 1 m<sup>3</sup>/s debe ingresar a una unidad de tratamiento que se pretende diseñar de modo que la eficiencia en la remoción del contaminante alcance el 90%. Si el contaminante es no conservativo y se degrada a una tasa de 0,54 d<sup>-1</sup>, determine (a) el tamaño necesario de la unidad de tratamiento si fuese un RTMC, (b) el tamaño necesario si fuese un RFP, (c) compare el tamaño entre las dos opciones.

**Solución:**

(a) Por tratarse de un flujo de aguas residuales con una sustancia no conservativa de primer orden, el tamaño (volumen) del reactor de mezcla completa necesario para su tratamiento se puede calcular directamente de la ecuación [1.143], por la definición del tiempo de retención hidráulica. Además, aunque no se reporta el valor de la concentración de salida del tratamiento, es posible establecer una relación entre las concentraciones a partir de la eficiencia (si se elimina el 90% del contaminante del agua residual, entonces en la corriente de salida aún habrá un remanente de 10%), de modo que

$$C = \frac{(100 - 90)\%C_i}{100\%} = 0,10C_i$$

$$\frac{C_i}{C} = \frac{1}{0,10} = 10$$

Por lo tanto,

$$k\left(\frac{V}{Q}\right) = \frac{C_i}{C} - 1$$

$$V = \frac{Q}{k}\left(\frac{C_i}{C} - 1\right) = \frac{Q}{k}(10 - 1)$$

$$V = 9\left(\frac{Q}{k}\right) = 9\left[\frac{1\frac{m^3}{s}\left(\frac{86400\text{ s}}{1\text{ d}}\right)}{0,54\text{ d}^{-1}}\right]$$

$$V = 1,44 \times 10^6\text{ m}^3$$

(b) De la misma forma, pero empleando ahora la ecuación [1.163], se obtiene el tamaño necesario para el reactor de flujo pistón

$$k\left(\frac{V}{Q}\right) = \ln\left(\frac{C_i}{C}\right)$$

$$V = \frac{Q}{k}\ln(10) = \frac{1\frac{m^3}{s}\left(\frac{86400\text{ s}}{1\text{ d}}\right)}{0,54\text{ d}^{-1}}\ln(10)$$

$$V = 368414\text{ m}^3$$

(c) La comparación entre los tamaños teóricos de los dos reactores considerados permite establecer cuán grande o pequeño es uno en relación con el otro, información que podría ser útil dependiendo de la disponibilidad de espacio o de recursos. Luego,

$$\frac{V_{RTMC}}{V_{RFP}} = \frac{1,44 \times 10^6\text{ m}^3}{368414\text{ m}^3}$$

$$\therefore V_{RTMC} = 3,9V_{RFP}$$

Por lo tanto, se concluye que el RTMC debería ser casi cuatro veces mayor que el de un RFP para conseguir la misma eficiencia en el tratamiento del flujo dado de aguas residuales.

### Ejercicio 1.9

El sistema de alcantarillado de una ciudad descarga las aguas servidas de la población en el río que la atraviesa con un flujo volumétrico igual a 100 l/s con una concentración de un contaminante de 40 mg/l. Aguas arriba de la descarga del alcantarillado, el río fluye con un caudal de 2 m<sup>3</sup>/s y su nivel de contaminación es despreciable. Si la velocidad media del río es de 5 cm/s y la evolución del contaminante que desaparece a una tasa de 0,21 d<sup>-1</sup>, se puede modelizar como si el río fuese un reactor de flujo pistón, determine (a) ¿cuál es la concentración de tal contaminante 20 km aguas abajo, donde se localiza una población; (b) Si no hubiese más fuentes de contaminación aguas abajo, ¿a qué distancia habrá desaparecido el 80% del contaminante en la corriente?

**Solución:**

**(a) En primer lugar, se debe calcular la concentración de la mezcla en el punto de descarga del sistema de alcantarillado**

$$C_M = \frac{Q_1 C_1 + Q_2 C_2}{Q_1 + Q_2} = \frac{\left(2000 \frac{l}{s}\right) \left(0 \frac{mg}{l}\right) + \left(100 \frac{l}{s}\right) \left(40 \frac{mg}{l}\right)}{2000 \frac{l}{s} + 100 \frac{l}{s}} = 1,90 \frac{mg}{l} = C_i$$

**Es preciso también expresar el tiempo de retención hidráulica de forma alternativa para ajustarse a los datos, sustituyendo el volumen y el caudal por expresiones equivalente, de modo que**

$$\theta = \frac{V}{Q} = \frac{Ax}{Av} = \frac{x}{v}$$

**Luego, aplicando la ecuación [1.162], la concentración del contaminante a la distancia indicada es**

$$C = C_i e^{-k\left(\frac{x}{v}\right)} = \left(1,90 \frac{mg}{l}\right) e^{-0,21d^{-1} \left[ \frac{20000 m}{0,05 \frac{m}{s} \left(\frac{86400 s}{1 d}\right)} \right]}$$

$$C = 1,17 \frac{mg}{l}$$

**(b) Para encontrar la distancia indicada, se debe despejar tal variable de la ecuación [1.163], sustituyendo el tiempo de retención hidráulica por el cociente entre la distancia y la velocidad. Además, se debe tener en cuenta que la condición de haber desaparecido el 80% del contaminante a la distancia buscada debe expresarse como en el caso del ejercicio 1.8 ( $C = 20\% C_i = 0,20 C_i$ , o de otro modo,  $C_i/C = 5$ ). Entonces,**

$$k \left(\frac{x}{v}\right) = \ln \left(\frac{C_i}{C}\right)$$

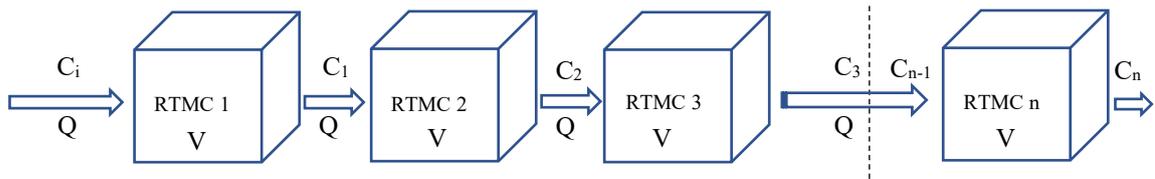
$$x = \left[ \frac{0,05 \frac{m}{s} \left(\frac{86400 s}{1 d}\right)}{0,21d^{-1}} \right] \ln(5)$$

$$x = 33159 m$$

### 1.4.3 Reactores en serie

En múltiples situaciones de la ingeniería, los reactores continuos son utilizados en serie, esto es, un arreglo sucesivo de reactores, cuyo objetivo suele ser optimizar la eficiencia del sistema, de modo que la concentración final o de salida cumpla cierto estándar o valor de interés. El arreglo en serie de reactores ideales puede componerse de un solo tipo de reactor (RTMC o RFP) con tamaño igual o diferente, o incluso, una combinación de los dos tipos indicados.

Considere el caso de un número  $n$  de RTMC conectados en serie (ver Figura 1-9), de igual volumen ( $\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = \theta_n = \theta$ ), y todos operando a la misma temperatura ( $k_1 = k_2 = k_3 = k_n = k$ ), con una cinética de primer orden:



**Figura 1-10** Esquema de un sistema de reactores de mezcla completa en serie de igual tamaño. Entonces, teniendo en cuenta la ecuación [1.142], la concentración de salida del primer reactor,  $C_1$ , se expresa como

$$C_1 = \frac{C_i}{1 + k\theta} \quad \text{Ec. [1.168]}$$

Luego,  $C_1$  se convierte en la concentración de entrada al segundo reactor y, de forma similar, ahora la nueva concentración de salida,  $C_2$ , tiene la siguiente expresión resultante de sustituir la ecuación [1.168] en la ecuación [1.142] adaptada para el segundo reactor:

$$C_2 = \frac{C_1}{1 + k\theta} \quad \text{Ec. [1.169]}$$

$$C_2 = \frac{C_i}{1 + k\theta} \quad \text{Ec. [1.170]}$$

$$C_2 = \frac{C_i}{(1 + k\theta)^2} \quad \text{Ec. [1.171]}$$

Para un tercer reactor de mezcla completa en serie de tamaño igual a los dos primeros, de manera similar, su ecuación de diseño será

$$C_3 = \frac{C_2}{1 + k\theta} \quad \text{Ec. [1.172]}$$

Sustitución de  $C_2$  por su expresión dada en la ecuación [1.171]

$$C_3 = \frac{C_i}{(1 + k\theta)^2} \quad \text{Ec. [1.173]}$$

$$C_3 = \frac{C_i}{(1 + k\theta)^3} \quad \text{Ec. [1.174]}$$

En el caso de un indeterminado número de reactores, es fácil advertir que la concentración de salida del último reactor,  $C_n$ , que es también la concentración final del sistema, se expresa mediante la ecuación

$$C_n = \frac{C_i}{(1 + k\theta)^n} \quad \text{Ec. [1.175]}$$

Una conclusión interesante de la ecuación [1.175], se obtiene de despejar el tiempo de retención hidráulica y escribir una ecuación para el volumen total del sistema de reactores en serie. Esto es,

$$1 + k\theta = \sqrt[n]{\frac{C_i}{C_n}} \quad \text{Ec. [1.176]}$$

$$\theta = \frac{1}{k} \left( \sqrt[n]{\frac{C_i}{C_n}} - 1 \right) \quad \text{Ec. [1.177]}$$

$$V = \frac{Q}{k} \left( \sqrt[n]{\frac{C_i}{C_n}} - 1 \right) \quad \text{Ec. [1.178]}$$

$$\therefore V_T = \frac{nQ}{k} \left( \sqrt[n]{\frac{C_i}{C_n}} - 1 \right) \quad \text{Ec. [1.179]}$$

La conclusión es que a medida que se incrementa el número de reactores de mezcla completa en serie que operan de acuerdo con una cinética de primer orden (cuando  $n \rightarrow \infty$ ), el volumen total requerido se aproxima al de un solo reactor de flujo pistón.

Por otra parte, si el sistema estuviese integrado por reactores en serie de diferente tamaño o volumen, tal como está representado en la figura 1-11, la ecuación de diseño tendría que diferenciar entre los distintos tiempos de retención hidráulica de cada uno de los reactores de mezcla completa.

Además, si el interés estuviere relacionado con el número de reactores necesarios en un sistema en serie para cumplir algún estándar o meta de

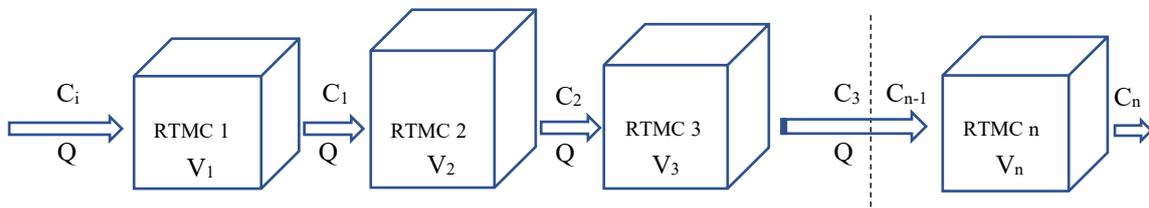
eliminación de contaminantes, la ecuación resultante es aquella que produce el procedimiento de despejar  $n$  de la ecuación [1.175], de la siguiente forma:

$$(1 + k\theta)^n = \frac{C_i}{C_n} \quad \text{Ec. [1.180]}$$

$$\ln(1 + k\theta)^n = \ln\left(\frac{C_i}{C_n}\right) \quad \text{Ec. [1.181]}$$

$$n \ln(1 + k\theta) = \ln\left(\frac{C_i}{C_n}\right) \quad \text{Ec. [1.182]}$$

$$\therefore n = \frac{\ln\left(\frac{C_i}{C_n}\right)}{\ln(1 + k\theta)} \quad \text{Ec. [1.183]}$$



**Figura 1-11** Esquema de un sistema de reactores de mezcla completa en serie de diferentes tamaños.

La condición impuesta por la figura 1-11 produce, luego de un procedimiento análogo al anterior, considerando otra vez una cinética de primer orden, las siguientes ecuaciones de diseño del sistema en cuestión, dependiendo del número de reactores (esta vez incluso pudiendo operar a diferentes temperaturas, de modo que la constante de reacción sea distinta entre los diferentes reactores):

Para dos RTMC en serie

$$C_2 = \frac{C_i}{\left[1 + k_1\left(\frac{V_1}{Q}\right)\right]\left[1 + k_2\left(\frac{V_2}{Q}\right)\right]} \quad \text{Ec. [1.184]}$$

$$C_2 = \frac{C_i}{(1 + k_1\theta_1)(1 + k_2\theta_2)} \quad \text{Ec. [1.185]}$$

Para tres RTMC en serie

$$C_3 = \frac{C_i}{(1 + k_1\theta_1)(1 + k_2\theta_2)(1 + k_3\theta_3)} \quad \text{Ec. [1.186]}$$

Para más reactores sólo se deberá añadir los factores  $(1 + k_i\theta_i)$  necesarios.

### Ejercicio 1.10

Un grupo de ingenieros decide probar distintas configuraciones de sistemas reactores de mezcla completa en serie para el tratamiento del flujo promedio de aguas residuales domésticas de una ciudad ( $1270 \text{ m}^3/\text{d}$ ), las cuales tienen un contaminante cuya concentración alcanza los  $120 \text{ mg/l}$  y que se degrada de acuerdo con una cinética de primer orden a razón de  $0,34 \text{ d}^{-1}$  a la temperatura de trabajo de los reactores. Los ingenieros buscan responder las siguientes preguntas: (a) ¿Cuál sería la concentración final de tratamiento si se utilizara solo un RTMC de  $2400 \text{ m}^3$ ?; (b) ¿qué pasaría si se utilizaran dos RTMC en serie de igual tamaño (cada uno igual con un volumen igual a la mitad de RTMC del caso a); (c) ¿mejoraría la eficiencia del tratamiento si se utilizaran tres RTMC en las mismas condiciones del literal b (cada reactor tendría un tercio del volumen del RTMC único del caso a); (d) ¿cuántos RTMC serían necesarios para conseguir que la concentración final sea la mitad de la que ingresa al sistema, suponiendo que los reactores tengan un tamaño de  $300 \text{ m}^3$  cada uno?; (e) ¿cuál debería ser el tamaño o volumen de cada reactor si se utilizaran tres RTMC en serie para conseguir la misma meta de tratamiento de las aguas residuales?

#### Solución:

**(a) La concentración final de tratamiento utilizando un solo RTMC se obtiene empleando la ecuación [1.142]**

$$C = \frac{120 \frac{\text{mg}}{\text{l}}}{1 + (0,34 \text{ d}^{-1}) \left( \frac{2400 \text{ m}^3}{1270 \frac{\text{m}^3}{\text{d}}} \right)} = 73,06 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

**(b) Para determinar la concentración al final de un sistema de dos RTMC en serie se debe utilizar la ecuación [1.171], y tener en cuenta que el volumen de cada reactor es ahora la mitad del volumen original; de modo que**

$$C_2 = \frac{C_i}{(1 + k\theta)^2} = \frac{120 \frac{\text{mg}}{\text{l}}}{\left[ 1 + (0,34 \text{ d}^{-1}) \left( \frac{1200 \text{ m}^3}{1270 \frac{\text{m}^3}{\text{d}}} \right) \right]^2} = 68,74 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

(c) Si se utilizaran tres RTMC en serie, cada uno con un volumen de  $800 \text{ m}^3$ , entonces la ecuación [1.174] da como resultado

$$C_3 = \frac{C_i}{(1 + k\theta)^3} = \frac{120 \frac{\text{mg}}{\text{l}}}{\left[ 1 + (0,34 \text{ d}^{-1}) \left( \frac{800 \text{ m}^3}{1270 \frac{\text{m}^3}{\text{d}}} \right) \right]^3} = 67,04 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

Resulta evidente que, a medida que se incrementa el número de reactores en serie, el sistema se hace más eficiente para remover el contaminante (disminuye la concentración de salida del sistema).

**(d) De la ecuación [1.183], se obtiene el número de RTMC necesarios para cumplir con la meta de tratamiento (que la concentración de salida sea por lo menos la mitad de la concentración de entrada al sistema). Luego,**

$$n = \frac{\ln\left(\frac{C_i}{C_n}\right)}{\ln(1 + k\theta)} = \frac{\ln\left(\frac{120 \frac{mg}{l}}{60 \frac{mg}{l}}\right)}{\ln\left[1 + (0,34d^{-1})\left(\frac{300 m^3}{1270 \frac{m^3}{d}}\right)\right]} = 9 \text{ reactores}$$

**(e) Finalmente, la ecuación** [1.178] permite determinar el volumen necesario para cada RTMC en un sistema en serie, en este caso particular, de tres RTMC en serie; de modo que

$$V = \frac{Q}{k} \left( \sqrt[n]{\frac{C_i}{C_n}} - 1 \right)$$

$$V = \frac{1270 \frac{m^3}{d}}{0,34d^{-1}} \left( \sqrt[3]{\frac{120 \frac{mg}{l}}{60 \frac{mg}{l}}} - 1 \right)$$

$$V = 971 m^3$$

## Problemas propuestos

### Orden de la reacción

1.1 Con base en los siguientes datos de laboratorio tabulados, aplique el método integral y determine el orden de la reacción.

(a)

t (d)	0	3	5	7	9	11
C (mg/l)	35,6	29,8	21,1	13,3	7,2	3,4

(b)

t (d)	0	2	5	7	14	16
C (mg/l)	45,2	23,3	10,1	2,1	0,8	0,7

### Estado estacionario

1.2 Un río tiene un caudal promedio de 4,48 m<sup>3</sup>/s, y el sistema de alcantarillado de una ciudad descarga las aguas servidas en él a razón de 630 m<sup>3</sup>/h, con una concentración de un contaminante de 138 g/m<sup>3</sup>. Si en el río se produce un mezclado total, la sustancia es conservativa y la concentración del contaminante, aguas abajo, es de 10 mg/l, ¿cuál era la concentración del contaminante aguas arriba?

1.3 Una industria descarga un flujo promedio de aguas residuales igual a 50 l/s en un río que aguas arriba tiene una concentración de un contaminante conservativo igual a 5 mg/l. La descarga de la industria lleva el mismo contaminante, pero con una concentración de 325 mg/l. ¿Cuál es el valor del caudal con que fluye el río antes del punto de mezcla, si aguas abajo se cumple con el estándar ambiental de una concentración máxima de 10 mg/l?

1.4 En un río con un caudal promedio de 3,24 m<sup>3</sup>/s que tiene una concentración de fondo de un contaminante ambiental igual a 10 mg/l, desembocan dos esteros, uno frente al otro. El primero de ellos fluye con un caudal de 0,211 m<sup>3</sup>/s; el segundo estero tiene un caudal de 30720 l/min. Suponiendo que el segundo estero se encuentra doblemente contaminado que el primero con la misma sustancia presente en el río aguas arriba, y que la mezcla de las corrientes produce una concentración igual a 12,85 mg/l, determine la concentración del contaminante en cada uno de los tributarios.

1.5 Un lago con un volumen de 3,25x10<sup>6</sup> m<sup>3</sup> se alimenta permanentemente de dos riachuelos montañosos de 250 l/s y 300 l/s de caudal, respectivamente, ambos llevando una concentración de un contaminante no conservativo igual a 2,0 mg/l. Una PTAR vierte un promedio de 14256 m<sup>3</sup>/d de efluentes tratados en el lago, los cuales tienen el mismo contaminante de los riachuelos, pero en una concentración de 91 mg/l. Si el contaminante experimenta una de tasa de degradación de 0,10 d<sup>-1</sup>, y se asume que el contaminante está completamente disuelto en el lago, determine la concentración estable del contaminante en el lago.

1.6 Resolver el problema anterior, suponiendo que la reacción es de orden cero y que la constante cinética se expresa ahora como 0,05 mg/l.d.

1.7 Resolver el problema anterior, suponiendo que la reacción es de segundo orden y que la constante cinética se expresa ahora como 0,05 l/mg.d

### Estado no estacionario

1.8 Una unidad de tratamiento de potabilización de agua consiste en un tanque de 500 m<sup>3</sup> de capacidad. Desde el inicio de su operación, un flujo de entrada de 20 l/s ha producido una concentración estable de cloruros dentro del tanque igual a 10 mg/l. Sin embargo, un día se incrementa la concentración de cloruros en la corriente de entrada hasta 30 mg/l. Con base en esta información y suponiendo mezcla completa dentro del tanque de

tratamiento y que el flujo de salida es igual al de entrada, determine (a) la concentración de cloruros dentro del tanque a las 12 horas, y (b) la nueva concentración estable de cloruros.

1.9 Suponga que el tanque de tratamiento del problema 1.8 tiene un volumen efectivo de  $500 \text{ m}^3$ , pero que su capacidad total alcanza los  $1000 \text{ m}^3$ . Si el flujo de salida es la mitad del flujo de entrada ¿cuál será la concentración de cloruros en el momento en que se alcance la capacidad máxima del tanque?

1.10 Considere la situación descrita en el problema 1.5. Suponga que el agua del lago se utilizará ocasionalmente para riego de cultivos cercanos y que, por lo tanto, deberá cumplir un límite máximo permisible de  $3,0 \text{ mg/l}$ . Para cumplir con este objetivo, las autoridades suspenden la descarga de la PTAR en el lago. Entonces (a) ¿cuál será la concentración del contaminante transcurridos veinte días? y (b) ¿cuál será la nueva concentración de equilibrio en la laguna y cuánto tiempo transcurrirá hasta alcanzar tal valor?

1.11 Suponga que el estándar ambiental del contaminante no conservativo del problema 1.10 es de  $1,0 \text{ mg/l}$ . (a) ¿Cuál debería ser la concentración del contaminante que ingrese a la laguna para conseguir tal objetivo a más tardar a los veinte días, manteniendo todos los demás valores iguales? (b) ¿cuál es la nueva concentración de equilibrio del contaminante?

1.12 Resolver el problema 1.11, suponiendo que el contaminante se degrada de acuerdo con una reacción de orden cero, cuya constante cinética tiene un valor de  $0,01 \text{ mg/l.d}$ .

1.13 Deduzca la ecuación cinética de estado no estacionario y sustancia no conservativa para una reacción de primer orden si se tuviesen dos corrientes de entrada, en lugar de una sola.

1.14 Deduzca la ecuación cinética de estado no estacionario y sustancia no conservativa para una reacción de orden cero si se tuviesen dos corrientes de entrada, en lugar de una sola.

#### *Reactores ideales*

1.15 En un río se descargan aguas residuales desde dos industrias localizadas a una y otra orilla en el mismo punto. El caudal río corriente arriba del punto de descarga es  $93 \text{ m}^3/\text{min}$ . Las descargas ocurren a  $28800 \text{ l/h}$  desde la industria A, y a  $360 \text{ l/min}$  desde la industria B, con una contaminación orgánica cuya concentración es de  $400 \text{ mg/l}$ , en la primera, y de  $225 \text{ mg/l}$  en la segunda. Suponga que la DBO corriente arriba es de  $16 \text{ g/m}^3$ . Si el río fluye con una velocidad de  $12000 \text{ cm/min}$ , ¿cuál es la concentración de DBO  $185 \text{ km}$  corriente abajo del punto de mezcla? (Se elimina la DBO a una tasa de decaimiento de  $0,01 \text{ h}^{-1}$ ).

1.16 Hallar el caudal que ingresa a un reactor de flujo pistón cuyo volumen es  $1000 \text{ m}^3$ , si se utiliza para dar tratamiento a un agua residual con una concentración de DBO de  $100 \text{ mg/l}$ . El contaminante experimenta una reacción de decaimiento de acuerdo con una tasa de  $0,01 \text{ l/mg.min}$ , de modo que al final del tratamiento se obtiene una concentración de sólo  $0,17 \text{ mg/l}$ .

1.17 Un sistema de cuatro RTMC en serie se emplea para el tratamiento de un caudal de aguas residuales de  $220 \text{ l/s}$  con una concentración de DBO de  $400 \text{ mg/l}$ . El volumen de los reactores es  $25000 \text{ m}^3$ ,  $20000 \text{ m}^3$ ,  $15000 \text{ m}^3$ , y  $10000 \text{ m}^3$ , respectivamente. Si la DBO desaparece a razón de una constante de decaimiento de  $0,02 \text{ h}^{-1}$ , ¿cuál es la eficiencia del sistema de tratamiento?

## Referencias

Adrian, D. D., Roider, E. M. and Sanders, T. G. (2004) 'Oxygen Sag Models for Multiorder Biochemical Oxygen Demand Reactions', *Journal of Environmental Engineering*, 130(7), pp. 784–791.

Adrian, D. D. and Sanders, T. G. (1998) 'Oxygen sag equation for second-order BOD decay', *Water Research*, 32(2), pp. 840–848.

AWWARF (1996) *Characterization and modeling of chlorine decay in distribution systems*. Denver, Colorado.

Hewitt, J., Hunter, J. V. and Lockwood, D. (1979) 'A multiorder approach to bod kinetics', *Water Research*, 13(3), pp. 325–329.

Hua, F. *et al.* (1999) 'Modelling of chlorine decay in municipal water supplies', *Water Research*, 33(12), pp. 2735–2746.

Izquierdo, M. C. *et al.* (2013) *Evolución histórica de los principios de la química*. Madrid: Universidad Nacional de Estudios a Distancia.

Kastl, G. J., Fisher, I. H. and Jegatheesan, V. (1999) 'Evaluation of chlorine decay kinetics expressions for drinking water distribution systems modelling', *Journal of Water Supply: Research and Technology - AQUA*, 48(6), pp. 219–226.

Kowalska, B., Kowalski, D. and Musz, A. (2006) 'Chlorine decay in water distribution systems', *Environment Protection Engineering*, 32(2), pp. 5–16.

Kundu, S., Pal, A. and Dikshit, A. K. (2005) 'UV induced degradation of herbicide 2,4-D: Kinetics, mechanism and effect of various conditions on the degradation', *Separation and Purification Technology*, 44(2), pp. 121–129.

Moctezuma, E., Zamarripa, H. and Leyva, E. (2003) 'Degradación fotocatalítica de soluciones de alta concentración de paraquat', *Revista Internacional de Contaminacion Ambiental*, 19(3), pp. 117–125.

Real Academia Española (2014) *Diccionario de la lengua española*. 23rd edn. Espasa.

Shibin, O. M., Yesodharan, S. and Yesodharan, E. P. (2015) 'Sunlight induced photocatalytic degradation of herbicide diquat in water in presence of ZnO', *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 3(2), pp. 1107–1116.

Zill, D. G. and Wright, W. S. (2015) *Ecuaciones diferenciales con problemas con valores en la frontera*. 8th edn, *Ecuaciones diferenciales*. 8th edn. Cengage Learning.

## Capítulo 2. TRANSPORTE DE SUSTANCIAS EN EL AGUA

### 2.1 Procesos de transporte en el agua

Los contaminantes que ingresan a corrientes de agua, o a cuerpos de agua en general, experimentan diversos procesos de transporte desde su fuente emisora, siendo de especial interés su transporte hasta los lugares donde se manifiestan sus efectos adversos tanto en el ecosistema acuático como en el entorno antropogénico vinculado a él. El transporte de tales sustancias implica no sólo su mero traslado o movimiento de un lugar a otro en el cuerpo de agua receptor, sino también, y principalmente, el cambio en su concentración.

Los procesos de transporte, denominados también como transporte hidrodinámico (Ji, 2017), incluyen la advección, la difusión y la dispersión (Chin, 2013). No obstante, la mayoría prefiere englobar los fenómenos de transporte de masa en dos categorías: advección y dispersión, considerando que esta última abarca todos los posibles casos de transporte

#### Historia complementaria

El establecimiento de la ley de Fick, como pionera formulación matemática del fenómeno de transporte difusivo, tuvo su origen en el trabajo científico del médico y fisiólogo alemán Adolf Eugen Fick, nacido en la ciudad germana de Kassel el 3 de septiembre de 1829, como el noveno hijo de Friedrich Fick y Nanni Sponsel. A pesar de ser el miembro más joven de una familia de eruditos, donde dos de sus hermanos, Ludwing y Heinrich, fueron profesores universitarios, de anatomía y leyes, respectivamente, su preeminencia intelectual familiar quedó patentada en la historia por su diversa contribución científica entre la fisiología y la física (Shapiro, 1972).

No obstante, el germen de la contribución de Fick se remonta a los estudios cuantitativos de la difusión en gases realizados por el químico escocés Thomas Graham (1805-1869), quien luego extendió sus estudios a la difusión de la sal en líquidos. Este último trabajo de Graham le sirvió de guía a Fick para establecer una ley del fenómeno de difusión, basándose en la analogía de este con la conducción térmica, expresada mediante la ley de Fourier. En su artículo de 1855 *On liquid diffusion*, publicado en *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, Fick enunció el fundamento de su naciente ley: "De acuerdo con esta ley, la transferencia de sal y agua que ocurre en una unidad de tiempo, entre dos elementos del espacio lleno de soluciones de la misma sal de concentración diferente, debe ser, caeteris paribus, directamente proporcional a la diferencia de concentración, e inversamente proporcional a la distancia de los elementos entre sí" (Fick, 1855).

En la actualidad, el trabajo de Fick, quien falleció en 1901, a 13 días de cumplir los 72 años, se resume en lo que se denomina la primera y la segunda ley de difusión, siendo la primera, la definición matemática del flujo de masa en el agua, y la segunda, la ecuación de difusión. Estas ecuaciones constituyen su más valioso aporte al estudio del fenómeno de la difusión, incluyendo además la definición del coeficiente de difusión. La ley de Fick es una ecuación diferencial parcial lineal de segundo orden, y sus primeras soluciones fueron aportadas por los matemáticos Joseph Stephan y Franz Neumann (Mehrer and Stolwijk, 2009).

impulsados por la mezcla del contaminante en el agua: difusión molecular, difusión turbulenta, dispersión longitudinal y dispersión lateral (Nirmalakhandan, 2002; Ji, 2017). Por su naturaleza relacionada por el fenómeno de la mezcla, tanto la difusión como la dispersión pueden estudiarse a partir de la ley de Fick de la difusión (Fick, 1855):

$$J_i^d = -D \left( \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) \quad \text{Ec. [2.1]}$$

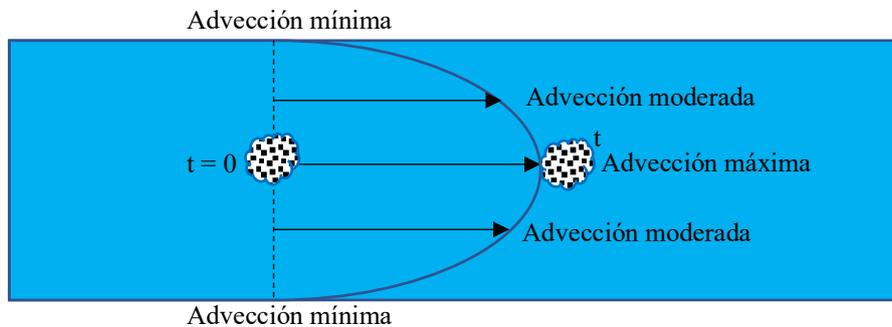
donde,  $J_i^d$  es la densidad superficial del flujo másico de la sustancia transportada por difusión o dispersión ( $M/L^2T$ ) en la dirección  $i$ ,  $D$  es el coeficiente de difusión *isotrópica*, o independiente de la dirección ( $L^2/T$ ),  $C$  es la concentración de la sustancia; y  $x_i$  es la coordenada de distancia medida sobre una determinada dirección espacial ( $L$ ). En sentido estricto, la ecuación 2.1 es la primera ley de Fick.

### 2.1.1 Advección

Una descripción detallada de los procesos de transporte identificados previamente requiere el tratamiento diferenciado entre la advección, por un lado, y los fenómenos vinculados con los distintos mecanismos de transporte impulsados por la mezcla de los contaminantes en el agua (difusión y dispersión), por otro. El criterio de la mezcla es, precisamente, el aspecto diferenciador fundamental entre el transporte advectivo y el resto, pues, a diferencia de todos los demás, la advección sólo provoca el movimiento o traslado de las sustancias a causa del impulso del flujo natural del agua, sin dilución significativa de aquellas. Esto implica que la advección será el proceso primario de transporte en ríos y arroyos, debido a que, hidrodinámicamente, estos ecosistemas están controlados principalmente por el caudal o flujo volumétrico de la corriente. La siguiente definición aporta una aproximación más detallada sobre las características de la advección como fenómeno de transporte:

**Definición 2.1**

La advección es el transporte horizontal sin mezcla de masa, impulsado por el movimiento natural o flujo de un cuerpo de agua, y cuya intensidad está regulada por el perfil de velocidad característico del sistema acuático, de modo que, en ríos, arroyos y estuarios, donde resulta más significativa, tendrá un valor máximo en el centro de la corriente y un valor mínimo hacia las orillas.



**Figura 2-1** Fenómeno ideal de advección en corrientes superficiales (ríos, esteros, estuarios).

La figura 2-1 ofrece una explicación visual idealizada del fenómeno de la advección en cuerpos de agua de flujo laminar. Como se indicó en la definición 2.1, la variabilidad lateral de la velocidad de la corriente hace que el flujo del agua sea más rápido en el centro que en las cercanías de las orillas; por tanto, la advección de masa será mayor cuando esta se mueva impulsada por su caudal a lo largo del centro de la corriente, y mínima cuando la masa se traslade cercanamente a sus orillas. Cabe señalar que el transporte descrito se denomina más específicamente advección longitudinal, precisamente por estar relacionada con el flujo horizontal del agua; sin embargo, puede ocurrir también la advección lateral, aunque ésta suele ser poco importante en este tipo de sistemas. Además, es importante puntualizar que la masa no experimenta ningún tipo de alteración significativa en su traslado desde su posición inicial al tiempo  $t = 0$  hasta una ubicación posterior aguas abajo a un tiempo  $t$ .

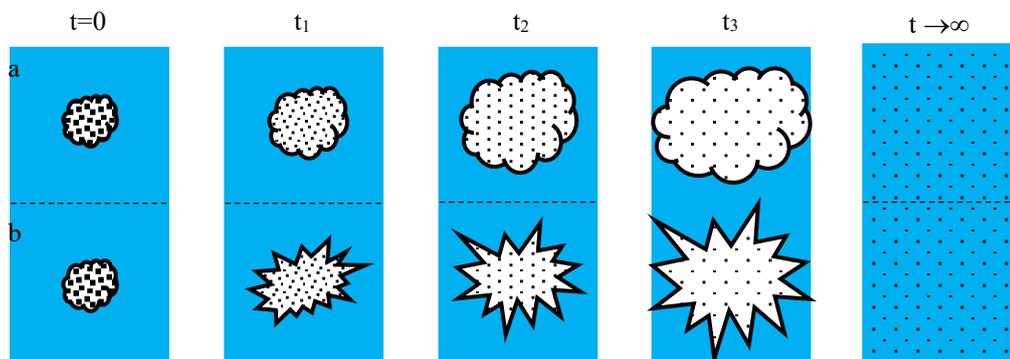
**2.1.2 Difusión**

Cuando el transporte de materia en el agua implica movimiento y mezclado a la vez, el esparcimiento de masa puede ocurrir tanto a nivel microscópico como macroscópico, pero a diferencia del movimiento

advectivo regulado por un gradiente de energía mecánica o de energía potencial gravitatoria que impulsa la corriente, y arrastra la masa, en una determinada dirección, el transporte por difusión está vinculado a un gradiente de concentración, esencialmente aleatorio. Esta aleatoriedad es una característica distintiva de la difusión, que cuando se manifiesta a nivel microscópico produce la *difusión molecular* de una sustancia, impulsada por el movimiento browniano de sus moléculas; pero cuando ocurre a nivel macroscópico, causa la *difusión turbulenta* de las sustancias, impulsada por remolinos o fluctuaciones aleatorias de la velocidad de la corriente en los cuerpos de agua. Cuando la mezcla de masa en el agua no esté intermediada por el azar, el mecanismo de transporte no es difusivo, sino dispersivo, como se verá más adelante.

### Definición 2.2

La difusión es el transporte aleatorio de una sustancia en el agua, o en el ambiente en general, que provoca el esparcimiento espacial y la mezcla de la masa de la sustancia obedeciendo a la tendencia de minimizar el gradiente de concentraciones entre un lugar y otro, de modo que el transporte se hará desde las regiones de alta concentración a las de baja concentración de la sustancia en el medio. Dependiendo de la escala espacial de la aleatoriedad del movimiento, la difusión será molecular o turbulenta, a nivel microscópico y macroscópico, respectivamente.



**Figura 2-2** Fenómeno ideal de difusión a) molecular; b) molecular + turbulenta.

La figura 2-2 ofrece una perspectiva idealizada del proceso de transporte difusivo en cuerpos de aguas. En el caso a) la masa de la sustancia en el agua es esparcida espaciotemporalmente y mezclada solo a causa de su movimiento browniano, de modo que se promueve así un transporte pasivo y homogéneo de la masa, siguiendo la tendencia de minimizar el gradiente

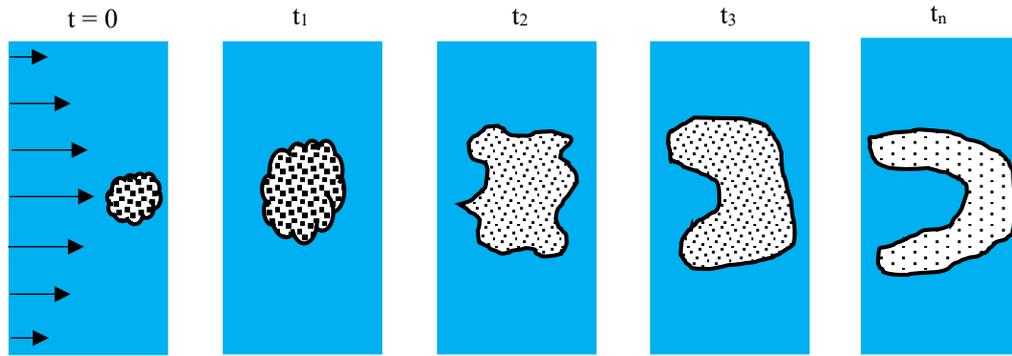
de concentración; en el caso b), la masa es transportada como resultado de una combinación de mecanismos moleculares y turbulentos de la difusión, por lo que la aleatoriedad sumada por remolinos y las fluctuaciones azarosas de la velocidad configura una difusión más irregular y caótica, pero más rápida. No obstante, como resulta evidente, hacia un tiempo suficientemente grande, en condiciones ideales, se esperaría que la concentración de la sustancia estuviere uniforme y equitativamente distribuida en el cuerpo de agua. En ríos, arroyos y corrientes superficiales en general, la difusión turbulenta es un mecanismo de transporte más importante que la difusión molecular.

### 2.1.3 Dispersión

La dispersión es un proceso de transporte de masa relacionado también con la mezcla, sin embargo, a diferencia de la difusión, que ocurre básicamente por el movimiento aleatorio de las partículas en el fluido, esta es el resultado de la existencia de gradientes de velocidad en el fluido (específicamente agua, en el contexto de interés de este libro). Tal variabilidad espacial de la velocidad media en un cuerpo de agua produce el esparcimiento y mezcla de sustancias en forma de rasgado, con el tirón de mayor intensidad a lo largo del eje de mayor velocidad del agua. Por su dependencia de la velocidad de la corriente, la dispersión es predominante como mecanismo de mezcla en ríos, arroyos y estuarios, en los cuales, la dispersión longitudinal es mucho más importante que la dispersión lateral.

#### **Definición 2.3**

*La dispersión es el proceso de transporte de masa en un fluido debido a la variación espacial de la velocidad media, que produce la mezcla de una sustancia con mayor intensidad y amplitud de esparcimiento en las regiones y hacia las direcciones de mayor rapidez de las corrientes. Cuando la dispersión se produce en el sentido del flujo se denomina dispersión longitudinal; y cuando ocurre en forma perpendicular a éste, toma el nombre de dispersión lateral.*



**Figura 2-3** Transporte y mezcla dispersiva (difusión molecular-difusión turbulenta + dispersión).

La figura 2-3 representa la mezcla resultante de un proceso de transporte dispersivo en una corriente unidireccional con gradiente lateral de velocidad (río, arroyo, etc.). La masa de la sustancia que ha ingresado al cuerpo de agua experimenta inicialmente un mezclado difusivo, de naturaleza predominantemente turbulenta; no obstante, a medida que transcurre el tiempo, el transporte de la sustancia adquiere un carácter cada vez más dispersivo como resultado del impulso diferenciado imprimido por la variación espacial de la velocidad en el flujo del agua; así, cuando el mecanismo de dispersión longitudinal empieza a prevalecer por encima de la difusión, se configura un mezclado desigual con esparcimiento estirado o rasgado hacia las direcciones de mayor velocidad de la corriente, tomando la forma idealizada general que se observa al final del gráfico, descrita usualmente como forma de cizalla.

Finalmente, en el desarrollo de los temas posteriores, se entenderá que la dispersión será el término válido para referirse al transporte superficial con mezclado en corrientes estrechas y fluidas (no estancadas), como en ríos de moderado y pequeño cauce, arroyos y estuarios; por otro lado, en el caso de lagos, lagunas, embalses y bahías, lo correcto será emplear el término difusión para referirse al transporte de masa en ellos, ya que en ese tipo de cuerpos de agua predominará el mezclado difusivo por la acción de diferentes agentes que aleatorizarán el movimiento de una sustancia en el fluido que la transporta, entre ellos el viento.

## 2.2 La ecuación de advección-difusión (dispersión) (ADE)

A partir de la ley de conservación de la masa, para un volumen de control en un cuerpo de agua que transporta una sustancia o contaminante ambiental, y luego de manipular adecuadamente la primera ley de la difusión de Fick o ecuación [2.1], incluyendo la aplicación del teorema de la divergencia que relaciona una integral doble (de superficie) con una integral triple (de volumen), es posible modelizar el transporte general por advección-difusión. No obstante, para tal efecto, en primer lugar, se debe contar con una expresión que describa el flujo másico debido a la advección, ya que las sustancias en el agua, además de mezclarse por difusión molecular o turbulenta, son transportadas por advección o el impulso del caudal de las corrientes. Así, tal expresión viene dada por

$$J_i^a = v_i C \quad \text{Ec. [2.2]}$$

donde,  $J_i^a$  es la densidad superficial del flujo másico de la sustancia transportada por advección ( $M/L^2T$ ) en la dirección  $i$ ,  $v_i$  es la velocidad macroscópica de la corriente ( $L/T$ ) en la dirección  $i$ , y  $C$ , como ya se indicó anteriormente, representa la concentración ( $M/L^3$ ).

El hecho de que las sustancias en el agua sean transportadas tanto por advección como por difusión permite relacionar las ecuaciones [2.1] y [2.2] para obtener la densidad superficial del flujo másico total, mediante la suma

$$J_i^T = J_i^a + J_i^d = v_i C - D \left( \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) \quad \text{Ec. [2.3]}$$

Debido a que la difusión es un mecanismo de transporte que puede ocurrir en las tres dimensiones del volumen del cuerpo de agua donde se encuentra la sustancia, una expresión más general para la ecuación [2.3] podría ser

$$J_{x,y,z}^T = v_i C - \left[ D \left( \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right] \quad \text{Ec. [2.4]}$$

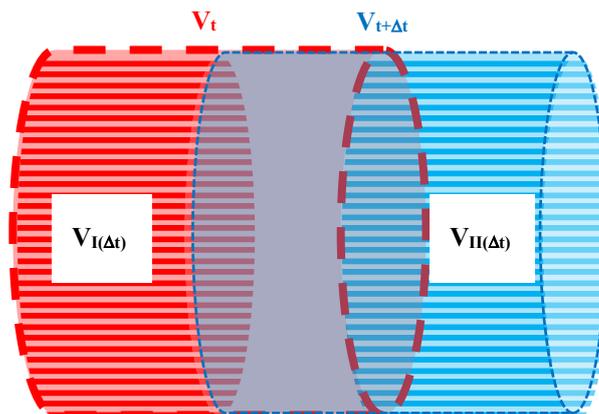
Sin embargo, utilizando la notación de Gibbs, conviene ahora expresar la relación establecida por la ecuación [2.4], en forma vectorial incorporando el operador nabla  $\nabla$

$$\mathbf{j} = \mathbf{v}C - D\nabla C \quad \text{Ec. [2.5]}$$

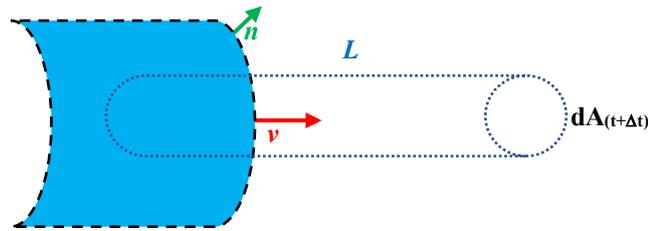
donde,  $\mathbf{j}$  es el vector tridimensional de flujo másico superficial y  $\mathbf{v}$  es el vector de la velocidad macroscópica.

El siguiente paso consiste en estudiar la evolución de un sistema o volumen de agua que se mueve en el espacio (volumen fluido) atravesando un volumen de control fijo en el espacio (Figura 2-4); esto es, será necesario establecer una relación matemática para evaluar el comportamiento de una cantidad escalar (en este caso será la concentración de un contaminante) vinculando el sistema y su volumen de control. Para esto, se debe calcular la variación temporal de la cantidad escalar dentro del volumen de agua, lo cual se hace mediante la derivada temporal de la integral triple o de volumen, expresada como

$$\frac{d}{dt} \int_{V_t} C dV = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[ \frac{\int_{V_{t+\Delta t}} C_{t+\Delta t} dV - \int_{V_t} C_t dV}{\Delta t} \right] \quad \text{Ec. [2.6]}$$



**Figura 2-4** Relación entre un volumen de control y un sistema (fluido) en movimiento, en los instantes  $t$  y  $t+\Delta t$ .



**Figura 2-5** Diferencial de superficie del volumen en

En la figura 2-4 resulta evidente que es válida la relación entre los volúmenes fluidos y el volumen de control dada por

$$V_{t+\Delta t} = V_t + V_{II(\Delta t)} - V_{I(\Delta t)} \quad \text{Ec. [2.7]}$$

donde  $V_t$  es el volumen fluido al instante  $t$ , que coincide con el volumen de control (igual tamaño);  $V_{t+\Delta t}$  es el volumen fluido al instante  $t+\Delta t$ , que está formado por la parte final del volumen fluido dentro del volumen de control y un volumen nuevo que se generará externamente al volumen de control al final de un intervalo de tiempo  $\Delta t$ ;  $V_{I(\Delta t)}$  es el volumen desocupado por el sistema dentro del volumen de control fijo; y  $V_{II(\Delta t)}$  es el nuevo volumen generado por el volumen fluido durante el intervalo de tiempo  $\Delta t$ . En otras palabras, es posible interpretar la ecuación [2.7] afirmando que el volumen del sistema o volumen fluido (que está al mismo tiempo dentro y fuera del volumen de control) a un instante posterior cualquiera  $t+\Delta t$ , es igual al volumen fluido igual en tamaño al volumen de control más la diferencia entre el nuevo volumen generado (región sombreada II fuera del volumen de control) y el viejo volumen desocupado (región sombreada I dentro del volumen de control). Es útil expresar ahora la ecuación [2.7] en forma integral para evaluar la variación de la concentración de un contaminante dentro del agua como

$$\int_{V_{t+\Delta t}} C_{t+\Delta t} dV = \int_{V_t} C_{t+\Delta t} dV + \int_{V_{II(\Delta t)}} C_{t+\Delta t} dV_{II} - \int_{V_{I(\Delta t)}} C_{t+\Delta t} dV_I \quad \text{Ec. [2.8]}$$

Luego, reemplazando la ecuación [2.8] en [2.6] se tiene que

$$\frac{d}{dt} \int_{V_t} C dV = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[ \frac{\int_{V_t} C_{t+\Delta t} dV + \int_{V_{II(\Delta t)}} C_{t+\Delta t} dV_{II} - \int_{V_{I(\Delta t)}} C_{t+\Delta t} dV_I - \int_{V_t} C_t dV}{\Delta t} \right] \quad \text{Ec. [2.9]}$$

Y separando los límites resulta

$$\frac{d}{dt} \int_{V_t} C dV = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \int_{V_t} \left[ \frac{C_{t+\Delta t} - C_t}{\Delta t} \right] dV - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[ \frac{\int_{V_{II(\Delta t)}} C_{t+\Delta t} dV_{II} - \int_{V_{I(\Delta t)}} C_{t+\Delta t} dV_I}{\Delta t} \right] \quad \text{Ec. [2.10]}$$

$$\frac{d}{dt} \int_{V_t} C dV = \int_{V_t} \frac{\partial C}{\partial t} dV - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[ \frac{\int_{V_{II(\Delta t)}} C_{t+\Delta t} dV_{II} - \int_{V_{I(\Delta t)}} C_{t+\Delta t} dV_I}{\Delta t} \right] \quad \text{Ec. [2.11]}$$

Por otro lado, se debe considerar también la relación entre un diferencial de volumen y un diferencial de superficie a medida que el volumen fluido se mueve. Como se observa en la figura 2-5, un diferencial de volumen  $dV$  se puede expresar en función de la longitud del volumen barrido por el diferencial de superficie a partir del cual se genera; esto es

$$dV = L dA \quad \text{Ec. [2.12]}$$

Sin embargo, debido a que hay un ángulo que fija la orientación del movimiento del volumen fluido con respecto al vector normal a la superficie ( $n$ ), y que afecta la relación entre los diferenciales de volumen y superficie considerados, de modo que la ecuación [2.12] se puede ampliar a

$$dV = \pm L \cos \theta dA \quad \text{Ec. [2.13]}$$

Luego, es posible sustituir la longitud por una expresión equivalente resultante de multiplicar el módulo del vector velocidad de la corriente ( $v$ ) por un intervalo de tiempo ( $\Delta t$ ), por lo que

$$dV = \pm \cos \theta |v| \Delta t dA \quad \text{Ec. [2.14]}$$

Asimismo, el término trigonométrico  $\cos \theta$  puede reemplazarse por el producto entre el vector dirección de la velocidad y el vector normal a la superficie del volumen ( $n$ ); entonces la ecuación [2.14] cambia a

$$dV = \pm \vec{v} n \Delta t dA \quad \text{Ec. [2.15]}$$

La expresión final del diferencial de volumen en función del diferencial de superficie se obtiene luego de introducir el vector velocidad media (que no es más que el producto de su módulo por el vector dirección) del volumen fluido en la ecuación [2.15]; esto es

$$dV = \pm \vec{u} \cdot \vec{n} \Delta t dA \quad \text{Ec. [2.16]}$$

Si se sustituye la expresión final del diferencial del volumen en los diferenciales de volumen correspondientes a las regiones I (con signo negativo por tratarse de un flujo entrante) y II (con signo positivo por ocurrir en ella un flujo de salida con respecto al volumen de control) en la ecuación [2.11] resulta

$$\frac{d}{dt} \int_{V_t} c dV = \int_{V_t} \frac{\partial c}{\partial t} dV - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[ \frac{\int_{V_{II(\Delta t)}} c_{t+\Delta t} \vec{u} \cdot \vec{n} \Delta t dA_{II} - \left( - \int_{V_{I(\Delta t)}} c_{t+\Delta t} \vec{u} \cdot \vec{n} \Delta t dA_I \right)}{\Delta t} \right] \quad \text{Ec. [2.17]}$$

$$\frac{d}{dt} \int_{V_t} c dV = \int_{V_t} \frac{\partial c}{\partial t} dV - \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[ \int_{V_{II(\Delta t)}} c_{t+\Delta t} \vec{u} \cdot \vec{n} dA_{II} + \int_{V_{I(\Delta t)}} c_{t+\Delta t} \vec{u} \cdot \vec{n} dA_I \right] \quad \text{Ec. [2.18]}$$

Ahora bien, la ecuación [2.18] requiere el cálculo de dos límites para un intervalo de tiempo que tienda a cero; en este caso vemos que si se calculan tales límites la concentración al tiempo  $t+\Delta t$  ( $c_{t+\Delta t}$ ) se convierte en concentración al tiempo  $t$  ( $c_t$ ) y, consecuentemente, los diferenciales  $dA_I$  y  $dA_{II}$  estarían dentro de los límites del volumen de control, debido que al tiempo  $t$ , el sistema o volumen fluido coincide en tamaño (está exactamente dentro) del volumen de control; así, la suma de los diferenciales  $dA_I$  y  $dA_{II}$  representaría el diferencial del área al tiempo  $t$ , o  $dA_t$ . Con base en esto, la ecuación [2.18] se transforma de esta forma

$$\frac{d}{dt} \int_{V_t} c dV = \int_{V_t} \frac{\partial c}{\partial t} dV + \int_{A_t} c \vec{u} \cdot \vec{n} dA \quad \text{Ec. [2.19]}$$

La ecuación [2.19] se conoce como el *teorema del transporte de Reynolds* (obviamente, no en su forma general, sino aplicado al estudio de la propiedad extensiva concentración) y puede interpretarse de la siguiente forma: la tasa a la que un contaminante se introduce dentro del volumen de control es igual a la tasa de acumulación del contaminante dentro del volumen de control más la tasa a la que el contaminante sale de él. Por lo que, expresando el balance de masa en estado estacionario, tal como se lo hizo en el capítulo uno, se tiene que

$$\int_{V_t} \frac{\partial C}{\partial t} dV = \frac{d}{dt} \int_{V_t} C dV - \int_{A_t} C \vec{u} \cdot \vec{n} dA \quad \text{Ec. [2.20]}$$

Acumulación = Entrada - Salida

En este punto, es necesario volver nuestra atención sobre el objetivo de esta sección que es la obtención de una expresión matemática que describa el transporte de contaminantes en el agua mediante advección y difusión a partir de la primera ley de Fick. En este contexto, si se recuerdan las dimensiones del vector tridimensional del flujo másico superficial  $j$  ( $ML^{-2}T^{-1}$ ), se caerá en la cuenta de que el producto entre la concentración y el vector velocidad en el término representativo de la salida en la ecuación [2.20] tiene también aquellas dimensiones [ $(ML^{-3})(LT^{-1}) = ML^{-2}T^{-1}$ ]; esto es, son intercambiables. Además, en la misma ecuación el primer término de la derecha (entrada) representa la tasa de ingreso del contaminante desde alguna fuente, por lo que puede expresarse también mediante la variable representativa de las fuentes o sumideros  $S_m$  (el símbolo  $S$  proviene de las palabras inglesas *source* para fuente y *sink* para sumidero), cuyo subíndice  $m$  establece la posibilidad de ocurrencia de un aumento o disminución de la concentración del contaminante por acción de una carga contaminante que entre o salga del sistema. Por lo anterior, la ecuación [2.20] puede expresarse como

$$\int_{V_t} \frac{\partial C}{\partial t} dV = \int_{V_t} S_m dV - \int_{A_t} \vec{j} \cdot \vec{n} dA \quad \text{Ec. [2.21]}$$

Es posible, y necesario, ahora simplificar la ecuación [2.21] recurriendo al teorema de la divergencia, de modo que la integral de superficie (salida) se convierta en una integral de volumen, a fin de agrupar todos los volúmenes obtenidos así en una sola integral, como se verá más adelante. Así, la aplicación del teorema de la divergencia permite escribir la ecuación [2.21] de la siguiente forma:

$$\int_{V_t} \frac{\partial C}{\partial t} dV = \int_{V_t} S_m dV - \int_{V_t} \nabla \cdot \mathbf{j} dV \quad \text{Ec. [2.22]}$$

Luego, agrupando los términos e igualando a cero, se obtiene

$$\int_{V_t} \left( \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} - S_m \right) dV = 0 \quad \text{Ec. [2.23]}$$

#### NOTA DE INTERÉS

El teorema de la divergencia, denominado usualmente también como teorema de Gauss-Ostrogradsky, es uno de los tres teoremas más importantes del cálculo vectorial junto con el teorema de Green y el de Stokes. Como lo sugiere su nombre, fue enunciado originalmente por el matemático alemán Carl Friedrich Gauss en 1813, aunque su publicación definitiva no se produjo sino hasta 1839; asimismo, de manera independiente, el físicomatemático ruso Mijaíl Vasílievich Ostrogradsky en 1826 había demostrado ya el teorema, aunque su publicación formal "*Proof of a theorem in Integral Calculus*" tardó hasta el año 1831 (Katz, 1979). Algunas fuentes sugieren incluso que también el matemático británico George Green contribuyó al desarrollo del teorema, cuyos resultados se divulgaron hacia el año 1828.

Aunque surgió en estudios relacionados con la electrostática y los campos electromagnéticos, sus más importantes aplicaciones incluyen la mecánica de fluidos. En esencia, el teorema de la divergencia relaciona (convierte) la integral triple de un sólido cerrado y acotado en el espacio tridimensional o volumen finito con la integral de superficie de su frontera o área que limita el volumen considerado. Su expresión matemática se suele escribir como (Purcell, Rigdon and Varberg, 2007)

$$\int \int_S \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS = \int \int \int_V \nabla \cdot \mathbf{F} dV$$

Sin embargo, una forma más formal de interpretar la ecuación anterior es que el teorema de la divergencia está relacionado con el flujo de un campo vectorial  $F$  a través de una superficie cerrada  $S$  que es igual a la integral de la divergencia de  $F$  sobre el volumen encerrado por la superficie  $S$ . Otra notación del teorema es la siguiente

$$\oint_S \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \nabla \cdot \mathbf{F} dV$$

Es evidente que la ecuación [2.23] se resuelve cuando el integrando se iguala a cero, esto es

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} - S_m = 0 \quad \text{Ec. [2.24]}$$

Finalmente, reemplazando la ecuación [2.5] en [2.24] se obtiene

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}C - D\nabla C) - S_m = 0 \quad \text{Ec. [2.25]}$$

Propiedad del  
operador  
diferencial  
nabla

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\nabla C) \cdot \mathbf{v} + (\nabla \cdot \mathbf{v})C - D\nabla^2 C = S_m \quad \text{Ec. [2.26]}$$

Para fluidos  
incompresibles  
 $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + (\nabla C) \cdot \mathbf{v} = D\nabla^2 C + S_m \quad \text{Ec. [2.27]}$$

Si el operador nabla se sustituye por su expresión diferencial equivalente, finalmente, se obtiene la denominada **ecuación de advección-difusión en condiciones isotrópicas** (tal como se estableció al principio de esta sección).

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \underbrace{\left( v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + v_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)}_{\text{ADVECCIÓN}} = D \underbrace{\left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)}_{\text{DIFUSIÓN}} + S_m \quad \text{Ec. [2.28]}$$

O de una forma compacta, la ecuación de advección-difusión en condiciones isotrópicas se expresa como

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = D \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2} + S_m \quad \text{Ec. [2.29]}$$

No obstante, la forma más general y común corresponde a la **ecuación de advección-difusión en condiciones anisotrópicas** (cuando el coeficiente de difusión varía con la dirección), tal como se indica a continuación

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \underbrace{\left( v_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_y \frac{\partial C}{\partial y} + v_z \frac{\partial C}{\partial z} \right)}_{\text{ADVECCIÓN}} = \underbrace{D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}}_{\text{DIFUSIÓN}} + S_m \quad \text{Ec. [2.30]}$$

O en su forma compacta,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 V_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^3 D_i \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2} + S_m \quad \text{Ec. [2.31]}$$

Donde el subíndice  $i$  indica cada una de las tres direcciones del espacio tridimensional  $x, y, z$ .

En el caso del transporte de sustancias conservativas y no conservativas (que experimentan un decaimiento de primer orden en su concentración), el término fuente/sumidero  $S_m$  es igual a cero 0 o igual al producto  $-kC$ , respectivamente, y, por lo tanto, la ecuación de advección-difusión toma la forma

Para sustancias conservativas

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 V_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^3 D_i \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2} \quad \text{Ec. [2.32]}$$

Para sustancias no conservativas

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 V_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^3 D_i \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2} - kC \quad \text{Ec. [2.33]}$$

## 2.2.1 Soluciones de la ecuación de advección-difusión

### 2.2.1.1 Difusión en una dimensión

La difusión en una dimensión ocurre bajo el supuesto de que la sustancia transportada en el agua está bien mezclada en la sección transversal limitada por el plano  $yz$ , y que la mezcla difusiva se desarrolla únicamente a lo largo de la dirección longitudinal  $x$ , esto es, si se trata de una corriente unidireccional como un río o arroyo, en el sentido impuesto por su flujo, de aguas arriba hacia aguas abajo. Luego, la ecuación de partida resulta de

ignorar la advección y eliminar los términos difusivos de las direcciones distintas a  $x$  en la ecuación [2.30], de modo que

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) \quad \text{Ec. [2.34]}$$

Su solución requiere las siguientes condiciones iniciales y de frontera:

Condiciones iniciales	Condiciones de frontera
$C(x, 0) = \frac{M}{A} \delta(x)$	$C(\pm\infty, t) = 0$

Donde  $M$  es la masa del contaminante descargado desde una fuente instantánea en el cuerpo de agua (cuando  $x = 0$  y  $y = 0$ ),  $A$  es el área de la sección transversal (plano  $yz$ ), y  $\delta(x)$  es la función delta de Dirac, definida como

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x = 0 \\ 0 & \text{si } x \neq 0 \end{cases} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$$

Además, se debe tener presente que la condición de frontera establece que la concentración del contaminante siempre será cero a grandes distancias ( $x = \pm\infty$ ) para los intervalos de tiempo  $t$  correspondientes.

Para resolver la función concentración  $C(x, t)$ , se puede calcular su transformada de Fourier y su función inversa tal como sigue

Transformada de Fourier de la función $C(x, t)$	$\mathcal{F}(\alpha, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(x, t) e^{i\alpha x} dx$	Ec. [2.35]
---	---	------------

Función inversa de la transformada de Fourier	$\mathcal{F}^{-1} = C(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}(\alpha, t) e^{-i\alpha x} d\alpha$	Ec. [2.36]
---	---	------------

Luego, si se toma la transformada de Fourier a ambos lados de la ecuación diferencial parcial [2.34]

$$\mathcal{F}\left[\frac{\partial C}{\partial t}\right] = \mathcal{F}\left[D_x\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right)\right] \quad \text{Ec. [2.37]}$$

se obtiene, por propiedad de la transformada (véase *siguiente nota de interés*), la siguiente ecuación diferencial lineal homogénea de primer orden

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = -D_x\alpha^2\mathcal{F}(\alpha, t) \quad \text{Ec. [2.38]}$$

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} + D_x\alpha^2\mathcal{F}(\alpha, t) = 0 \quad \text{Ec. [2.39]}$$

Siendo el factor integrante igual a  $e^{D_x\alpha^2 t}$ , la solución de la ecuación [2.39] es

$$\mathcal{F}(\alpha, t) = Ie^{-D_x\alpha^2 t} \quad \text{Ec. [2.40]}$$

donde  $I$  es la constante de integración de la solución general.

La expresión equivalente a la constante de integración en la ecuación [2.40] se obtiene mediante el cálculo de la transformada de Fourier de las condiciones iniciales, puesto que al tiempo  $t = 0$ ,  $e^{-D_x\alpha^2 t} = 1$ , y consecuentemente,  $I$  es igual a la referida transformada; entonces,

$$I = \mathcal{F}(\alpha, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M}{A} \delta(X) dx \quad \text{Ec. [2.41]}$$

$$I = \frac{M}{A} \quad \text{Ec. [2.42]}$$

Por lo que, sustituyendo la ecuación [2.42] en [2.40], se obtiene la transformada de Fourier resultante para las condiciones iniciales dadas,

$$\mathcal{F}(\alpha, t) = \frac{M}{A} e^{-D_x\alpha^2 t} \quad \text{Ec. [2.43]}$$

El siguiente paso consiste en determinar la inversa de la transformada de Fourier, sustituyendo la ecuación [2.43] en [2.36]

$$\mathcal{F}^{-1} = C(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M}{A} e^{-D_x t \alpha^2} e^{-ix\alpha} d\alpha \quad \text{Ec. [2.44]}$$

$$\mathcal{F}^{-1} = C(x, t) = \frac{M}{2\pi A} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D_x t \alpha^2 - ix\alpha} d\alpha \quad \text{Ec. [2.45]}$$

La resolución de esta ecuación requiere de completar el trinomio cuadrado perfecto en el exponente del término exponencial, de acuerdo con la regla  $a x^2 + b x + c = a(x+h)^2 + k$ , donde  $h = b/2a$  y  $k = c - (b^2/4a)$ . De modo que,

$$-D_x t \alpha^2 - ix\alpha = -D_x t \left( \alpha + \frac{ix}{2D_x t} \right)^2 + \frac{(ix)^2}{4D_x t} \quad \text{Ec. [2.46]}$$

Luego, la sustitución de la ecuación [2.46] en la [2.45] produce,

$$\mathcal{F}^{-1} = C(x, t) = \frac{M}{2\pi A} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D_x t \left( \alpha + \frac{ix}{2D_x t} \right)^2 + \frac{(ix)^2}{4D_x t}} d\alpha \quad \text{Ec. [2.47]}$$

$$\mathcal{F}^{-1} = C(x, t) = \frac{M}{2\pi A} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-D_x t \left( \alpha + \frac{ix}{2D_x t} \right)^2} e^{\frac{(ix)^2}{4D_x t}} d\alpha \quad \text{Ec. [2.48]}$$

Haciendo que  
 $u = \sqrt{D_x t} \left( \alpha + \frac{ix}{2D_x t} \right)$

$$\mathcal{F}^{-1} = C(x, t) = \frac{M}{2\pi A} e^{\frac{(ix)^2}{4D_x t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} d\alpha \quad \text{Ec. [2.49]}$$

$$\frac{du}{d\alpha} = \sqrt{D_x t} \quad \mathcal{F}^{-1} = C(x, t) = \frac{M}{2\pi A} e^{\frac{(ix)^2}{4D_x t}} \frac{1}{\sqrt{D_x t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du \quad \text{Ec. [2.50]}$$

La ecuación [2.50] contiene la denominada integral de Gauss, o la integral impropia de la función gaussiana  $e^{-x^2}$  que, aunque no es posible obtener su función primitiva en una solución analítica por medio del segundo teorema fundamental del cálculo, el resultado de su evaluación en límites infinitos es archiconocido:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \quad \text{Ec. [2.51]}$$

Por lo tanto, si se aplica la integral gaussiana a la ecuación [2.50], luego de algunas manipulaciones matemáticas (que se muestran) se obtiene finalmente la ecuación que da la concentración de un contaminante  $C(x, t)$  a una distancia  $x$  y un instante cualquiera  $t$  en un proceso de difusión unidimensional,

$$C(x, t) = \frac{M}{2\pi A} e^{\frac{(ix)^2}{4D_x t}} \frac{1}{\sqrt{D_x t}} \sqrt{\pi} \quad \text{Ec. [2.52]}$$

Definición de  
unidad  
imaginaria

$$C(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi D_x t}} e^{\frac{(\sqrt{-1}x)^2}{4D_x t}} \quad \text{Ec. [2.53]}$$

$$\therefore C(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi D_x t}} e^{-\frac{x^2}{4D_x t}} \quad \text{Ec. [2.54]}$$

No obstante, si se asume que la velocidad de la corriente es constante, el uso de una variable sustituta  $x'$  puede incorporar la velocidad media dentro de la ecuación [2.34] para producir la ecuación de advección-difusión en una dimensión,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x'^2} \right) \quad \text{Ec. [2.55]}$$

donde  $x'$  representa la posición relativa de las partículas del contaminante,  $Vt$ , con respecto a su posición media  $x$ , siendo su expresión

$$x' = x - vt \quad \text{Ec. [2.56]}$$

Por lo que, aplicando un método similar al utilizado para deducir la ecuación unidimensional de la difusión; esto es, con las mismas condiciones iniciales y de frontera, además del uso de la transformada de Fourier y su inversa, se obtiene la **solución de la ecuación de advección difusión en una dimensión**:

$$\therefore C(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi D_x t}} e^{-\frac{(x-vt)^2}{4D_x t}} \quad \text{Ec. [2.57]}$$

## NOTA DE INTERÉS

Jean-Baptiste Joseph Fourier, uno de los físicos y matemáticos más grandes de la historia, nació en la ciudad francesa de Auxerre el 21 de marzo de 1768, y su mayor contribución a la ciencia fue su estudio del fenómeno de conducción térmica en metales, basándose en el estudio de Bernouilli sobre las cuerdas vibrantes, resumido en la ecuación del calor, trabajo que fue propuesto originalmente a la Academia Francesa de Ciencias en 1807, pero que fue rechazado por científicos de la talla de Pierre Simon Laplace y Joseph Louis Lagrange, quienes tuvieron fuertes reparos en relación con la “falta de rigurosidad” en la propuesta de Fourier de recurrir a expansiones infinitas de funciones trigonométricas, las posteriormente denominadas *series de Fourier*, aunque el auténtico mérito se hallaba en la solución de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales mediante el método de separación de variables basándose en tales series. Sin embargo, el tiempo fue su mejor aliado y, finalmente, luego de ganar el premio de la Academia en 1812 (sin aún merecer su publicación para el jurado), y publicar en 1822 su legendaria obra *Théorie Analytique de la Chaleur*, consiguió publicar su trabajo en las Memorias de la Academia Francesa de Ciencias en el año 1826 (Herivel, 1975; Córdoba, 2016).

La **serie de Fourier** que, básicamente es una forma de expresar una **función periódica** como una serie infinita de funciones trigonométricas seno y coseno, tiene la siguiente forma (Zill and Wright, 2015):

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ a_n \cos\left(\frac{n\pi}{p}x\right) + b_n \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{p}x\right) \right]$$

Siendo  $a_0$ ,  $a_n$  y  $b_n$  las denominadas fórmulas de Euler, cuyas expresiones son

$$a_0 = \frac{1}{p} \int_{-p}^p f(x) dx \quad a_n = \frac{1}{p} \int_{-p}^p f(x) \cos\left(\frac{n\pi}{p}x\right) dx \quad b_n = \frac{1}{p} \int_{-p}^p f(x) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{p}x\right) dx$$

Sin embargo, cuando se trata de **funciones no periódicas**, existe una forma generalizada de las series de Fourier, denominada **integral de Fourier**, cuya expresión es

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} [A(\alpha) \cos(\alpha x) + B(\alpha) \operatorname{sen}(\alpha x)] d\alpha$$

Siendo  $A(\alpha)$  y  $B(\alpha)$  los coeficientes de la integral de Fourier, cuyas expresiones son

$$A(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cos(x\alpha) dx \quad B(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \operatorname{sen}(x\alpha) dx$$

Finalmente, de la integral de Fourier se deriva una de las transformadas integrales, un tipo especial de transformación de una función en otra mediante el uso de integrales y un núcleo de dos variables, más importantes y útiles en la solución de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, la **transformada de Fourier**, denotada por  $\mathcal{F}$  y cuya expresión es

$$\mathcal{F}[f(x)] = \mathcal{F}(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha x} f(x) d(x)$$

donde  $f(x)$  es una función integrable como integral de Lebesgue, no como integral de Riemann, y el término  $e^{i\alpha x}$  es el núcleo o kernel de la transformada.

La **función inversa de la transformada de Fourier**, muy útil para solucionar ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, se expresa como

$$\mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}(\alpha)] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\alpha x} \mathcal{F}(\alpha) d(\alpha)$$

Es importante puntualizar que, por la similitud matemática en la descripción de los fenómenos de conducción del calor y la difusión química, la transformada de Fourier y su inversa tienen una gran aplicación en la modelización de fenómenos de transporte difusivo, y en otras áreas de la mecánica de fluidos y los modelos de calidad del agua.

Además, si el contaminante transportado en el agua no es conservativo, y desaparece según una cinética de primer orden, entonces, de manera similar, añadiendo el término de sumidero del contaminante  $S_m = -kC$  a la ecuación [2.34], se puede demostrar que

$$\therefore C(x, t) = \frac{M e^{-kt}}{A \sqrt{4\pi D_x t}} e^{-\frac{(x-vt)^2}{4D_x t}} \quad \text{Ec. [2.58]}$$

### Ejercicio 2.1

Un accidente industrial produce el derrame instantáneo de 50 kg de un contaminante conservativo en un río de 30 m de ancho y 2 m de profundidad media (sección rectangular) que fluye a razón de 3 m<sup>3</sup>/s. Si el coeficiente de difusión en el sentido de la corriente es igual a 2 m<sup>2</sup>/s, determine (a) la concentración máxima del contaminante que se alcanzará a una distancia de 900 m, donde se localiza una toma de captación de agua para suministro de una población rural cercana; (b) el tiempo que debe transcurrir para que la concentración del contaminante en la toma no supere más el estándar ambiental de 1 mg/l; (c) grafique la variación temporal de la concentración del contaminante a la velocidad del río supuesta constante.

Solución:

Antes de la aplicación de la ecuación [2.55] se requiere calcular la velocidad de la corriente del río y el área de la sección transversal a través de la cual se supone la mezcla instantánea del contaminante derramado

$$A = w \cdot h = (30 \text{ m})(2 \text{ m}) = 60 \text{ m}^2$$

$$v = \frac{Q}{A} = \frac{3 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}}{60 \text{ m}^2} = 0,05 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

(a) Luego, la concentración máxima que ocurrirá en el punto donde se localiza la toma de agua se calcula haciendo que el exponente del factor exponencial de la ecuación [2.54] sea cero, lo que se consigue igualando el producto de  $vt$  con la distancia  $x$ , obteniéndose así el tiempo al cabo del cual se alcanzará tal concentración a la distancia indicada:

$$x = vt \rightarrow t_m = \frac{x}{v} = \frac{900 \text{ m}}{0,05 \frac{\text{m}}{\text{s}}} = 18000 \text{ s} = 5 \text{ h}$$

$$C(900, t_m) = \frac{50 \text{ kg} \left( \frac{10^6 \text{ mg}}{1 \text{ kg}} \right)}{60 \text{ m}^2 \sqrt{4\pi \left( 2 \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right) (18000 \text{ s})} \left( \frac{10^3 \text{ l}}{1 \text{ m}^3} \right)} = 1,24 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

(b) El tiempo al cabo del cual la concentración del contaminante dejará de ser peligrosa en el punto de ubicación de la toma de agua se calcula empleando el método de iteración de punto fijo, a partir de la ecuación implícita para el tiempo:

$$t = \frac{x \pm \sqrt{4D_x t \ln \left[ \frac{M}{AC \sqrt{4\pi D_x t}} \right]}}{v}$$

Tal como se observa en la tabla de resultados correspondiente (página siguiente) la convergencia determina un tiempo igual a 21031 s o 5,84 h. Por lo tanto, se deberá esperar 5 h y 50 min para que la captación de agua desde el río sea segura para el suministro a la población rural.

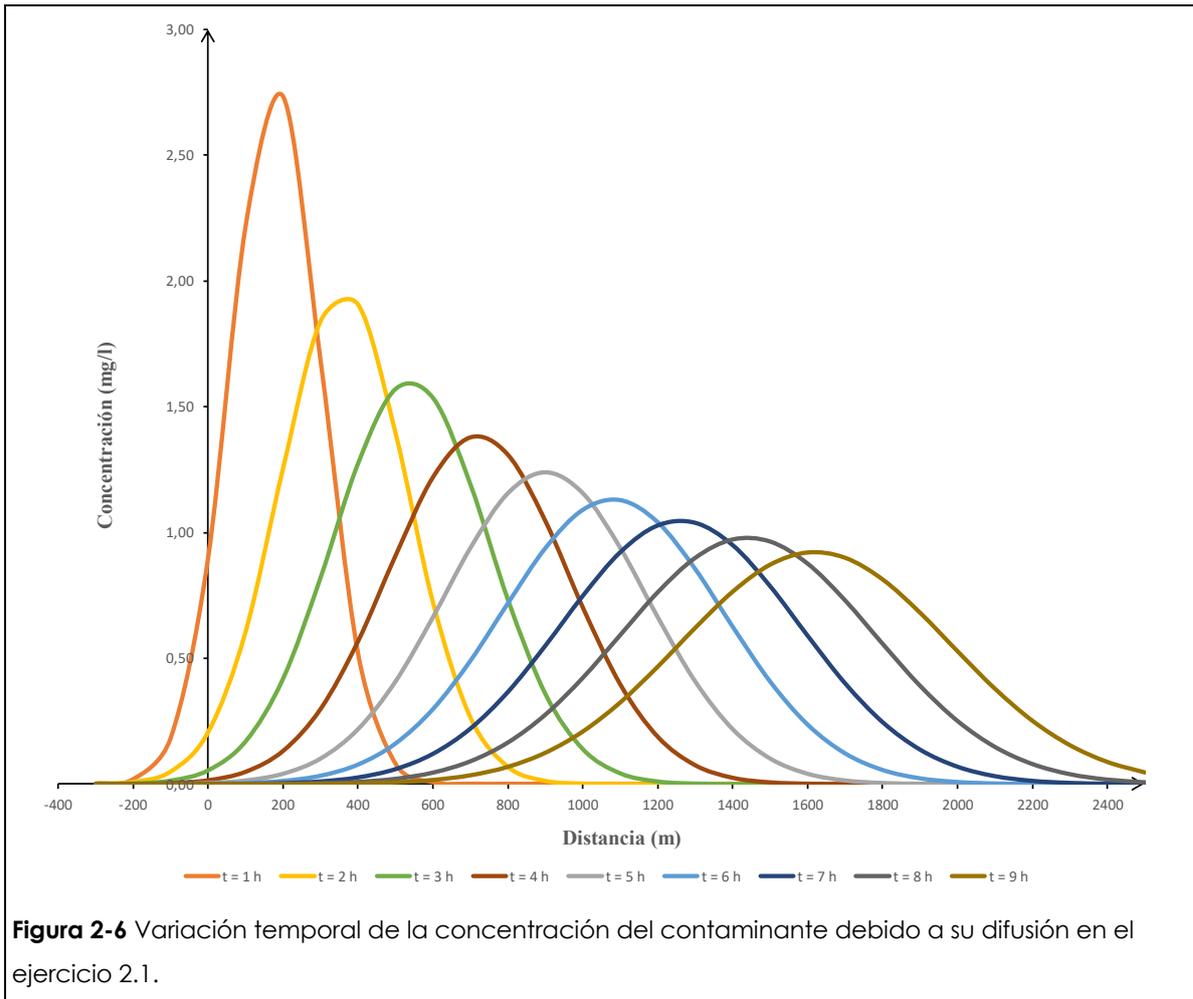
Iteración	$t_i$	Lado derecho	Error relativo
1	18000	21513	19,518
2	21513	20935	2,687
3	20935	21049	0,544
4	21049	21027	0,103
5	21027	21031	0,020
6	21031	21031	0,004
7	21031	21031	0,001
8	21031	21031	0,000
9	21031	21031	0,000
10	21031	21031	0,000

(c) La concentración del contaminante conservativo en función de la distancia y el tiempo experimenta una variación normal, luego de aplicar para distintas distancias y tiempos la ecuación [2.55], cuyos resultados se resumen en la tabla siguiente:

t (h)	x (m)																		
	-300	-200	-100	0	100	200	300	400	500	600	700	800	900	1000	1100	1200	1300	1400	1500
0,5	0,00	0,01	0,32	2,23	3,89	1,69	0,18	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
1,0	0,00	0,02	0,18	0,90	2,22	2,73	1,68	0,52	0,08	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
1,5	0,00	0,01	0,10	0,42	1,16	2,02	2,22	1,53	0,66	0,18	0,03	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
2,0	0,00	0,01	0,05	0,21	0,61	1,26	1,84	1,91	1,39	0,72	0,26	0,07	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
2,5	0,00	0,00	0,03	0,11	0,32	0,74	1,28	1,69	1,69	1,28	0,74	0,32	0,11	0,03	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
3,0	0,00	0,00	0,01	0,05	0,17	0,42	0,82	1,27	1,57	1,53	1,19	0,73	0,36	0,14	0,04	0,01	0,00	0,00	0,00
3,5	0,00	0,00	0,01	0,03	0,09	0,24	0,50	0,88	1,25	1,47	1,41	1,11	0,72	0,38	0,17	0,06	0,02	0,00	0,00
4,0	0,00	0,00	0,00	0,02	0,05	0,13	0,30	0,57	0,91	1,22	1,38	1,31	1,05	0,70	0,40	0,19	0,07	0,03	0,01
4,5	0,00	0,00	0,00	0,01	0,03	0,07	0,18	0,36	0,62	0,93	1,19	1,30	1,23	0,99	0,68	0,40	0,20	0,09	0,03
5,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,04	0,10	0,22	0,41	0,66	0,94	1,16	1,24	1,16	0,94	0,66	0,41	0,22	0,10
5,5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,06	0,13	0,26	0,45	0,69	0,94	1,12	1,18	1,09	0,89	0,64	0,41	0,23
6,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,03	0,08	0,16	0,30	0,49	0,72	0,94	1,09	1,13	1,04	0,85	0,63	0,41
6,5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,05	0,10	0,19	0,33	0,52	0,74	0,93	1,06	1,08	0,99	0,82	0,61
7,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,03	0,06	0,12	0,22	0,37	0,55	0,75	0,92	1,03	1,04	0,95	0,79
7,5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,04	0,07	0,14	0,25	0,40	0,57	0,76	0,91	1,00	1,00	0,91
8,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,05	0,09	0,17	0,28	0,42	0,59	0,76	0,90	0,97	0,96
8,5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,03	0,06	0,11	0,19	0,30	0,45	0,61	0,77	0,89	0,95
9,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,04	0,07	0,12	0,21	0,33	0,47	0,62	0,77	0,87
9,5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,04	0,08	0,14	0,23	0,35	0,49	0,63	0,77
10,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,03	0,05	0,09	0,16	0,25	0,37	0,50	0,64
11,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,04	0,07	0,12	0,19	0,29	0,40
12,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,03	0,06	0,09	0,15	0,23
13,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,02	0,04	0,07	0,12
14,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,02	0,03	0,06	0,10
15,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,03	0,05
16,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	0,02
17,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01
18,0	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

El gráfico resultante, mostrado en la siguiente página, se compone de una serie de curvas acampanadas para cada uno de los tiempos mostrados, que revelan el hecho de que, a

medida que se incrementa el tiempo desde el momento del derrame, la concentración máxima se desplaza hacia distancia cada vez más lejanas del origen:



**Figura 2-6** Variación temporal de la concentración del contaminante debido a su difusión en el ejercicio 2.1.

### Ejercicio 2.2

Considere la situación planteada en el ejercicio 2.1, pero suponga ahora que la sustancia contaminante derramada es no conservativa. Determine (a) la concentración máxima del contaminante en la toma de captación de agua; (b) el valor que debería tener la constante de reacción para que la concentración máxima del contaminante coincida con su estándar ambiental de 1 mg/l en la captación.

Solución:

(a) Debido a la reacción de primer orden que experimenta el contaminante, su concentración máxima a los 900 m ahora es un poco menor; de hecho, a medida que el valor de la constante de reacción aumenta, el valor de la concentración máxima disminuye proporcionalmente:

$$C(900, t_m) = \frac{50 \text{ kg} \left( \frac{10^6 \text{ mg}}{1 \text{ kg}} \right) e^{-(0,23 \text{ d}^{-1})(18000 \text{ s}) \left( \frac{1 \text{ d}}{86400 \text{ s}} \right)}}{60 \text{ m}^2 \sqrt{4\pi \left( 2 \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right) (18000 \text{ s}) \left( \frac{10^3 \text{ l}}{1 \text{ m}^3} \right)}} = 1,18 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

(b) Despejando la variable  $k$  en la ecuación [2.55], se obtiene la tasa a la que debería eliminarse el contaminante no conservativo para que su concentración máxima iguale la de su estándar ambiental:

$$k = \frac{1}{t} \ln \left[ \frac{M e^{-\frac{(x-vt)^2}{4D_x t}}}{CA \sqrt{4\pi D_x t}} \right] = \frac{1}{5h \left( \frac{1 d}{24 h} \right)} \ln \left\{ \frac{(50 kg) e^{-\frac{[900 m - (0,05 \frac{m}{s})(18000 s)]^2}}{4 \left( 2 \frac{m^2}{s} \right) (18000 s)}}{\left( 1,00 \frac{mg}{l} \right) (60 m^2) \sqrt{4\pi \left( 2 \frac{m^2}{s} \right) (18000 s)}} \right\}$$

$$\therefore k = 1,03 d^{-1}$$

### 2.2.1.2 Difusión en dos dimensiones

Cuando el transporte difusivo se realiza en dos dimensiones, se entiende que la sustancia liberada en el agua está uniformemente mezclada en una sola dirección espacial, generalmente vertical (eje z), y que el transporte de la sustancia (mezcla difusiva) ocurrirá sólo en las dos direcciones del plano xy. Así, la ecuación de difusión anisotrópica para una sustancia conservativa se expresa como una simplificación de la ecuación [2.30], eliminando el término correspondiente a la advección y también las fuentes o sumideros:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) + D_y \left( \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad \text{Ec. [2.59]}$$

Su solución para una fuente lineal instantánea requiere condiciones iniciales y de frontera similares a las impuestas para el caso anterior pero ampliado a dos dimensiones, incluyendo una variable Z, que representa la longitud (profundidad) de la fuente puntual a lo largo de la cual la masa M de la sustancia contaminante está uniformemente mezclada, y el uso de  $\delta(x, y)$ , que es la función delta de Dirac bidimensional. Así, bajo las condiciones indicadas, la solución de la ecuación de difusión anisotrópica bidimensional para una sustancia conservativa es

$$C(x, y, t) = \frac{M}{4\pi Z t \sqrt{D_x D_y}} e^{\left( -\frac{x^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t} \right)} \quad \text{Ec. [2.60]}$$

Es preciso puntualizar que la ecuación de difusión de dos dimensiones permite resolver un mayor número de problemas de vertidos o derrames en el agua, debido a que la ecuación unidimensional está restringida, por ejemplo, a corrientes de cauce muy largo pero angosto, y a estimaciones

de la concentración del contaminante a grandes distancias de la fuente de emisión.

Asimismo, si el contaminante fuese una sustancia no conservativa que se degrada mediante una cinética de primer orden, la ecuación [2.60] se ampliaría a

$$C(x, y, t) = \frac{M e^{-kt}}{4\pi Z t \sqrt{D_x D_y}} e^{\left(-\frac{x^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t}\right)} \quad \text{Ec. [2.61]}$$

### 2.2.1.3 Difusión en tres dimensiones

La ecuación de difusión en tres dimensiones para una sustancia conservativa emitida por una fuente puntual se obtiene eliminando los términos advección y fuentes/sumideros de la ecuación [2.30]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) + D_y \left( \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) + D_z \left( \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad \text{Ec. [2.62]}$$

Su solución fundamental obtenida a partir de condiciones iniciales y de frontera similares a los casos anteriores, pero ampliadas al espacio tridimensional, es

$$C(x, y, z, t) = \frac{M}{\sqrt{(4\pi t)^3} \sqrt{D_x D_y D_z}} e^{\left(-\frac{x^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t} - \frac{z^2}{4D_z t}\right)} \quad \text{Ec. [2.63]}$$

Asimismo, si el contaminante fuese una sustancia no conservativa que se degrada mediante una cinética de primer orden, la ecuación [2.63] se ampliaría a

$$C(x, y, z, t) = \frac{M e^{-kt}}{\sqrt{(4\pi t)^3} \sqrt{D_x D_y D_z}} e^{\left(-\frac{x^2}{4D_x t} - \frac{y^2}{4D_y t} - \frac{z^2}{4D_z t}\right)} \quad \text{Ec. [2.64]}$$

### 2.2.2 Dispersión longitudinal

La dispersión longitudinal, que suele ser importante en ríos y arroyos, se expresa a partir de la ecuación [2.65], considerando un flujo unidimensional (el sentido de la corriente), una velocidad  $v_x$  constante en el espacio y el tiempo, y el cambio del coeficiente de difusión por el de dispersión longitudinal  $K_L$ ; de modo que,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v_x \frac{\partial C}{\partial x} = K_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + S_m \quad \text{Ec. [2.65]}$$

Aunque las estimaciones del  $K_L$  hechas en campo mediante el uso de trazadores constituyen el método más exacto para su determinación (Chin, 2013), su aplicación suele exigir grandes gastos en planificación, personal técnico y análisis posterior, debiendo tenerse en cuenta, además, que los resultados tendrán validez solo si las condiciones de flujo se mantuvieran muy similares a las existentes en la corriente en el momento en que se realizara la medición (Díaz Lozada *et al.*, 2015). En este contexto, diversos autores han propuesto fórmulas empíricas para la determinación de  $K_L$ , y aunque también adolecen de ser aplicables solo a las condiciones para las cuales se ajustaron, representan un método más práctico y sencillo. La expresión general de tales ecuaciones empíricas es

$$\frac{K_L}{\bar{h}u} = a \left( \frac{v}{u} \right)^b \left( \frac{w}{\bar{h}} \right)^c \quad \text{Ec. [2.66]}$$

donde,  $\bar{h}$  es la profundidad media de la corriente,  $u$  es una velocidad de corte (o velocidad de estiramiento dispersivo de la nube de contaminantes que se dispersa en el agua),  $v$  es velocidad promedio del flujo longitudinal de la corriente; y  $a$ ,  $b$  y  $c$  son parámetros de calibración. Algunas de las ecuaciones empíricas más comúnmente utilizadas para la estimación de  $K_L$  son:

$$\text{Liu (1977)} \quad \frac{K_L}{\bar{h}u} = 0,18 \left(\frac{v}{u}\right)^{0,5} \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^2 \quad \text{Ec. [2.67]}$$

$$\text{Fischer et al. (1979)} \quad \frac{K_L}{\bar{h}u} = 0,011 \left(\frac{v}{u}\right)^2 \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^2 \quad \text{Ec. [2.68]}$$

$$\text{Iwasa y Aya (1991)} \quad \frac{K_L}{\bar{h}u} = 2,0 \left(\frac{v}{u}\right)^0 \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^{1,5} = 2,0 \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^{1,5} \quad \text{Ec. [2.69]}$$

$$\text{Seo y Cheong (1998)} \quad \frac{K_L}{\bar{h}u} = 5,92 \left(\frac{v}{u}\right)^{1,43} \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^{0,62} \quad \text{Ec. [2.70]}$$

$$\text{Koussis y Rodríguez-Mirasol (1998)} \quad \frac{K_L}{\bar{h}u} = 0,6 \left(\frac{v}{u}\right)^0 \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^2 = 0,6 \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^2 \quad \text{Ec. [2.71]}$$

$$\text{Li, Huang y Li (1998)} \quad \frac{K_L}{\bar{h}u} = 0,2 \left(\frac{v}{u}\right)^{1,2} \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^{1,3} \quad \text{Ec. [2.72]}$$

### Ejercicio 2.3

Un río de 20 m de ancho tiene una sección recta promedio de 30 m<sup>2</sup>. La velocidad promedio de flujo se estimó luego de hacer mediciones puntuales de velocidad a lo ancho de su sección media cada cierta distancia (por ejemplo, cada metro), resultando, luego del cálculo respectivo, un valor de 0,75 m/s. Si se asume que la velocidad de corte es igual a 0,05 m/s, estime el valor del coeficiente de dispersión longitudinal utilizando las ecuaciones empíricas más comúnmente utilizadas.

Solución:

En primer lugar, se debe calcular la profundidad media  $\bar{h}$  tal como sigue:

$$\bar{h} = \frac{A}{w} = \frac{30 \text{ m}^2}{20 \text{ m}} = 1,5 \text{ m}$$

Luego, se despeja  $K_L$  de las ecuaciones [2.67] a [2.72] y se sustituyen los valores promedios de sección y velocidad de flujo en las expresiones resultantes para obtener su valor correspondiente:

$$\text{Liu (1977)} \quad K_L = 0,18 \left(\frac{v}{u}\right)^{0,5} \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^2 \bar{h}u = 0,18 \left(\frac{0,75 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{0,05 \frac{\text{m}}{\text{s}}}\right)^{0,5} \left(\frac{20 \text{ m}}{1,5 \text{ m}}\right)^2 (1,5 \text{ m}) \left(0,05 \frac{\text{m}}{\text{s}}\right) = 9,3 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

$$\text{Fischer et al. (1979)} \quad K_L = 0,011 \left(\frac{v}{u}\right)^2 \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^2 \bar{h}u = 0,011 \left(\frac{0,75 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{0,05 \frac{\text{m}}{\text{s}}}\right)^2 \left(\frac{20 \text{ m}}{1,5 \text{ m}}\right)^2 (1,5 \text{ m}) \left(0,05 \frac{\text{m}}{\text{s}}\right) = 33 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

$$\text{Iwasa y Aya (1991)} \quad K_L = 2,0 \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^{1,5} \bar{h}u = 7,3 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

$$\text{Seo y Cheong (1998)} \quad K_L = 5,92 \left(\frac{v}{u}\right)^{1,43} \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^{0,62} \bar{h}u = 106,3 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

$$\text{Koussis y Rodríguez – Mirasol (1998)} \quad K_L = 0,6 \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^2 \bar{h}u = 8 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

$$\text{Li, Huang y Li (1998)} \quad K_L = 0,2 \left(\frac{v}{u}\right)^{1,2} \left(\frac{w}{\bar{h}}\right)^{1,3} \bar{h}u = 11,2 \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

### Problemas propuestos

2.1 Un accidente industrial produce el derrame instantáneo de 25 kg de un contaminante no conservativo en un arroyo de 8 m de ancho, 1 m de profundidad media (sección rectangular), pendientes laterales de 2:1, y que fluye a razón de 1,2 m<sup>3</sup>/s. Si el coeficiente de difusión en el sentido de la corriente es igual a 2,5 m<sup>2</sup>/s, determine (a) el valor de la constante de reacción de modo que la concentración máxima del contaminante que se alcanzará a una distancia de 1500 m tenga un valor de 4,63 mg/l; (b) el tiempo que debe transcurrir para que la concentración del contaminante en la toma no supere más el estándar ambiental de 1 mg/l.

2.2 Investigue la deducción de la ecuación de difusión bidimensional.

2.3 Investigue la deducción de la ecuación de difusión tridimensional.

2.4 Demuestre que la velocidad de corte se puede calcular en función de un factor de fricción  $f$  y la velocidad longitudinal de la corriente  $v$ , mediante la expresión  $u = \sqrt{\frac{f}{8}} v$ .

2.5 Un estudio de la calidad del agua en un arroyo de 8 m de ancho comprendió la medición de profundidades y velocidades medias a intervalos de 1 m de una orilla a otra. Si los resultados obtenidos son los mostrados en la tabla adjunta, estime el coeficiente de dispersión longitudinal característico de la corriente utilizando las seis ecuaciones empíricas presentadas en la sección 2.2.2. Suponga, además, que el factor de fricción tiene un valor de 0,04.

y (m)	0	1	2	3	4	5	6	7	8
h (m)	0,0	0,3	0,5	0,9	1,2	1,0	0,7	0,4	0,0
v (m/s)	0,0	0,4	0,5	0,7	1,0	0,8	0,6	0,4	0,0

## Referencias

Chin, D. A. (2013) *Water-quality engineering in natural systems: fate and transport processes in the water environment*. 2nd edn. Hoboken, New Jersey: Wiley.

Córdoba, A. (2016) 'Fourier y el estudio profundo de la naturaleza', *El País*, 16 May. Available at: [https://elpais.com/elpais/2016/05/16/ciencia/1463393205\\_032883.html](https://elpais.com/elpais/2016/05/16/ciencia/1463393205_032883.html).

Díaz Lozada, J. M. *et al.* (2015) 'Estimación del coeficiente de dispersión longitudinal en ríos de la región central de Argentina utilizando ADCP', *Ribagua*, 2(1), pp. 26–37.

Fick, A. (1855) 'V. On liquid diffusion', *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 10(63), pp. 30–39.

Fischer, H. B. *et al.* (1979) *Mixing in Inland and Coastal Waters*, *Mixing in Inland and Coastal Waters*. New York: Academic Press.

Herivel, J. (1975) *Joseph Fourier: the man and the physicist*. London: Clarendon Press.

Iwasa, Y. and Aya, S. (1991) 'Predicting longitudinal dispersion coefficient in open channel flows', in *Proceedings of the International Symposium of Environmental Hydraulics*, pp. 505–510.

Ji, Z. G. (2017) *Hydrodynamics and water quality: Modeling rivers, lakes, and estuaries*. 2nd edn, *Hydrodynamics and Water Quality: Modeling Rivers, Lakes, and Estuaries*. 2nd edn. Edited by Wiley. Hoboken, New Jersey.

Katz, V. J. (1979) 'The History of Stokes' Theorem', *Mathematics Magazine*, 52(3), pp. 146–156.

Koussis, A. D. and Rodríguez-Mirasol, J. (1998) 'Hydraulic estimation of dispersion coefficient for streams', *Journal of Hydraulic Engineering*, 124(3),

pp. 317–320.

Li, Z. H., Huang, J. and Li, J. (1998) 'Preliminary study on longitudinal dispersion coefficient for the gorges reservoir', in *Proceedings of the seventh international symposium environmental hydraulics*. Hong Kong, China, pp. 16–18.

Liu, H. (1977) 'Predicting dispersion coefficient of streams', *Journal of the Environmental Engineering Division, ASCE*, 103(1), pp. 59–69.

Mehrer, H. and Stolwijk, N. (2009) 'Heroes and highlights in the history of diffusion', *Diffusion Fundamentals*, 11(1), pp. 1–32.

Nirmalakhandan, N. (2002) *Modeling tools for environmental engineers and scientists*, *Modeling Tools for Environmental Engineers and Scientists*. Edited by C. Press. Boca Raton, Florida.

Purcell, E. J., Rigdon, S. E. and Varberg, D. E. (2007) *Cálculo*. 9th edn. México: Pearson Educación.

Seo, I. W. and Cheong, T. S. (1998) 'Predicting longitudinal dispersion coefficient in natural streams', *Journal of Hydraulic Engineering*, 24(1), pp. 25–32.

Shapiro, E. (1972) 'Adolf Fick-Forgotten genius of cardiology', *The American Journal of Cardiology*, 30(6), pp. 662–665.

Zill, D. G. and Wright, W. S. (2015) *Ecuaciones diferenciales con problemas con valores en la frontera*. 8th edn, *Ecuaciones diferenciales*. 8th edn. Cengage Learning.

# Capítulo 3. MODELIZACIÓN DE LA CALIDAD DEL AGUA SUPERFICIAL

## 3.1 Introducción

El núcleo del manejo de la calidad del agua se encuentra en la relación entre la descarga de aguas residuales en cuerpos naturales de agua y la consecuente alteración de la calidad de tales sistemas receptores. Esta relación ha sido, desde hace décadas, una de las más relevantes preocupaciones científicas de múltiples profesionales alrededor del mundo, principalmente ingenieros ambientales y sanitarios, debido a que los ríos, arroyos, estuarios, lagos, entre otros sistemas de agua dulce, constituyen fuentes de abastecimiento de agua para las poblaciones humanas, y para la satisfacción de necesidades humanas de desarrollo como la agricultura y la industria. Además, el agua, en todos sus ecosistemas existentes en la Tierra, es soporte de vida, y su adecuada calidad garantiza el equilibrio.

Lo anterior resume el gran desafío que implica enfrentarse a esta problemática ambiental. Sin embargo, entre todas las formas de abordarla, la

### Historia complementaria

El manantial de los modelos matemáticos de calidad del agua brotará siempre de las entrañas cognitivas de Harold Warner Streeter y Earle Bernard Phelps.

Streeter, nacido un 22 de junio de 1884 y fallecido el 7 de agosto de 1961, a los 77 años, fue un ingeniero sanitario y coronel que trabajaba para el Servicio de Salud Pública de los Estados Unidos (USPHS, por sus siglas en inglés), una dependencia del Departamento de Salud y Servicios Humanos. Su contribución en el campo de la contaminación del agua fue reconocida mediante la medalla Charles Elvin Emerson, galardón que le fue concedido en el año 1945, por la Water Pollution Control Federation (WPCF), de la cual Streeter fue miembro honorario en 1941 (WPCF, 1981). Su nombre fue inmortalizado en un buque de investigación construido en 1962 por orden de la Administración Nacional Atmosférica y Oceánica (NOAA, por sus siglas en inglés), el Harold W. Streeter NOAA-F450I (NWFSO, 1998).

Su compañero de fórmula, Phelps, un químico y experto en temas sanitarios, nació el 10 de julio de 1876 en Galesburg, Illinois, y falleció el 29 de mayo de 1953 en Gainesville, Florida, a los 76 años. Phelps tuvo una amplia participación y experiencia en actividades relacionadas con los servicios sanitarios desde su graduación como Licenciado en Ciencias Químicas por el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT, por sus siglas en inglés) en 1899. Los hilos del destino hicieron que Phelps, años después, se convirtiera en el director de la división química del Laboratorio de Higiene de los Estados Unidos, con sede en Washington D.C., estamento dependiente del USPHS. Phelps fue galardonado en 1953 por su contribución en el campo de la salud pública y saneamiento, con el premio Albert Lasker, creado en 1945. Su nombre quedó honrado en los edificios de laboratorios de la Universidad de Florida (APHA, 1954).

Juntos, en 1925, con la publicación del Boletín 146, sentaron las bases matemáticas para la evaluación de la capacidad de autodepuración de las corrientes en el contexto del agotamiento del oxígeno.

modelización matemática es una herramienta muy práctica, aunque requiere la integración de muchas disciplinas, pues depende de la hidrología y la hidrodinámica para describir el movimiento del agua y los mecanismos de mezcla; de la climatología y la meteorología para especificar condiciones en la interfaz aire-agua; de la cinética química y la bioquímica para determinar el destino de los contaminantes; de la biología y ecología para el estudio de las diferentes formas de vida que albergan los ecosistemas acuáticos y su interrelación con el entorno. Así, hoy en día se reconoce a los modelos matemáticos cada vez más como elementos necesarios en la gestión ambiental y de recursos (Orlob, 1983).

Un modelo puede entenderse como una expresión matemática propuesta para representar el comportamiento de un determinado fenómeno, proceso o sistema real, bajo ciertas condiciones o supuestos que simplifiquen adecuadamente la realidad (Pazmiño Rodríguez *et al.*, 2018). Las dos razones principales para realizar la modelización de sistemas acuáticos son (1) comprender mejor los procesos físicos, químicos y biológicos y (2) desarrollar modelos capaces de representar de manera realista las aguas superficiales, de modo que los modelos puedan usarse para apoyar la gestión de la calidad del agua y la toma de decisiones (Ji, 2017). En el contexto de la modelización de la calidad del agua, la historia recoge el trabajo pionero de dos profesionales norteamericanos, empleados del Servicio de Salud Pública de los Estados Unidos (USPHS, por sus siglas en inglés), los ingenieros Harold Streeter y Earle Phelps, quienes durante los años 1914 y 1915 realizaron una investigación exhaustiva de la contaminación y purificación natural del río Ohio, bajo la supervisión del Dr. Wade Hampton Frost, un epidemiólogo que trabajó para el USPHS, desde 1903 hasta 1929. Estos estudios se realizaron en la Estación de campo Cincinnati del USPHS, una de las varias que se establecieron en aquel tiempo para estudiar la contaminación de las corrientes naturales. Así, en 1925 se publicó una teoría general de la purificación de las corrientes naturales basada en el examen de los procesos de oxidación en el río

Ohio, cuya formulación matemática se conoce hasta la actualidad como el modelo de Streeter-Phelps, o curva sag del oxígeno disuelto, que representó el primer modelo cuantitativo disponible para analizar los cambios en la calidad del agua (Streeter y Phelps, 1925; Lilienfeld, 1983; Tarr, 1985).

Sea como sea que se aborde el problema de la calidad del agua: observación, análisis teórico o modelización matemática (Ji, 2017), se necesitará medir y tener en consideración parámetros físicos, químicos y biológicos, que permitan disponer de información cuantitativa y confiable para evaluar la calidad de las aguas. Tales parámetros son, principalmente para fines de este libro: el oxígeno disuelto, la temperatura, la DBO y el nitrógeno.

### **3.2 Fuentes y sumideros del oxígeno disuelto**

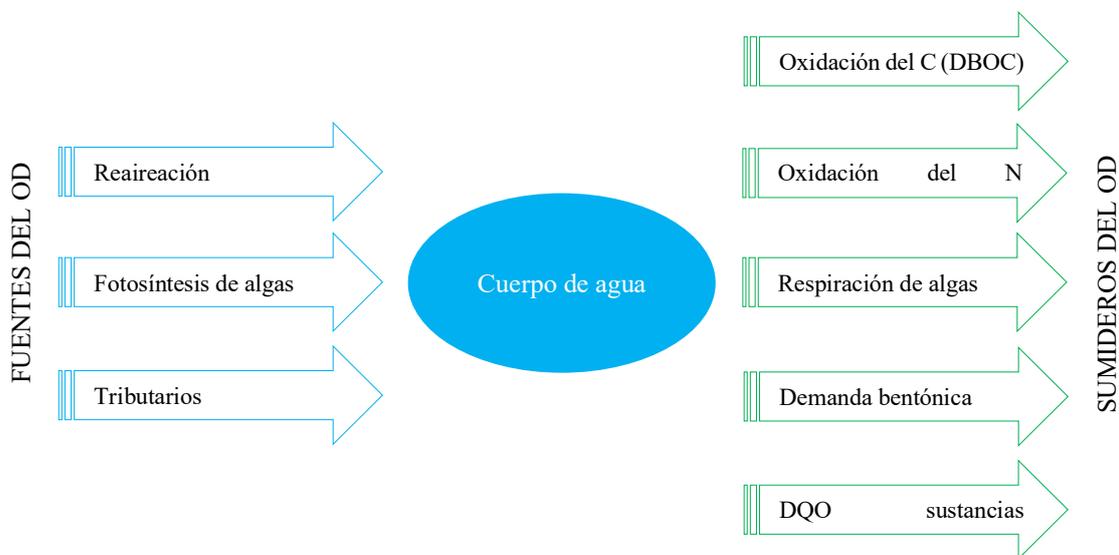
Los ríos tienen una capacidad limitada de eliminar la contaminación vertida en su cauce, denominada autodepuración, básicamente debido al trabajo degradador que realizan las bacterias presentes en el agua sobre la materia orgánica putrescible o biodegradable de los vertidos. Además, si esta capacidad de autodepuración es superada, entonces el río empezará a presentar signos de contaminación, principalmente turbidez y malos olores. En este sentido, la concentración de oxígeno disuelto es el indicador general de contaminación utilizado para evaluar el proceso de autodepuración de los ríos (Gil, 2006).

El balance de oxígeno en el agua se establece en términos de fuentes y sumideros o consumidores. Las fuentes y sumideros se deben entender como los procesos o mecanismos mediante los cuales el oxígeno ingresa o se elimina del oxígeno de la corriente, respectivamente. Así, si el aporte de las fuentes de oxígeno disuelto es menor que la cantidad extraída por los sumideros, entonces se tendrá un déficit de oxígeno en el cuerpo de agua. Más específicamente, el déficit de oxígeno disuelto es la diferencia entre la

concentración de oxígeno disuelto de saturación y la concentración existente en el cuerpo de agua (Ji, 2017).

Las principales fuentes de oxígeno disuelto: (1) la reaireación, que ocurre desde la atmósfera en proporción directa con el déficit de oxígeno disuelto en el cuerpo de agua; (2) la fotosíntesis de las plantas acuáticas, las cuales con adecuadas cantidades de luz solar, consumen nutrientes del agua y producen oxígeno, pudiendo ocurrir incluso condiciones de sobresaturación de oxígeno disuelto cuando las tasas de la fotosíntesis son muy altas, por ejemplo durante un incremento excesivo de algas (Ji, 2017). Adicionalmente, (3) el aporte de oxígeno disuelto a una corriente puede provenir desde sus tributarios (Sierra, 2011).

Por otra parte, los principales sumideros de oxígeno disuelto son: (1) la oxidación de la materia orgánica carbonosa, (2) la oxidación de la materia orgánica nitrogenada o nitrificación, (3) la respiración de las algas, (4) la demanda de oxígeno bentónica, producto del consumo de oxígeno ejercido por el material depositado en el lecho del cuerpo de agua, y (5) la demanda química de oxígeno producto de sustancias reducidas que se liberan desde el fondo de sedimentos (Ji, 2017).



**Figura 3-1** Fuentes y sumideros que determinan el balance del oxígeno disuelto en cuerpos de agua superficial.

Los niveles de oxígeno disuelto en el agua tienen repercusiones directas sobre el equilibrio ecosistémico, principalmente en lo relacionado con la capacidad de albergar vida acuática. En este contexto, los expertos consideran que concentraciones de oxígeno disuelto superiores a 5 mg/l son aceptables para la mayoría de las especies acuáticas, mientras que niveles inferiores a 3 mg/l producen hipoxia, una condición de bajo oxígeno disponible que provoca la migración de peces y otras especies móviles, la alteración de los ensamblajes bióticos y la biogeoquímica de los ecosistemas acuáticos, la reducción de la biodiversidad y productividad de lagos y corrientes; incluso la muerte por asfixia de los animales residentes del ecosistema cuando el oxígeno cae por debajo de 1 mg/l. En condiciones extremas, el agotamiento del oxígeno disuelto en el agua, denominado anoxia, crea zonas muertas, donde ningún proceso aerobio es posible (Jørgensen, 2009). No obstante, algunos autores como (Padilla, 2011) diferencian entre hipoxia de agua dulce para niveles inferiores a 5 mg/l, e hipoxia en ambientes marinos y costeros (estuarios) para niveles de oxígeno inferiores a 2-3 mg/l.

### 3.3 Demanda bioquímica de oxígeno (DBO)

#### Historia complementaria

La relación entre la remoción del oxígeno en el agua contaminada como consecuencia de la actividad metabólica de las bacterias aerobias sobre las sustancias biodegradables presentes en ella recién empezó a ser considerada y entendida hacia los inicios de la segunda década del siglo XX, con la publicación en el año 1912 del octavo reporte de la *Royal Commission on Sewage Disposal*, establecida en 1898, que introdujo el concepto de DBO y propuso, entre otros, el ensayo de DBO, replicado por otros países y vigente hasta la actualidad, constituyéndose en un hito en la historia de la gestión de las aguas residuales y las ciencias ambientales en general. Así empezó la época de los estándares ambientales estrictos (Orozco, 2005; Lofrano y Brown, 2010).

La *Royal Commission on Sewage Disposal*, recomendó el reemplazo del antiguo método del valor del permanganato por el ensayo de DBO, por aquel entonces denominado "Dissolved Oxygen Absorption Test", el cual se debía realizar a una temperatura de 65°F (18°C) por el hecho de que esa era la temperatura máxima de los ríos durante el mes más caliente en Reino Unido. Además, debido a que se suponía que el tiempo de viaje del agua que fluía en los ríos de Inglaterra, desde su nacimiento hasta su desembocadura en el mar, era máximo cinco días, tiempo después el ensayo pasó a denominarse de manera estándar como DBO<sub>5</sub>, aunque en la actualidad se realiza a una temperatura estándar de 20°C. Estos antecedentes confirman la magnitud del hito fijado por el octavo reporte de la *Royal Commission on Sewage Disposal*, denominado *Standards and tests for sewage and sewage effluent discharging to rivers and streams* (Calvert, 1898), el cual se considera contiene los aportes más famosos e importantes, de todos los diez reportes que presentó la referida comisión británica, siendo uno de ellos también el famoso estándar 20:30, que estableció un estándar de 20 mg de DBO por litro y de 30 mg de sólidos suspendidos por litro para las descargas de efluentes desde las instalaciones de tratamiento de aguas residuales (Johnstone y Horan, 1996; Cooper, 2001).

#### 3.3.1 Contexto e introducción

La presencia de materia orgánica en aguas residuales domésticas e industriales es la responsable de la reducción de los niveles de oxígeno en el cuerpo de agua receptor y del impacto sobre la vida acuática, incluso de hacerla inadecuada para consumo humano por la proliferación de microorganismos patógenos que suelen contener. La materia orgánica se compone de al menos 90% de proteínas y carbohidratos, provenientes de las heces y orina de los seres humanos, de los residuos alimenticios que escapan por los lavaplatos, y de cualquier otro tipo de suciedad orgánica procedente de los baños y lavadoras, incluyendo el uso de jabones y detergentes. Esta materia orgánica se denomina biodegradable (Henry y Heinke, 1999; Mihelcic y Zimmerman, 2012; Chin, 2013).

La mayoría de los métodos para determinar la materia orgánica en

aguas lo hacen de manera indirecta, basándose en la cantidad de oxígeno necesario para convertir el material biodegradable en productos finales estables, tales como  $\text{CO}_2$  y  $\text{H}_2\text{O}$ . Así, siendo el oxígeno consumido por los microorganismos, proporcional a la materia degradable aeróbicamente, la DBO constituye el parámetro más importante en el control de la contaminación orgánica del agua (Henry y Heinke, 1999).

### **Definición 3.1**

*La **demanda bioquímica de oxígeno (DBO)** es una medida indirecta de la cantidad de materia orgánica biodegradable presente en el agua, que representa la cantidad de oxígeno que consumen las bacterias en los procesos de degradación aerobia de la materia orgánica oxidable biológicamente, por acción de su metabolismo durante la respiración aerobia, que transforma los compuestos putrescibles de carbono y nitrógeno en productos finales estables, tales como el  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  y el  $\text{NO}_3$ .*

Como se advierte en la definición, la materia orgánica biodegradable puede ser de naturaleza carbonosa o nitrogenada, aunque en algunos casos podría contener cantidades importantes de fósforo y otros elementos orgánicos. Sin embargo, en la mayoría de los procesos de contaminación de las aguas superficiales, el carbono y el nitrógeno constituyen el sustrato (alimento) principal de las bacterias aerobias. Esto ha hecho que se diferencie entre la cantidad de oxígeno necesaria para que las bacterias degraden la materia orgánica carbonosa (**demanda bioquímica de oxígeno carbonosa, DBOC**) y la cantidad de oxígeno requerida para transformar el nitrógeno orgánico en nitratos, en un proceso denominado nitrificación (**demanda bioquímica de oxígeno nitrogenada, DBON**). La cantidad total de oxígeno que se necesitaría para degradar tanto la materia carbonosa como la nitrogenada toma el nombre de **demanda bioquímica de oxígeno total (DBOT)**.

### 3.3.2 Cinética de primer orden de la DBO

#### 3.3.2.1 Demanda bioquímica de oxígeno carbonosa (DBOC)

Desde el trabajo de Streeter y Phelps en 1925, la cinética de la DBO se ha estudiado suponiendo una reacción oxidativa de la materia orgánica de primer orden. En la página cinco del boletín 146 de la USPHS, se establecía lo que ahora se conoce como la ley de Phelps: “*La velocidad de oxidación bioquímica de la materia orgánica es proporcional a la concentración remanente de materia sin oxidar*”, y su formulación matemática original corresponde a la siguiente ecuación diferencial para una reacción monomolecular (Streeter and Phelps, 1925):

$$-\frac{dL}{dt} = kL \quad \text{Ec. [3.1]}$$

donde,  $L$  es la DBO remanente;  $k$ , es una constante que define la tasa a la que se produce la reacción de oxidación; y  $t$ , es el tiempo transcurrido en la reacción.

#### **Definición 3.2**

**La demanda bioquímica de oxígeno remanente**, denotada por  $L$ , es la cantidad de oxígeno que aún está disponible para ser consumida por las bacterias aerobias, a un tiempo dado del desarrollo de la reacción de oxidación de la materia orgánica biodegradable.

Debido a que experimentalmente la reacción se estudia midiendo la cantidad de oxígeno disuelto disponible (DBO remanente,  $L$ , en mg/l), en declinación progresiva a medida que transcurre la reacción, en un sistema por lotes o reactor batch cuyo volumen es  $V$ , entonces, producto del balance de masa (acumulación = - eliminación), se tiene:

$$V \frac{dL}{dt} = -k_1VL \quad \text{Ec. [3.2]}$$

$$\frac{dL}{dt} = -k_1L \quad \text{Ec. [3.3]}$$

donde  $k_1$  es la constante de reacción de la botella o reactor. O simplemente,

$$\frac{dL}{dt} = -k_d L \quad \text{Ec. [3.4]}$$

que básicamente es la misma ecuación [3.1], con la especificación de que la constante de reacción, ahora denotada por  $k_d$ , se denomina constante de desoxigenación, por representar la tasa a la que se degradará la materia orgánica carbonosa real en la corriente. Sin embargo, debe tenerse presente que solo en ríos profundos y lentos,  $k_1$  coincidirá con  $k_d$ ; pero en otras corrientes  $k_d$  tiende a ser mayor (Chapra, 2008).

La especificación sobre la constante de reacción tiene justificación por el hecho de que, durante los cinco primeros días, la demanda de oxígeno, denotada como  $DBO_5$  es ejercida prácticamente en su totalidad por las bacterias

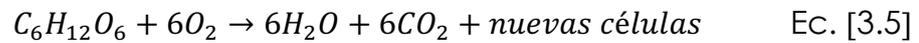
aerobias heterotróficas que descomponen la materia orgánica carbonosa, por lo que generalmente se asume que el valor de la  $DBO_5$  es representativo de la DBOC. Como se verá más adelante, hay otro tipo de microorganismos, las bacterias nitrificantes, las cuales degradan los compuestos de nitrógeno de la materia orgánica en descomposición, pero éstas necesitan un tiempo de 8 a 10 días para alcanzar una población suficientemente numerosa que haga significativo su aporte a la DBO; además, se ha determinado que a la temperatura del ensayo (20°C) la población de estas bacterias en aguas residuales domésticas es baja y su tasa de reproducción es lenta; no obstante, es posible que algunas muestras de ríos contengan cantidades

#### NOTA DE INTERÉS

Las fuentes de error más importantes en el ensayo de la DBO son las siguientes (Radojević y Bashkin, 2006):

- *Metales pesados* (reducen el valor final de la DBO);
- *Bacterias anaerobias de las aguas servidas y lodos de ríos* (reducen el valor final de la DBO);
- *Condiciones de oscuridad en la prueba en el laboratorio* (las algas que crecen a la luz del sol pueden morir en la oscuridad de del equipo de incubación, y amentar el valor de la DBO);
- *Variaciones de temperatura* (un cambio de  $\pm 1^\circ\text{C}$  produciría un error de  $\pm 4,7\%$  en el valor de la DBO);
- *Residuos de cloro* (se recomienda eliminarlos de las muestras).

significativas de estos microorganismos. Estos hechos respaldan la suposición anterior de igualar la  $DBO_5$  con la DBOC (Radojević y Bashkin, 2006). Una reacción general que exprese la DBO ejercida para degradar la materia orgánica carbonosa, como los carbohidratos (por ejemplo, la glucosa), es:



Reorganizando convenientemente la ecuación [3.3], e integrando por separación de variables, se obtiene

$$\int_{L_0}^L \frac{dL}{L} = -k_1 \int_0^t dt \quad \text{Ec. [3.6]}$$

$$\ln\left(\frac{L}{L_0}\right) = -k_1 t \quad \text{Ec. [3.7]}$$

$$\therefore L = L_0 e^{-k_1 t} \quad \text{Ec. [3.8]}$$

donde,  $L_0$  es la demanda bioquímica de oxígeno última o final (mg/l).

### Definición 3.3

**La demanda bioquímica de oxígeno última**, denotada por  $L_0$ , es la cantidad de oxígeno que será necesaria para degradar el total de la materia orgánica presente al momento de empezar su biodegradación aerobia. Por tal razón, también suele denominarse como DBO remanente inicial.

No obstante, la DBO que se suele medir en el laboratorio como  $DBO_5$ , aunque es posible determinarla a cualquier día del período que dure la reacción, generalmente 20 o 21 días; incluso hasta 30 días (Jayawardena, 2014), es la diferencia entre la DBO última y remanente:

$$DBO_t = L_0 - L \quad \text{Ec. [3.9]}$$

Luego, sustituyendo la ecuación 3.8 en la ecuación 3.9 se obtiene

$$L_0 - DBO_t = L_0 e^{-k_1 t} \quad \text{Ec. [3.10]}$$

$$DBO_t = L_0 - L_0 e^{-k_1 t} \quad \text{Ec. [3.11]}$$

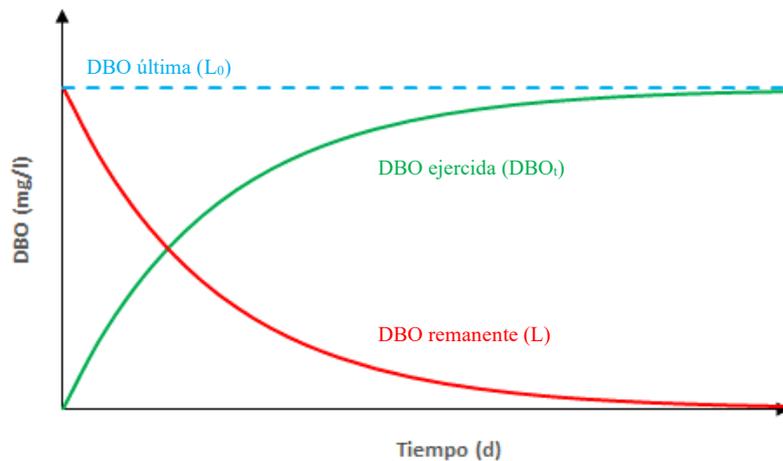
$\therefore DBO_t = L_0(1 - e^{-k_1 t})$	Ec. [3.12]
--	------------

donde,  $DBO_t$  representa la DBO ejercida (mg/l) a un tiempo  $t$ , y es más específicamente la  $DBOC_t$ .

**Definición 3.4**

**La demanda bioquímica de oxígeno ejercida**, denotada por  $DBO_t$ , es la concentración de oxígeno consumido por las bacterias aerobias durante el proceso de descomposición de la materia orgánica carbonosa, siendo equivalente a la cantidad de sustrato (materia orgánica) que ha reaccionado o se ha degradado a un tiempo dado.

La figura 3-2 muestra la relación entre los tres tipos de DBO definidos:

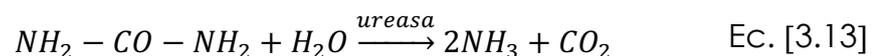


**Figura 3-2** Relación entre la DBO ejercida, DBO remanente y DBO última.

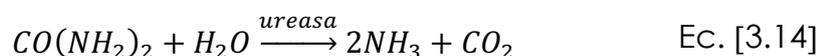
En corrientes prístinas, la  $DBO_5$  suele tener valores menores de 1 mg/l, mientras que, en corrientes moderadamente contaminadas, la  $DBO_5$  oscila entre 2 y 8 mg/l. En relación con las aguas residuales, si estas son crudas pueden llegar a tener aproximadamente una  $DBO_5$  de hasta 600 mg/l; pero se han pasado por tratamiento terciario, esos niveles pueden bajar hasta 20 mg/l (Jayawardena, 2014). Comparando entre niveles de desarrollo en el mundo, en los Estados Unidos la  $DBO_5$  presente en las aguas residuales no tratadas es típicamente de 220 mg/l, pero en los países en vías de desarrollo suele ser mayor, con un valor promedio de 320 mg/l (Chapra, 2008).

### 3.3.2.2 Demanda bioquímica de oxígeno nitrogenada (DBON)

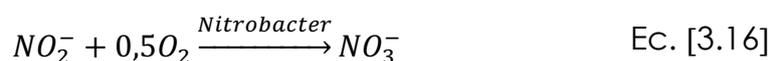
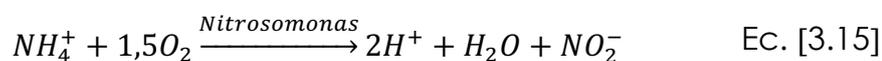
La materia orgánica biodegradable suele contener también compuestos de nitrógeno, los cuales, por intermediación metabólica de cierto grupo de microorganismos quimiolitotróficos, pueden ejercer una demanda de oxígeno adicional a la de las bacterias aerobias que degradan las sustancias carbonosas, denominada demanda bioquímica de oxígeno nitrogenada (DBON). Estos compuestos nitrogenados experimentan transformaciones bioquímicas a través de una serie de etapas gobernadas por determinados grupos de bacterias, en el llamado ciclo del nitrógeno. Las etapas del referido ciclo son la amonificación (conversión del nitrógeno presente en la materia orgánica descompuesta en amoníaco,  $\text{NH}_3$ ), la nitrificación (formación de nitritos y nitratos a partir del amoníaco o del ion amonio  $\text{NH}_4^+$ ), y la desnitrificación (devolución de nitrógeno a la atmósfera en forma de nitrógeno molecular,  $\text{N}_2$ , u óxido nitroso,  $\text{NO}_2$ , por acción de bacterias anaerobias facultativas). Como se verá más adelante, la nitrificación es un proceso oxidante (consumidor de oxígeno) y la desnitrificación, un proceso reductor. La amonificación, por su parte, es un proceso que no requiere oxígeno y puede ser realizada por una amplia variedad de plantas, animales y microorganismos aerobios y anaerobios; como ejemplo, la producción de nitrógeno amoniacal a partir de la descomposición de la urea, un producto terminal del metabolismo de las proteínas presente abundantemente en la orina y las heces de seres humanos y animales puede representarse mediante la siguiente reacción (Roldán y Ramírez, 2008):



O expresada para la fórmula molecular de la urea



Concretamente, la DBON se ejerce a medida que el nitrógeno amoniacal presente en el agua es oxidado, secuencialmente, a nitritos y a nitratos, por medio del metabolismo de las bacterias nitrificantes. Este proceso de nitrificación se verifica en dos etapas, según la siguiente estequiometría (Gaudy and Gaudy, 1980):



La razón de que la primera etapa de la nitrificación se haya representado a partir de la reacción del ion amonio y no del amoniaco es que, a valores normales de pH en el agua, el nitrógeno amoniacal se presenta en forma ionizada. En efecto, a valores de pH neutro o ácidos, el ion amonio predominará, y servirá de nutriente para las algas y plantas acuáticas, ejerciendo, consecuentemente, demanda o consumo de oxígeno; mientras que a valores de pH mayores a 9, predominará la forma no ionizada, es decir, el amoniaco, un gas tóxico para los peces y que se volatiliza fácilmente desde los cuerpos de agua (Chin, 2013). Esta dependencia del pH para la predominancia de una u otra forma del nitrógeno amoniacal se expresa mediante la siguiente relación:

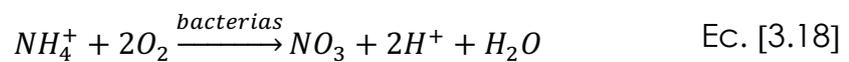


En otras palabras, en cuerpos de agua donde el pH tenga un valor de 7 o menor, el amoniaco será inestable y se disociará en ion amonio e hidroxilo.

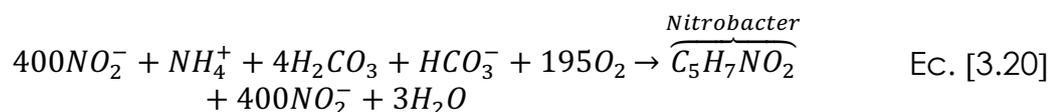
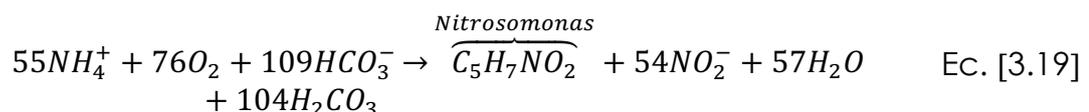
En la primera reacción (Ec. 3.15), el género de bacterias *Nitrosomonas* consume 3,43 g de  $O_2$  para convertir cada gramo de nitrógeno en nitrito, mediante la oxidación del amonio; y en la segunda (Ec. 3.16), las bacterias del género *Nitrobacter* requieren 1,14 g de  $O_2$  para convertir cada gramo de nitrógeno en el proceso de conversión de nitritos en nitratos. Por lo tanto, el proceso completo de nitrificación necesita de 4,57 g de  $O_2$  por cada gramo de nitrógeno oxidado. Sin embargo, debido a que cierta cantidad

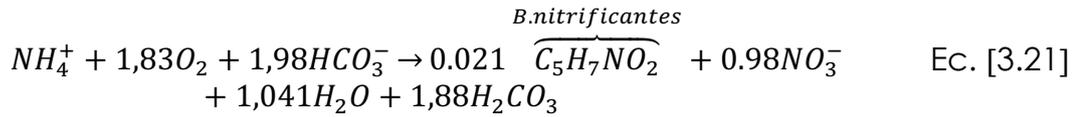
de nitrógeno amoniacal se utilizará eventualmente para la producción de células bacterianas, la demanda de oxígeno nitrogenada consume realmente  $4,2 \text{ gO}_2/\text{gN}_2$  oxidado (Chapra, 2008). Por otro lado, aunque en la primera etapa de la nitrificación, *Nitrosomonas* es el género bacteriano más frecuentemente identificado, también es posible encontrar poblaciones de los géneros *Nitrosococcus* y *Nitrospira*; en la segunda etapa, al género *Nitrobacter* suelen acompañar los géneros *Nitrospina*, *Nitrococcus*, y *Nitrospira*, en la oxidación autotrófica del nitrógeno amoniacal (Watson, Valois and Waterbury, 1981).

La reacción global que describe el proceso unificado de nitrificación se resume en la siguiente ecuación:



La degradación biológica del nitrógeno en el agua mediante el proceso de nitrificación, además de convertir el amonio en nitratos, implica la utilización de carbono a partir de aniones de bicarbonato para la síntesis de nuevas células bacterianas, con la consecuente formación de ácido carbónico. Esto ocurre, básicamente, porque las bacterias nitrificantes son autótrofas, por lo que, a diferencia de las bacterias aerobias o heterótrofas responsables de la DBOC, las bacterias nitrificantes obtienen energía química a partir del carbono inorgánico. Estos aspectos permiten reescribir las ecuaciones anteriores de la nitrificación de una forma más abarcadora, de la siguiente forma (Lin, 2014):





Por otra parte, teniendo en cuenta que la cantidad total de nitrógeno susceptible de ser biodegradado en la materia orgánica presente en el agua es la suma del nitrógeno orgánico y el nitrógeno amoniacal, la demanda bioquímica de oxígeno nitrogenada última, denotada por  $L_0^N$ , se expresa mediante la siguiente ecuación, la cual incluye al nitrógeno referido como nitrógeno total Kjeldahl (NTK):

$$L_0^N = 4,57NTK \quad \text{Ec. [3.22]}$$

Así, el modelo cinético de la DBON puede expresarse de forma similar al de la DBOC indicado anteriormente, reemplazando  $L_0$  por  $L_0^N$  y  $k_d$  por  $k_n$ :

$$DBON_t = L_0^N(1 - e^{-k_n t}) \quad \text{Ec. [3.23]}$$

donde,  $k_n$  es la tasa de oxidación durante la nitrificación.

Finalmente, la figura 3-3 muestra la relación entre la DBOC y la DBON, como la suma de la dos para dar la Demanda Bioquímica de Oxígeno Total (DBOT):

$$DBOT = L_0(1 - e^{-k_d t}) + L_0^N(1 - e^{-k_n t}) \quad \text{Ec. [3.24]}$$

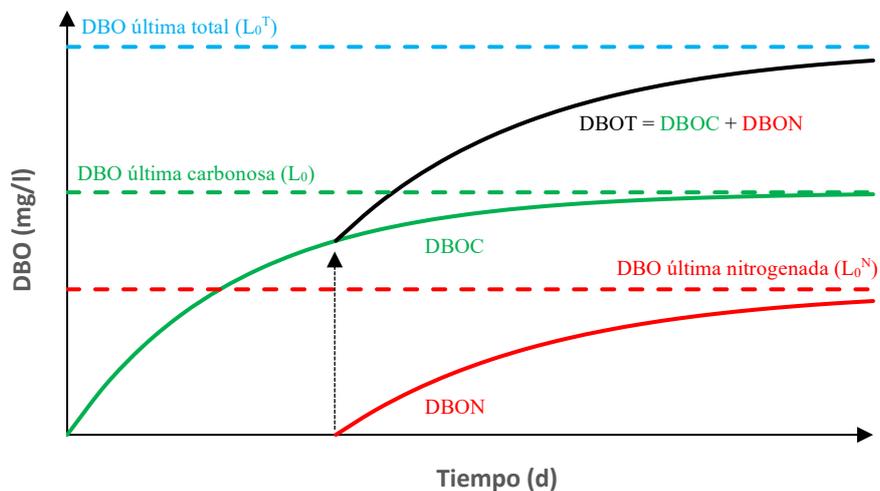


Figura 3-3 Representación gráfica de la DBOC y DBON.

**Ejercicio 3.1**

Un equipo de investigación realizó una evaluación de la contaminación orgánica producida por la descarga de lixiviados desde el vertedero de desechos sólidos de la ciudad de Quevedo. Uno de los parámetros determinados fue la DBO, obteniéndose una DBO<sub>5</sub> promedio de 2568 mg/l y una DBO última igual a 3749 mg/l. Determine (a) el valor de la constante de reacción, (b) trace las curvas que representen la variación de la DBO remanente y ejercida a lo largo de la degradación de la materia orgánica, y (c) el tiempo que deberá transcurrir para que estas sean iguales.

Solución:

Es preciso tomar como punta de partida la ecuación que relaciona la DBO<sub>t</sub> con la DBO última (L<sub>0</sub>), es decir la ecuación 3.12

$$DBO_t = L_0(1 - e^{-k_d t})$$

(a) Luego, se debe despejar la constante de reacción (la incógnita); el resultado del despeje y el cálculo de su valor se presenta a continuación

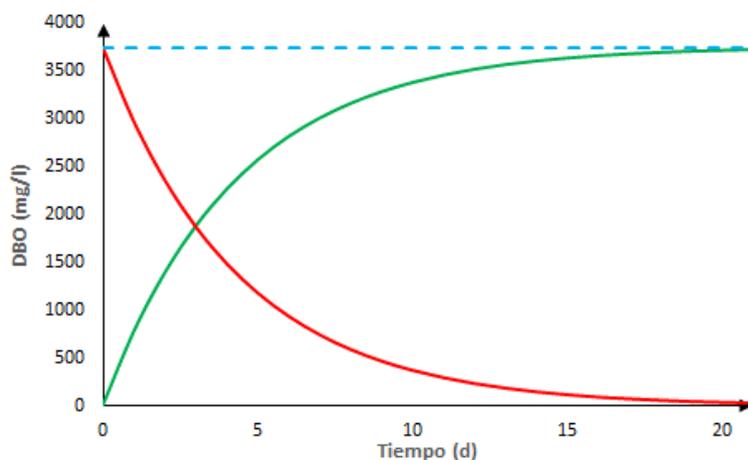
$$k_d = \frac{1}{t} \ln \left( \frac{L_0}{L_0 - DBO_t} \right)$$

$$k_d = \frac{1}{5d} \ln \left( \frac{3749 \frac{mg}{l}}{3749 \frac{mg}{l} - 2568 \frac{mg}{l}} \right)$$

$$\therefore k_d = 0,231d^{-1}$$

(b) Para graficar las curvas indicadas, uno de los caminos a seguir es utilizar además de la ecuación 3.12, también la ecuación 3.8, y luego de asignar diferentes valores a la variable tiempo, obtener los valores correspondientes de DBO<sub>t</sub> y L. Sin embargo, L puede ser calculada mediante el atajo establecido en la ecuación 3.9. Así, los resultados obtenidos deben ser los mostrados en la siguiente tabla

t (d)	DBO <sub>t</sub> (mg/l)	L (mg/l)
0	0	3749
3	1874	1875
5	2568	1181
7	3005	744
9	3280	469
11	3454	295
13	3563	186
15	3632	117
17	3675	74
19	3702	47
21	3720	29



**Figura 3-4** Curvas de DBO ejercida y remanente del ejercicio 3.1.

(c) Dado que son iguales al tiempo que se busca, es posible igualar sus ecuaciones cinéticas, así:

$$L = DBO_t$$

$$L_0 e^{-k_d t} = L_0(1 - e^{-k_d t})$$

$$L_0 e^{-kt} = L_0 - L_0 e^{-kt}$$

$$2L_0 e^{-kt} = L_0$$

Se despeja el término que tiene el tiempo y se tiene que

$$e^{-kt} = \frac{1}{2}$$

Luego,

$$-kt = \ln\left(\frac{1}{2}\right)$$

$$t = \frac{\ln(2)}{k}$$

Por lo tanto, la DBO ejercida y la remanente son iguales cuando

$$t = \frac{\ln(2)}{0,23 \frac{1}{d}} = 3,01d$$

### 3.3.3 Otros modelos cinéticos de la DBO

Poco tiempo después del establecimiento de la cinética de primer orden para evaluar la DBO, no todos los expertos en la materia se mostraron conformes con la capacidad predictiva de tal modelo cinético. Varios investigadores han advertido tales dificultades, principalmente en relación con el cálculo de los valores de  $k$  y  $L_0$ , incluyendo la gran variabilidad de  $k$ . La siguiente tabla presente información relacionada con las críticas y algunas alternativas cinéticas propuestas en el contexto de esta problemática:

**Tabla 3-1 Críticas y alternativas al modelo cinético de primer orden para la DBO**

Investigadores	Título de la publicación	Observación/Conclusión
Moore (1941)	<i>Long-Time Biochemical Oxygen Demands at Low Temperatures</i>	Se puede representar adecuadamente la DBOC mediante un modelo unimolecular como el de Phelps y Theriault siempre que se tenga en cuenta de un período de retraso en la curva de consumo del oxígeno, aunque a temperaturas menores o iguales a 5°C parece ocurrir un aumento secundario en la demanda de oxígeno. La fase nitrogenada de la DBO también puede ser descrita mediante un modelo monomolecular que incluya un período de retraso, pero a altas temperaturas.
Orford e Ingram (1953)	<i>Deoxygenation of Sewage</i>	La ecuación monomolecular es una expresión deficiente para el análisis de la oxidación biológica, debido a que sus dos parámetros, $k$ y $L_0$ , no son constantes. Esta variación temporal de tales parámetros hace que tengan muy poco significado físico y biológico como medidas de velocidad y fuerza contaminante.
		La ecuación logarítmica propuesta se adapta tan bien a los datos observados como la ecuación monomolecular, pero se adapta mejor al fenómeno de oxidación biológica, y elimina las dificultades vinculadas a la inestabilidad de las constantes y sus cálculos complicados.
Woodward (1953)	<i>Deoxygenation of sewage: a discussion</i>	No existe una razón teórica por la que se prefiera un modelo de segundo orden a otro, por ejemplo, un tercer o cuarto orden o incluso una ecuación de acción de orden fraccional. El modelo cinético de segundo orden se ajusta bien a los datos con el uso de solo dos parámetros y facilita la determinación de tales parámetros a partir de los datos.
Zanoni (1967)	<i>Waste water deoxygenation at different temperatures</i>	La DBO última en la reacción de primer orden varía con la temperatura, mucho más a temperaturas superiores a 20 °C que para temperaturas inferiores.
		Los datos de DBO se ajustaron mejor a una cinética de segundo orden que a la ecuación monomolecular o de primer orden, a todas las temperaturas consideradas, pudiéndose describirse con bastante precisión la variación de la constante de de reacción de segundo orden mediante la ecuación de Arrhenius, aunque en contrapartida con las obtenidas para la cinética de primer orden, las DBO últimas calculadas resultaron más altas.
Marske y Polkowski (1972)	<i>Evaluation of Methods for Estimating Biochemical Oxygen Demand Parameter</i>	El modelo de primer orden describe adecuadamente los datos de DBO investigados en el estudio, pero se recomienda que su uso se limite a valores de $k$ iguales o inferiores a 0,20. Sin embargo, para valores de la constante de reacción superiores a 0,20, la cinética de segundo orden describe mejor los datos de DBO.
Hewitt y Hunter (1975)	<i>A comparison of the methods used to calculate first order bod equation constants</i>	Se compararon siete métodos para la determinación de los valores de $k$ y $L_0$ en muestras de agua de ríos, utilizando una cinética de primer orden, entre ellos el procedimiento referencial denominado Reed-Theriault. encontrándose diferencias de hasta 57% en los valores calculados de $k$ y de 51% en $L_0$ , con respecto a los métodos simplificados. Sin embargo, los siete métodos se adaptan adecuadamente a datos de DBO en función del tiempo. En virtud de ello, se concluyó que las diferencias se deben no a deficiencias en los métodos de cálculo, sino a la resistencia del proceso de oxidación de la materia orgánica a ser descrito mediante una cinética de primer orden.

Investigadores	Título de la publicación	Observación/Conclusión
Tebbutt y Berkun (1976)	<i>Respirometric determination of bod</i>	Se determinó que mediante el método respirométrico es posible obtener datos de consumo de oxígeno coincidentes con el método convencional de determinación de la DBO. Estos valores de DBO5 mostraron un buen ajuste con los modelos cinéticos tanto de primer como de segundo orden; sin embargo, se afirma que un modelo de primer orden, por ser más sencillo, podría describir aceptablemente la oxidación biológica de sustratos complejos, al menos en el rango normal de valores que puede adquirir la DBO en aguas residuales crudas.
Hewitt, Hunter y Lockwood (1979)	<i>A multiorder approach to bod kinetics</i>	Se determinó y graficó el oxígeno consumido durante el análisis de 20 muestras obtenidas de 8 corrientes de New Jersey, calculando el valor de k y L0 mediante el ensayo de modelos de orden 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5 y 4, los cuales demostraron reducir el error progresivo en el ajuste de los datos observados, a costa de incrementar casi al doble el valor calculado para L0 al pasar de una cinética de primer orden a una de cuarto orden.
Adrian y Sanders (1992)	<i>Oxygen sag equation for half order bod kinetics</i>	Se desarrolló una ecuación para estudiar el agotamiento del oxígeno disuelto en corrientes superficiales, utilizando un modelo de DBO basado en una cinética de medio orden, la cual hizo posible que la DBO decaiga a cero en un tiempo finito, algo no observado con modelos de primer orden. Así, concluyen que la ecuación del oxígeno disuelto basada en un modelo de orden medio para la DBO es más aplicable al estudio de desechos orgánicos de rápida degradación, y conteniendo principalmente glucosa y ácido glutámico.
Borsuk y Stow (2000)	<i>Bayesian parameter estimation in a mixed-order model of bod decay</i>	Un modelo de orden mixto para la cinética de la DBO tiene el potencial de representar mejor el ensamblaje de procesos que contribuyen al consumo de oxígeno durante la degradación de la materia orgánica. Para los datos evaluados, se determinó que los modelos distintos a la cinética de primer orden presentan un mejor ajuste, aunque el modelo de segundo orden propuesto con frecuencia podría no ser la alternativa más adecuada. Concluyen que, para un uso práctico, el modelo de orden mixto da como resultado una mejor respuesta a las observaciones y produce predicciones más realistas de DBO última que el modelo de primer orden.

Fuente: Elaborado por el autor con base en las citas de la primera columna

La declinación progresiva del valor de la constante de reacción aludida por algunos autores en la tabla 3-1 se explica en términos de que los compuestos orgánicos más fácilmente biodegradables se estabilizan primero, seguidos de aquellos que exhiben una resistencia cada vez mayor a la degradación biodegradable (Ellis, White y Warn, 1989).

Adrian y Sanders (1998) señalaron que es muy importante tener en cuenta que siempre que se utiliza la cinética química para representar la reacción de la DBO, el modelo resultante es una expresión empírica elegida por conveniencia, más que una descripción de las complejas transformaciones que ocurren a medida que se estabiliza la materia orgánica. Con base en esto, argumentaron que no es sorprendente que se haya empleado una cinética de primer orden para determinar la tasa de desoxigenación de la mayoría de las aguas residuales municipales. Complementariamente a esto, Borsuk y Stow (2000) puntualizaron que la cinética de primer orden es estrictamente aplicable a reacciones químicas en entornos controlados, a diferencia de lo que ocurre en entornos naturales, donde la descomposición de la materia orgánica representa una interacción compleja entre un sustrato orgánica heterogéneo y una gran diversidad de bacterias.

Como ejemplo de propuestas de órdenes diferentes a uno para la cinética de la DBO, se presenta el modelo de segundo orden desarrollado por Young y Clark (1965):

$$\frac{dL}{dt} = -kL^2 \quad \text{Ec. [3.25]}$$

La variable  $L$  es reemplazada por su expresión equivalente dada por la ecuación [3.9]

$$\frac{d(L_0 - DBO_t)}{dt} = -k(L_0 - DBO_t)^2 \quad \text{Ec. [3.26]}$$

La ecuación cinética resultante se obtiene siguiendo el siguiente procedimiento deductivo mediante integración por separación de variables:

$$\int_{DBO_{t=0}}^{DBO_t} \frac{d(L_0 - DBO_t)}{(L_0 - DBO_t)^2} = -k \int_0^t dt \quad \text{Ec. [3.27]}$$

$$\int_{DBO_{t=0}}^{DBO_t} \frac{dL_0 - dDBO_t}{(L_0 - DBO_t)^2} = -k \int_0^t dt \quad \text{Ec. [3.28]}$$

$$\int_{DBO_{t=0}}^{DBO_t} \frac{-dDBO_t}{(L_0 - DBO_t)^2} = -k \int_0^t dt \quad \text{Ec. [3.29]}$$

$$u = L_0 - DBO_t$$

$$\frac{du}{dDBO_t} = -1$$

$$du = -dDBO_t$$

$$\int_{DBO_{t=0}}^{DBO_t} \frac{du}{u^2} = -k(t) \Big|_0^t \quad \text{Ec. [3.30]}$$

$$-\frac{1}{u} \Big|_{DBO_{t=0}}^{DBO_t} = -k(t - 0) \quad \text{Ec. [3.31]}$$

$$-\left(\frac{1}{L_0 - DBO_t}\right) \Big|_{DBO_{t=0}}^{DBO_t} = -kt \quad \text{Ec. [3.32]}$$

$$-\frac{1}{L_0 - DBO_t} - \left(-\frac{1}{L_0}\right) = -kt \quad \text{Ec. [3.33]}$$

$$\frac{1}{L_0} - \frac{1}{L_0 - DBO_t} = -kt \quad \text{Ec. [3.34]}$$

$$\frac{L_0 - DBO_t - L_0}{L_0(L_0 - DBO_t)} = -kt \quad \text{Ec. [3.35]}$$

$$\frac{-DBO_t}{L_0 - DBO_t} = -kL_0t \quad \text{Ec. [3.36]}$$

$$-DBO_t - DBO_t kL_0t = -kL_0^2t \quad \text{Ec. [3.37]}$$

$$DBO_t(1 + kL_0t) = kL_0^2t \quad \text{Ec. [3.38]}$$

$$DBO_t = \frac{kL_0^2 t}{1 + kL_0 t} \quad \text{Ec. [3.39]}$$

$$\therefore DBO_t = \frac{t}{\frac{1}{kL_0^2} + \frac{1}{L_0} t} \quad \text{Ec. [3.40]}$$

La ecuación [3.40] es el modelo de DBO de segundo orden propuesto por Young y Clark (1965), quienes afirmaron que tiene la misma precisión que el modelo de primer orden a temperaturas de 20°C y 35°C; sin embargo, ellos hicieron una última modificación a fin de hacer posible la linealización del modelo, donde  $a$  sea igual a  $\frac{1}{kL_0^2}$  y  $b$  sustituye a  $\frac{1}{L_0}$ . De modo que

$$DBO_t = \frac{t}{a + bt} \quad \text{Ec. [3.41]}$$

$$\frac{t}{DBO_t} = a + bt \quad \text{Ec. [3.42]}$$

Los valores de  $a$  y  $b$  se pueden determinar mediante el análisis de mínimos cuadrados, con las siguientes ecuaciones:

$$a + b \left( \frac{\sum t}{t} \right) - \left( \frac{\sum t}{y} \right) = 0 \quad \text{Ec. [3.43]}$$

$$a + b \left( \frac{\sum t^2}{t} \right) - \left( \frac{\sum t^2}{y} \right) = 0 \quad \text{Ec. [3.44]}$$

No obstante, a pesar de las múltiples críticas adjudicadas al modelo cinético de primer orden en la relativo a su capacidad para describir satisfactoriamente las reacciones de oxidación biológica, principalmente en la determinación de  $k$  y  $L_0$  que permitan ajustar adecuadamente los datos observados de DBO, aún el modelo de primer orden sigue siendo el más utilizado, probablemente debido a que los modelos alternativos propuestos no han podido demostrar una superioridad indiscutible (Hewitt,

Hunter y Lockwood, 1979). Apoyando este argumento, Gray (2004) afirma que aún hay algunas dudas en relación con la capacidad del modelo cinético de segundo orden para describir mejor la fase de crecimiento exponencial en la curva de DBO, haciendo énfasis también en que ningún valor fijo de cinética ha podido describir apropiadamente las complejas interacciones bacterias-sustrato que representan el decaimiento de la DBO en el ambiente, y que se prefiere la ecuación de primer orden por describir con mayor precisión la suma de todas las tasas de crecimiento que configuran al curva de DBO. Así, se justifica que la ecuación de primer orden sea la más ampliamente utilizada en los modelos de calidad del agua para describir la oxidación biológica de la materia orgánica presente en las aguas residuales y naturales. Hasta la fecha, ninguno de estos argumentos ha podido ser desvirtuado.

### 3.3.4 Constante de desoxigenación

En la sección 3.2 se identificó a la oxidación de la materia orgánica como uno de los sumideros del oxígeno disuelto en los cuerpos de agua. Este proceso se verifica en dependencia del valor de la constante de desoxigenación, que como ya se sabe, se denota por  $k_1$  si corresponde al valor determinado en condiciones de laboratorio, o por  $k_d$  si representa el ejercicio de la DBO real en el cuerpo de agua en condiciones naturales. Tal dependencia quedó establecida en las ecuaciones [3.3] y [3.4], que revelan su papel dentro de la tasa de desoxigenación o, en otras palabras, la tasa a la que los microorganismos aerobios consumen el oxígeno en la descomposición de la materia orgánica. Como se verá más adelante, conviene expresar la tasa de desoxigenación utilizando la notación del capítulo 2, como un sumidero del oxígeno disuelto en el agua, esto es

$$S_d = -k_d L \quad \text{Ec. [3.45]}$$

donde  $S_d$  es el sumidero causado por la oxidación de la materia orgánica, es decir la tasa de desoxigenación.

La constante de desoxigenación depende de tres factores fundamentales: la composición del residuo, la habilidad de los microorganismos autóctonos para degradar la materia orgánica, y la temperatura del agua (Chin, 2013). Los valores representativos de la constante de desoxigenación a 20°C en dependencia del tipo de cuerpo de agua se muestran en la tabla 3-2:

**Tabla 3-2 Valores típicos de la constante de desoxigenación a 20°C por tipo de corriente superficial**

Tipo de corriente	$k_d$ (d <sup>-1</sup> )
Corrientes profundas	0,10 – 0,50
Corrientes someras	0,50 – 3,00
Río contaminado	0,10 – 0,25
Río no contaminado	< 0,05

Fuente: Thomann y Mueller (1987); Chin (2013).

Complementariamente, el valor de la constante de desoxigenación en aguas residuales crudas oscila entre 0,35 y 0,70 d<sup>-1</sup>; y en aguas residuales tratadas, el rango es de 0,10 – 0,35 d<sup>-1</sup>.

#### 3.3.4.1 Métodos para la determinación de $k_1$

Recuérdese que la variabilidad de la constante  $k$  y de  $L_0$  ha sido uno de los argumentos más comúnmente esgrimidos por los detractores de la cinética de primer orden para la DBO. No obstante, desde la segunda década del siglo XX numerosos investigadores han propuesto métodos para determinar su valor, aunque aplicados a un mismo conjunto de datos, la variación suele ser considerable. La tabla 3-3 ofrece una revisión rápida de los primeros intentos en este contexto que, sin embargo, siguen vigentes hoy en día:

Tabla 3-3 Métodos pioneros de determinación de  $k_1$  y  $L_0$  en la ecuación de DBO de primer orden

Investigadores	Publicación	Denominación y descripción
Reed y Theriault (1931)	<i>The Statistical Treatment of Reaction-Velocity, Data. II. Least-Squares Treatment of the Unimolecular Expression: <math>Y = L (1 - e^{-kt})</math>.</i>	<b>Método de los mínimos cuadrados de Reed-Theriault:</b> Originalmente se publicó en el boletín 172 de la USPHS del año 1927, bajo el título <i>The oxygen demand of polluted Waters</i> . Fue reconocido como el método más exacto para la estimación de la constante $k$ y $L_0$ , pero con la desventaja de ser tedioso y requerir cálculos laboriosos consumidores de tiempo.
Fair (1936)	<i>The "Log-Difference" Method of Estimating the Constants of the First-Stage Bio-Chemical Oxygen Demand Curve</i>	<b>Método de la diferencia logarítmica:</b> Requiere que la DBO ejercida sea medida a intervalos regulares de tiempo. Aunque matemáticamente es sencillo, es difícil de resolver (Lin, 2014).
Thomas (1937)	<i>The "Slope" Method of Evaluating the Constants of the First-Stage Biochemical Oxygen-Demand Curve</i>	<b>Método de la pendiente:</b> Es matemáticamente tan sencillo como el método de Fair, sin embargo, arroja valores de $k$ y $L_0$ más cercanos a los estimados mediante la fórmula de Reed-Theriault. Su procedimiento requiere el cálculo de los mínimos cuadrados de la pendiente más probable correspondiente a la reacción monomolecular de la DBO. No obstante, en 1972, Marske y Polkoswky concluyeron que este método subestima el valor de $k$ y sobreestima el valor de $L_0$ .
Thomas (1950)	<i>Graphical determination of BOD curve constants</i>	<b>Método de Thomas:</b> Es matemáticamente tan sencillo como el método de Fair, sin embargo, arroja valores de $k$ y $L_0$ más cercanos a los estimados mediante la fórmula de Reed-Theriault. Su procedimiento requiere el cálculo de los mínimos cuadrados de la pendiente más probable correspondiente a la reacción monomolecular de la DBO. No obstante, en 1972, Marske y Polkoswky concluyeron que este método subestima el valor de $k$ y sobreestima el valor de $L_0$ .
Moore, Thomas Jr. y Snow, William Brewster Ruchhoff (1950)	<i>Simplified Method for Analysis of B.O.D. Data</i>	<b>Método del momento:</b> Es un método menos laborioso que los precedentes, a causa del menor consumo de tiempo en los cálculos. Pronto se convirtió en la técnica más utilizada para el cálculo de las constantes de la curva de la DBO, básicamente por su confiabilidad y precisión para analizar los datos de DBO (Lin, 2014). El método se apoya en tres gráficos, en función de los cuales se estima el valor de las dos constantes, para datos de DBO de 3, 5 y 7 días.

Elaborado por: el Autor con base en las citas de la primera columna

## NOTA DE INTERÉS

Las series matemáticas son herramientas esenciales para resolver múltiples problemas en las ciencias, específicamente aquellos que implican patrones o reglas de sucesión de elementos de un conjunto de datos. Básicamente, son representaciones de funciones reales mediante la suma de los términos de una sucesión determinada de sus valores, pudiendo ser finita o infinita, dependiendo del número de términos de la sucesión. Se denotan mediante la siguiente notación

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n = a_1 + a_2 + a_3 + \dots + a_n$$

Dos de las series infinitas más importantes son las series de Taylor y Maclaurin, que constituyen en esencia un caso especial de las series de potencias. La serie de Taylor generada para una función en  $x = a$ , nombrada así en honor al matemático inglés Brook Taylor (1685-1731), se expresa como sigue

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x-a)^n = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2!} (x-a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!} (x-a)^3 + \dots$$

La serie de Maclaurin, llamada así en honor al matemático escocés Colin Maclaurin (1698-1746) es un caso especial de la serie de Taylor, donde  $a = 0$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n = f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!} x^2 + \frac{f'''(0)}{3!} x^3 + \dots$$

De todos los métodos descritos en la tabla 3-3, uno de los más empleados, incluso en la actualidad, para determinar  $k$  y  $L_0$  es el método gráfico de Thomas, cuya formulación matemática se deriva a partir de la serie de Maclaurin de la función exponencial natural

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} + \dots \quad \text{Ec. [3.46]}$$

Es posible arreglar la ecuación [3.45], asumiendo que la variable  $x$  representa el producto negativo  $kt$ , de modo que el lado izquierdo sea igual al factor binomial de la ecuación [3.12]; esto es, el factor  $(1 - e^{-k_1 t})$  de la ecuación cinética de primer orden de la DBO carbonosa, con el reemplazo de  $k_d$  por  $k_1$  por tratarse de un método basado en mediciones en laboratorio. Los pasos sucesivos de este arreglo son

$$e^{-k_1 t} = 1 - k_1 t + \frac{(k_1 t)^2}{2!} - \frac{(k_1 t)^3}{3!} + \frac{(k_1 t)^4}{4!} - \dots \quad \text{Ec. [3.47]}$$

$$1 - e^{-k_1 t} = k_1 t - \frac{(k_1 t)^2}{2!} + \frac{(k_1 t)^3}{3!} - \frac{(k_1 t)^4}{4!} + \dots \quad \text{Ec. [3.48]}$$

$$1 - e^{-k_1 t} = k_1 t \left[ 1 - \frac{k_1 t}{2} + \frac{(k_1 t)^2}{6} - \frac{(k_1 t)^3}{24} + \dots \right] \quad \text{Ec. [3.49]}$$

Luego, es posible demostrar que una función en particular genera una serie de Maclaurin similar a la representada en la ecuación [3.49]. Tal función y su representación literal mediante su serie infinita se presenta a continuación:

$$k_1 t \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-3} = f(0) + f'(0)t + \frac{f''(0)}{2!}t^2 + \frac{f'''(0)}{3!}t^3 + \dots \quad \text{Ec. [3.50]}$$

Como resulta evidente, es preciso calcular las derivadas sucesivas de la función en dependencia del último término que se considere mostrar de la sucesión infinita; en este caso, se considerará hasta el término que incluya la cuarta derivada de la función dada. Utilizando la notación de Leibniz, las derivadas resultantes son

$$\frac{d}{dt} \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-3} = -3 \left( \frac{k_1}{6} \right) \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-4} = -\frac{k_1}{2} \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-4} \quad \text{Ec. [3.51]}$$

$$\frac{d^2}{dt^2} \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-3} = \frac{d}{dt} \left[ -\frac{k_1}{2} \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-4} \right] = -\frac{k_1^2}{3} \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-5} \quad \text{Ec. [3.52]}$$

$$\frac{d^3}{dt^3} \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-3} = \frac{d}{dt} \left[ -\frac{k_1^2}{6} \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-5} \right] = \frac{5k_1^3}{18} \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-6} \quad \text{Ec. [3.53]}$$

$$\frac{d^4}{dt^4} \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-3} = \frac{d}{dt} \left[ \frac{5k_1^3}{18} \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-6} \right] = \frac{5k_1^4}{18} \left( 1 + \frac{k_1 t}{6} \right)^{-7} \quad \text{Ec. [3.54]}$$

Luego, el procedimiento requiere la evaluación de las derivadas para  $f(a)$ , a partir de [3.51], [3.52], [3.53] y [3.54], y su reemplazo en la ecuación [3.50]. De modo que,

$$k_1 t \left(1 + \frac{k_1 t}{6}\right)^{-3} = k_1 t \left[1 - \frac{k_1}{1!} t - \frac{k_1^2}{2!} t^2 + \frac{5k_1^3}{3!} t^3 - \frac{5k_1^4}{4!} t^4 + \dots\right] \quad \text{Ec. [3.55]}$$

$$k_1 t \left(1 + \frac{k_1 t}{6}\right)^{-3} = k_1 t \left[1 - \frac{k_1 t}{2} - \frac{(k_1 t)^2}{6} + \frac{5(k_1 t)^3}{108} - \frac{5(k_1 t)^4}{432} + \dots\right] \quad \text{Ec. [3.56]}$$

Comparando los segundos miembros de las ecuaciones [3.50] y [3.56], resulta evidente que los primeros tres términos de la serie coinciden exactamente, y el cuarto término muestra una diferencia muy pequeña entre las dos series. Esta observación permite establecer la siguiente ecuación

$$1 - e^{-k_1 t} = k_1 t \left(1 + \frac{k_1 t}{6}\right)^{-3} \quad \text{Ec. [3.57]}$$

Sustituyendo el lado izquierdo de la ecuación [3.57] por su expresión equivalente dada por la ecuación [3.12], se obtiene

$$\frac{DBO_t}{L_o} = k_1 t \left(1 + \frac{k_1 t}{6}\right)^{-3} \quad \text{Ec. [3.58]}$$

$$\frac{t}{DBO_t} = \frac{\left(1 + \frac{k_1 t}{6}\right)^3}{k_1 L_o} \quad \text{Ec. [3.59]}$$

Finalmente, la linealización de la ecuación [3.59] resultante de extraer la raíz cúbica en ambos lados, produce la ecuación que constituye la formulación matemática del método de Thomas. Así,

$$\left(\frac{t}{DBO_t}\right)^{1/3} = \left[(k_1 L_o)^{-1} \left(1 + \frac{k_1 t}{6}\right)^3\right]^{1/3} \quad \text{Ec. [3.60]}$$

$$\left(\frac{t}{DBO_t}\right)^{1/3} = (k_1 L_o)^{-1/3} \left(1 + \frac{k_1 t}{6}\right) \quad \text{Ec. [3.61]}$$

$$\left(\frac{t}{DBO_t}\right)^{1/3} = (k_1 L_o)^{-1/3} + \frac{k_1^{2/3}}{6L_o^{1/3}} t \quad \text{Ec. [3.62]}$$

Teniendo en cuenta la forma de la ecuación lineal  $y = a + bx$ , por correspondencia, la pendiente y el intercepto se calculan mediante las siguientes ecuaciones:

$$a = (kL_0)^{-1/3} \quad \text{Ec. [3.63]}$$

$$b = \frac{k_1^{2/3}}{6L_0^{1/3}} \quad \text{Ec. [3.64]}$$

Consecuentemente, si se traza un gráfico de  $(t/y)^{1/3}$  versus  $t$ , el valor de  $L_0$  y  $k_1$ , se obtendrán por medio de las siguientes expresiones:

$$L_0 = \frac{1}{k_1 a^3} \quad \text{Ec. [3.65]}$$

$$k_1 = \frac{6b}{a} \quad \text{Ec. [3.66]}$$

**Ejercicio 3.2**

En un análisis de laboratorio se registró la DBO ejercida por los microorganismos en una muestra de agua, durante cinco días consecutivos. Determine  $k_1$  y  $L_0$  última mediante el método de Thomas, si los resultados obtenidos fueron los que se muestran en la siguiente tabla:

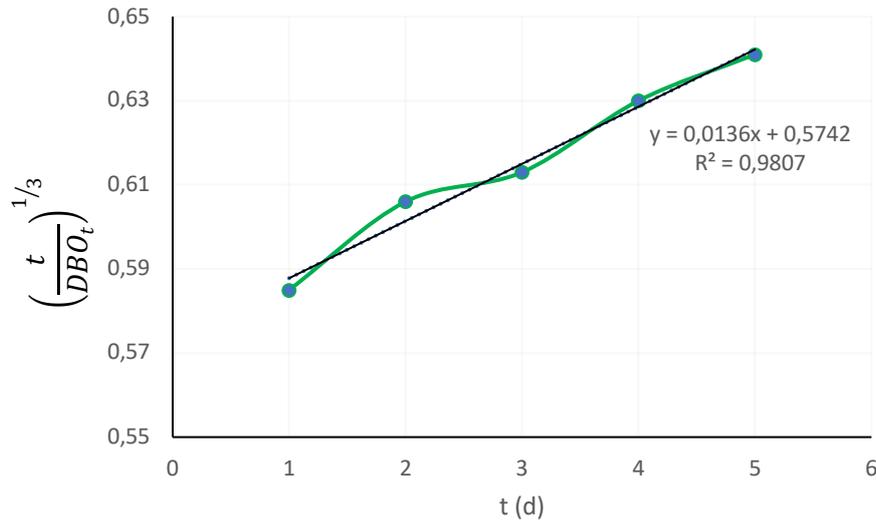
t (d)	1	2	3	4	5
DBO (mg/l)	5	9	13	16	19

Solución:

El primer paso consiste en calcular los valores de la expresión  $\left(\frac{t}{DBO_t}\right)^{1/3}$

t (d)	1	2	3	4	5
$\left(\frac{t}{DBO_t}\right)^{1/3}$	0,585	0,606	0,613	0,630	0,641

Recuerde la ecuación lineal  $\left(\frac{t}{DBO_t}\right)^{1/3} = (k_1 L_0)^{-1/3} + \frac{k_1^{2/3}}{6L_0^{1/3}} t$ . Luego, se debe aplicar una regresión lineal para calcular el intercepto  $a = (k_1 L_0)^{-1/3}$  y la pendiente  $b = \frac{k_1^{2/3}}{6L_0^{1/3}}$ ; así, se tiene que



**Figura 3-5** Aplicación del método de Thomas en el ejercicio 3.2.

$$a = 0,574$$

$$b = 0,0136$$

De modo que, aplicando las ecuaciones [3.65] y [3.66], los valores de la constante de desoxigenación y de la DBO última son

$$k_1 = \frac{6b}{a} = \frac{6(0,0136)}{0,574} = 0,142 \text{ d}^{-1}$$

$$L_0 = \frac{1}{k_1 a^3} = \frac{1}{(0,142 \text{ d}^{-1})(0,574)^3} = 37,2 \text{ mg/l}$$

Además de los métodos descritos en la tabla 3-3, en orden cronológico se puede citar al **método logarítmico de Orford e Ingram (1953)**, que relaciona la DBO ejercida con el logaritmo del tiempo de medición, cuya curva resultante se aproxima a una línea recta mediante la ecuación general  $y_t = m \log t + b$ ; y el **método de las diferencias finitas de Fujimoto (1964)** que utiliza la ecuación  $y_{(t+h)} - 10^{-kh}y_t - L(1 - 10^{-kh}) = 0$ . Pero como se observa, implican modificaciones de la ecuación original unimolecular de primer orden.

### 3.3.4.2 Métodos para determinar $k_d$

Bosko (1966), citado por Zison *et al.* (1978) desarrolló la siguiente relación para obtener  $k_d$  en función de  $k_1$ :

$$k_d = k_1 + n \left( \frac{V}{D} \right) \quad \text{Ec. [3.67]}$$

donde,  $n$  es el coeficiente de actividad del lecho y representa la importancia de los organismos del lecho que utilizan la DBO,  $V$  es la velocidad de la corriente (ft/s), y  $D$  es la profundidad (ft). Los valores del coeficiente  $n$  son proporcionados por Zison *et al.* (1978) como función de la pendiente en la tabla 3-4:

**Tabla 3-4 Valores del coeficiente de actividad del lecho mediante la pendiente de la corriente**

Pendiente de la corriente		n
ft/mi	m/100 m	
2,5	0,05	0,10
5,0	0,10	0,15
10,0	0,20	0,25
25,0	0,50	0,40
50,0	1,00	0,60

Cuando se trata de cuerpos de agua poco profundos, de manera similar a como ocurre con la sedimentación, la descomposición debida a las bacterias en el fondo se vuelve más pronunciada. Así, Chapra (2008) señala que esta tendencia ha sido ajustada mediante una ecuación tomada de Hydroscience (1971), para dos intervalos de profundidad,  $H$ , de la corriente:

$$k_d = 0,3 \left( \frac{H}{2,4} \right)^{-0,434} \quad \text{si } 0 \leq H \leq 2,4 \text{ m} \quad \text{Ec. [3.68]}$$

$$k_d = 0,3 \quad \text{si } H > 2,4 \text{ m} \quad \text{Ec. [3.69]}$$

### 3.3.5 Constante de remoción total de la DBO ( $k_r$ )

La remoción de la DBO en cursos de agua no sólo puede deberse a la descomposición de la materia orgánica, sino también a la sedimentación, por lo que la tasa de remoción total de DBO,  $k_r$ , se expresa de la siguiente manera (Chapra, 2008; Chin, 2013):

$$k_r = k_d + k_s \quad \text{Ec. [3.70]}$$

donde,  $k_s$  es la tasa de remoción de DBO debido a la sedimentación con valores típicos desde 0 a 3,5 d<sup>-1</sup>, y puede calcularse relacionando la velocidad de sedimentación de la materia orgánica  $v_s$  (m.d<sup>-1</sup>), y la profundidad media del agua,  $h$  (m). Su expresión es:

$$k_s = \frac{v_s}{h} \quad \text{Ec. [3.71]}$$

La concepción de una tasa que incorporase la remoción de la DBO no solo por oxidación sino por sumideros tales como la sedimentación, la floculación o la desaparición biológica de la materia depositada en el lecho, se atribuye a los trabajos de Thomas (1948) y Baca y Arnett (1976), quienes propusieron, a su manera, que tal tasa se defina como la suma de la constante de desoxigenación medida en el laboratorio más una constante adicional  $k_3$ , que abarcaba el fenómeno de la sedimentación de la materia orgánica en la columna de agua (Zison *et al.*, 1978).

Complementariamente, Chapra (2008) explica que la sedimentación de los sólidos orgánicos presentes en el agua es significativa en corrientes someras, de menos de un metro de profundidad. Por otro lado, con respecto a su determinación, Sierra (2011) propone que  $k_r$  puede calcularse mediante balances de masa que utilicen mediciones de DBO en el sitio. Al respecto, sugiere dos métodos para su determinación: el primero requiere utilizar concentraciones entre dos sitios de muestreo, y la segunda utiliza cargas contaminantes. Sus expresiones, en ese orden, advirtiendo que la DBO medida aguas arriba debe ser mayor que la DBO medida aguas abajo, son las siguientes:

$$k_r = v \left( \frac{\ln \frac{L_1}{L_2}}{x_2 - x_1} \right) \quad \text{Ec. [3.72]}$$

$$k_r = v \left( \frac{\ln \frac{Q_1 * L_1}{Q_2 * L_2}}{x_2 - x_1} \right) \quad \text{Ec. [3.73]}$$

donde,  $L_1$  y  $L_2$  son los valores de DBO medidos aguas arriba y aguas abajo, respectivamente, en una sección de la corriente;  $Q_1$  y  $Q_2$  son los caudales de la corriente aguas arriba y aguas abajo, respectivamente;  $x_2$  y  $x_1$  son las distancias a los puntos de muestreo considerados, desde la cabecera de la corriente; y  $v$  es la velocidad promedio de la corriente en el tramo considerado.

En relación con los valores típicos que puede tomar  $k_r$ , Novotny (2003) puntualiza que su rango de variación va de  $0,1 \text{ d}^{-1}$  a  $5 \text{ d}^{-1}$ , en dependencia de dos factores: el grado de biodegradabilidad del contenido de materia orgánica que se descarga al cuerpo de agua receptor, y las características hidráulicas de la corriente.

### 3.3.6 Corrección de la constante de desoxigenación por la temperatura

Es un hecho científico que la temperatura influye en el desarrollo de las reacciones químicas y biológicas; de modo que, en las ecuaciones cinéticas que las describen, sus efectos determinan la variabilidad de las constantes de reacción. Específicamente en relación con la cinética de la DBO, dado que su determinación en el laboratorio se hace de forma estandarizada a una temperatura de  $20^\circ\text{C}$ , usualmente es necesario corregir el valor de la constante de desoxigenación para obtener su valor correspondiente a la temperatura real de un cuerpo de agua particular en condiciones determinadas. Esta corrección se hace utilizando una expresión matemática deducida a partir de la ecuación de Arrhenius, con la siguiente notación:

$$k_{dT} = k_{d20} \theta^{T-20} \quad \text{Ec. [3.74]}$$

donde,  $T$  es la temperatura en el curso de agua ( $^{\circ}\text{C}$ ),  $k_{dT}$  y  $k_{d20}$  son los valores de la constante de desoxigenación a las temperaturas  $T$  y  $20^{\circ}\text{C}$ , respectivamente, y  $\theta$  es un coeficiente de temperatura adimensional, cuyo valor es 1,047 (Tchobanoglous y Schroeder, 1985; Schnoor, 1996), aunque Thomann y Mueller (1987) sugieren usar el valor de 1,04.

### 3.4 Reaireación

En la sección 3-2 se identificó a la reaireación como una de las fuentes de aporte del oxígeno disuelto en los cuerpos de agua, además de la fotosíntesis de las plantas acuáticas. En este apartado, se revisará el fenómeno como tal desde su concepción teórica hasta los diferentes modelos que se han propuesto para determinar el valor de la constante de reaireación que, como se verá en la siguiente sección, forma parte, juntamente con la constante de desoxigenación, de un modelo de calidad del agua basado en el balance de oxígeno disuelto.

#### **Definición 3.5**

**La reaireación** es un fenómeno natural que consiste en la absorción física del oxígeno en el agua desde la atmósfera en contacto, o la tasa de transferencia másica de oxígeno desde la atmósfera hacia un cuerpo de agua con superficie libre, que ocurre en la interface aire-agua, y que hace posible la reposición, generalmente parcial, del oxígeno que ha sido consumido durante la descomposición aerobia de la materia orgánica biodegradable.

#### 3.4.1 Formulación matemática

Aún en la actualidad, el fenómeno de reaireación se prefiere explicar en términos de la teoría de las dos películas de Lewis y Whitman (1924), consistente en la interacción entre dos superficies supuestas estacionarias (una gaseosa y otra líquida), las cuales constituyen los límites de interacción de una masa gaseosa y una masa líquida en régimen turbulento, conectadas mediante una interfase gas-líquido. El proceso se verifica en dos etapas: en la primera, el gas atraviesa la superficie de la fase gaseosa y satura la interfase gas-líquido; luego, en la segunda etapa, las moléculas

del gas atraviesan la película líquida y se difunden en el seno de la masa líquida. Se supone que la etapa limitante es la segunda, debido a que el paso por la película líquida opone mayor resistencia al paso del oxígeno que la película gaseosa (Martínez y Rodríguez, 2005).

Para llegar a la ecuación que expresa la tasa de transporte o transferencia de oxígeno al agua, es preciso indicar que (Lewis y Whitman, 1924) asumieron que la difusión molecular era el único mecanismo que influía en la transferencia de materia a través de las películas interfaciales, y que tal proceso obedecía la primera ley de Fick. De modo que, partiendo de la ecuación [2.1], que representa la primera ley de Fick como  $J = -D \left( \frac{\partial c}{\partial x_i} \right)$ , entonces si se asume la linealidad del gradiente de concentración  $\frac{\partial c}{\partial x_i}$  y la densidad superficial del flujo másico ( $J$ ) se sustituye por una expresión equivalente, entonces la ley de Fick se puede expresar como

$$\frac{q}{A} = -D_m \left( \frac{\Delta C}{\Delta x} \right) = -D_m \left( \frac{C - C_s}{\Delta x} \right) \quad \text{Ec. [3.75]}$$

$$q = AD_m \left( \frac{C_s - C}{x} \right) \quad \text{Ec. [3.76]}$$

Donde  $q$  es la tasa de transferencia del oxígeno a través de la superficie ( $\text{MT}^{-1}$ ),  $C_s$  es la concentración de saturación del oxígeno disuelto ( $\text{ML}^{-3}$ ),  $C$  es la concentración del oxígeno en la masa de agua ( $\text{ML}^{-3}$ ),  $D_m$  es el coeficiente de difusividad del oxígeno en el agua ( $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ),  $A$  es el área de la superficie que atraviesa el oxígeno ( $\text{L}^2$ ), y  $x$  representa el espesor de la película ( $\text{L}$ ).

Luego, reemplazando el cociente  $D_m/x$  por un nuevo coeficiente al que se denominará coeficiente de transferencia de oxígeno ( $K_L$ ), se obtiene

$$q = AK_L(C_s - C) \quad \text{Ec. [3.77]}$$

De acuerdo con Zison *et al.* (1978) la ecuación [3.77] se puede utilizar para determinar el flujo de oxígeno disuelto desde la atmósfera a un cuerpo de agua receptor sin importar si este se encuentra bien mezclado o no. Sin embargo, si se suponen que el cuerpo de agua está bien mezclado verticalmente, entonces la tasa de transferencia del oxígeno a través de la superficie  $q$ , puede expresarse como una tasa de acumulación de oxígeno disuelto debida a la reaireación; de modo que, para estas condiciones ideales, la ecuación [3.77] puede convertirse en

$$V \left( \frac{dC}{dt} \right) = AK_L(C_s - C) \quad \text{Ec. [3.78]}$$

Si se divide cada término de la ecuación [3.78] por el volumen, el cociente resultante  $A/V$  puede concebirse como la profundidad media  $H$ , de modo que

$$\frac{dC}{dt} = K_L H (C_s - C) \quad \text{Ec. [3.79]}$$

El producto  $K_L H$  se suele expresar como un coeficiente, cuya notación histórica ha sido  $k_2$  o  $k_a$ , y que constituye el denominado coeficiente de reaireación. En consecuencia, la tasa de reaireación podrá calcularse en función del coeficiente de reaireación y el gradiente de concentración:

$$\frac{dC}{dt} = k_a (C_s - C) \quad \text{Ec. [3.80]}$$

Como se indicó al principio de esta sección, en el contexto del balance del oxígeno disuelto en el agua, la reaireación es una fuente de oxígeno, por lo que, por conveniencia de la notación aceptada en este libro para la ecuación general del transporte, la ecuación [3.80] se deberá expresar como sigue

$$S_a = k_a (C_s - C) \quad \text{Ec. [3.81]}$$

La constante de reaireación depende de la velocidad del agua, la profundidad, el área superficial expuesta a la atmósfera, y la cantidad de materia orgánica biodegradable en la corriente (Spellman y Whiting, 2005). También influyen la turbulencia, la temperatura, la velocidad del viento y la presencia de rápidos o caídas de agua (Sierra, 2011).

### 3.4.2 Métodos para determinar $k_a$

Para la estimación de la constante de reaireación, se han propuesto diversos modelos, la mayoría de los cuales relacionan la velocidad de la corriente y la profundidad del agua, tal como Streeter lo propusiera en el año 1926, en su artículo *The Rate of Atmospheric Reaeration of Sewage Polluted Streams* (Streeter, 1926). No obstante, el punto de partida de los modelos más utilizados incluso hoy en día para la determinación de la constante de reaireación fue el trabajo de Walter J. Jr. Webber, quien, en el año 1972, en su libro titulado *Physicochemical processes for water quality control* (Weber, 1972), mediante el método del análisis dimensional, demostró que la constante de reaireación es una función de dos variables hidrodinámicas: la profundidad y la velocidad de la corriente, cada una de ellas elevada a cierta potencia (Zison *et al.*, 1978).

Aunque se han utilizado varios métodos para la determinación de la constante de reaireación, entre ellos los modelos conceptuales, los modelos semiempíricos y los modelos empíricos; estos últimos suelen ser los más utilizados en situaciones comunes de modelización de la calidad del agua. El primero de ellos fue establecido por Streeter y Phelps (1925) cuya ecuación se formuló de la siguiente forma:

$$k_a = Z \frac{U^n}{H'^2} \quad \text{Ec. [3.82]}$$

donde,  $Z$  es un coeficiente cuyo valor es función de un factor de irregularidad que cuantifica el número de cambios en la pendiente inferior de un canal que produce una elevación de 1 pie en el nivel del canal;  $n$  es

un coeficiente que se calcula mediante la expresión  $\eta = (\delta - 0,17)/(\delta - 1,17)$ , siendo  $\eta$  una medida del incremento medio de la velocidad por cada 1,5 m de aumento del nivel; y  $H'$  es la profundidad mínima en condiciones de estiaje. Los parámetros indicados son difíciles de estimar adecuadamente, y  $H'$  no se considera un parámetro de flujo verdadero, por lo que la ecuación [3.82] no tiene una capacidad predictiva generalizada (Bennett y Rathbun, 1971).

Dada la situación descrita, posteriores modelos mejoraron la predicción de los valores de  $k_a$  y las principales propuestas pertenecen a O'Connor y Dobbins (1958), Churchill, Elmore y Buckingham (1962), y Owens, Edwards y Gibbs (1964), cuyos modelos se presentan en ese orden a continuación:

$$\begin{array}{l} \text{O'Connor y} \\ \text{Dobbins} \end{array} \quad k_a = 3,93 \frac{v^{0,5}}{H^{1,5}} \quad \text{Ec. [3.83]}$$

$$\begin{array}{l} \text{Churchill,} \\ \text{Elmore y} \\ \text{Buckingham} \end{array} \quad k_a = 5,026 \frac{v}{H^{1,67}} \quad \text{Ec. [3.84]}$$

$$\begin{array}{l} \text{Owens,} \\ \text{Edwards y} \\ \text{Gibbs} \end{array} \quad k_a = 5,32 \frac{v^{0,67}}{H^{1,85}} \quad \text{Ec. [3.85]}$$

La tabla 3-6 expone las condiciones bajo las cuales fueron establecidas las fórmulas de la constante de reaireación, incluyendo una brevísima descripción de su método, los caudales de las corrientes consideradas, y los rangos de profundidad, denotada por  $H$ , y de velocidad,  $v$ , a los cuales son aplicables:

**Tabla 3-5 Métodos y valores representativos de aplicación para las fórmulas empíricas más comunes**

Autores	Método	Q (m <sup>3</sup> /s)	H (m)	v (m/s)
O'Connor y Dobbins	Con base en el modelo conceptual denominado <i>Modelo de renovación superficial</i> , cuya ecuación para la tasa de transferencia de oxígeno es $K_1 = \sqrt{r_1 D_1}$ propusieron que la tasa de renovación superficial $r_1$ era equivalente al cociente $U/H$ , y apoyados en mediciones experimentales llegaron a la ecuación final de su modelo con la notación $K_2 = \sqrt{D_1} \left( \frac{U^{0.5}}{H^{1.5}} \right)$ , utilizando un valor de $2,09 \times 10^{-5}$ cm <sup>2</sup> /s para el coeficiente de difusividad del oxígeno $D_1$ .	—	0,30 – 9,14	0,15 – 0,49
Churchill, Elmore y Buckingham	Realizaron 109 mediciones de $k_a$ en 30 situaciones diferentes de flujo promedio, a lo largo de 16 tramos de cinco ríos localizados aguas abajo de represas en condiciones de DBO despreciable y déficit de OD. Al final, aunque aplicaron muchos análisis de regresión múltiple, seleccionaron la ecuación más simple, debido a que ninguna de los modelos predictivos resultó ser estadísticamente superior.	27 - 489	0,61 – 3,35	0,55 – 1,52
Owens, Edwards y Gibbs	Hicieron 21 mediciones de $k_a$ en 21 tramos de seis corrientes en Inglaterra, utilizando el método de desoxigenación de equilibrio alterado. Sin embargo, incluyeron también seis valores determinados por Gameson, A. L. H. Truesdale y Downing (1955), y 38 de Churchill, Elmore y Buckingham (1962), esto es un total de 68 observaciones de $k_a$ para obtener la ecuación [3.82] mediante un análisis de regresión múltiple.	0,04 - 10,2	0,12 – 0,73	0,03 – 0,55

Fuente: Bennett y Rathbun (1971); Chapra (2008)

Realizando una comparación entre las fórmulas citadas, basándose en gráficos generados en el estudio de Andrew P. Cover publicado en el año 1976 bajo el título *Selecting the Proper Reaeration Coefficient for Use in Water Quality Models* (Covar, 1976), es posible recomendar que (a) la ecuación de O'Connor y Dobbins se utilice en corrientes profundas y de

velocidad entre moderada y alta; (b) la ecuación de Churchill se debería emplear también para corrientes de gran profundidad, pero de mayores velocidades que en el caso anterior; y (c) la ecuación de Owens aplica cuando se evalúe la constante de reaeración de corrientes someras (Zison *et al.*, 1978; Chapra, 2008).

Otra de las fórmulas empleadas para la determinación de  $k_a$  es la propuesta por Langbein y Durum (1967), empleados del US Geological Survey, quienes resumieron el trabajo precedente de O'Connor y Dobbins (1958), y Churchill, Elmore y Buckingham (1962), y combinaron sus resultados con datos de laboratorio obtenidos por Krenkel y Orlob (1963), y Streeter, Wright y Kehr (1936). Luego, concluyeron que la mejor formulación para determinar el factor de reaeración debía ser aquella que utilizara información sobre las velocidades y secciones transversales de la corriente, proponiendo el modelo siguiente (Bennett and Rathbun, 1971; Lin, 2014):

$$k_a = 5,13 \left( \frac{v}{H^{1,33}} \right) \quad \text{Ec. [3.86]}$$

#### NOTA DE INTERÉS

En relación con los modelos propuestos para calcular  $k_a$ , es importante advertir que estos arrojan valores cercanos a cero a medida que la profundidad del curso de agua se incrementa, lo que significaría que para corrientes muy profundas la reaeración es despreciable; no obstante, esto no es cierto, ya que cuando la corriente es lenta, el viento predomina como el factor promovedor de la reaeración en el agua. Por tal razón, la constante de reaeración tiene un valor mínimo en  $0,6/\bar{h}$ , donde  $\bar{h}$  es la profundidad media del cuerpo de agua (Hydroscience, 1971; Chin, 2013).

Además de las fórmulas empíricas citadas, Zison *et al.* (1978) propone un método para estimar el valor de  $k_a$ , basado en un balance de masa para el oxígeno disuelto. Así, menciona que Churchill, Elmore y Buckingham (1962), con este criterio expresaron  $k_a$  en términos del déficit de oxígeno disuelto medido en dos puntos diferentes en una corriente de agua superficial, mediante la ecuación [3.84], donde  $D_o$  es el déficit de oxígeno aguas arriba del sitio (mg/l),  $D_t$  es el déficit de oxígeno aguas abajo (mg/l), y  $t$  es el

tiempo de viaje entre los dos puntos (d):

$$k_a = \frac{\ln D_0 - \ln D_t}{t} \quad \text{Ec. [3.87]}$$

Finalmente, cuando la temperatura de la corriente sea diferente de 20°C se utilizará una ecuación de tipo Arrhenius con el formato de la [3.74] para ajustar el valor de la constante de reaireación, utilizando un valor de 1,024 para el coeficiente de temperatura  $\theta$ , como sigue

$$k_{aT} = k_{a20}(1,024)^{T-20} \quad \text{Ec. [3.88]}$$

### 3.4.3 Valores representativos y corrección por la temperatura

El valor de la constante de reaireación es más alto en corrientes someras y rápidas, y por lo tanto, dicha corriente se purifica más rápidamente de lo que lo hará una corriente profunda y lenta (Spellman y Whiting, 2005). No obstante, los valores típicos de la constante de reaireación a 20 °C, se presentan en la tabla 3-7:

Tabla 3-6 Valores típicos de la constante de reaireación

Cuerpo de agua	K <sub>a</sub> a 20 °C (d <sup>-1</sup> )
Estanques pequeños y remansos	0,10 – 0,23
Corrientes lentas y lagos de gran tamaño	0,23 – 0,35
Grandes corrientes de baja velocidad	0,35 – 0,46
Grandes corrientes de velocidad normal	0,46 – 0,69
Corrientes rápidas	0,69 – 1,15
Cascadas y torrentes	>1,15

Fuente: Tchobanoglous y Schroeder (1985)

### 3.4.4 Saturación del oxígeno disuelto

En el diseño y aplicación de modelos de calidad del agua basados en el balance del oxígeno disuelto, uno de los elementos más determinantes en su capacidad predictiva es la concentración de saturación que se expresa en porcentaje. En consecuencia, y tomando en cuenta la ecuación [3.81],

de la precisión de su determinación dependerá la minimización del error en la estimación de la tasa de reaireación.

### **Definición 3.6**

**La concentración de saturación de oxígeno disuelto** es la cantidad porcentual de oxígeno existente en disolución en el agua bajo determinadas condiciones de temperatura, salinidad y presión atmosférica, en relación con la capacidad teórica límite de solubilidad del oxígeno en un cuerpo de agua, o 100% de saturación, que ocurre cuando este se encuentra en equilibrio completamente saturado con la atmósfera.

Resulta evidente de su definición, que el porcentaje de saturación de oxígeno disuelto de esos tres factores ambientales. En este contexto, es un hecho científico que la solubilidad del oxígeno en el agua es inversamente proporcional tanto a la temperatura como a la salinidad; esto es, una mayor temperatura y una concentración alta de sales implica una menor concentración de oxígeno disuelto en el agua, y viceversa. Por el contrario, la concentración de saturación del oxígeno disuelto varía de forma directa con la presión atmosférica o, en otras palabras, en cuerpos de agua a nivel del mar la solubilidad del oxígeno será mayor que en las regiones geográficas altas.

Uno de los modelos matemáticos más empleado en la determinación de la concentración de saturación del oxígeno disuelto es la denominada ecuación de Benson-Krause, quienes la propusieron en 1980 como resultado de su trabajo de investigación de disolución de gases en el agua dulce en equilibrio con la atmósfera, aplicable a un rango de temperatura entre 0°C y 40°C y un intervalo de presión atmosférica de 0,5 a 1,1 atm. Sin embargo, esta ecuación tiene su origen en una expresión logarítmica del tipo función generalizada de Valentiner, que propusieron en un trabajo previo de 1976, para el cálculo de constantes de equilibrio, bajo la forma (Benson y Krause, 1980)

$$\ln k = a_0 + \frac{a_1}{T} + \frac{a_2}{T^2} + \frac{a_3}{T^3} + \dots \quad \text{Ec. [3.89]}$$

Aplicando la expresión anterior al cálculo de la saturación del oxígeno disuelto en el agua, Benson y Krause (1980) establecieron la siguiente ecuación:

$$\ln OD_s = -139,34411 + \frac{1,575701 \times 10^5}{T} - \frac{6,642308 \times 10^7}{T^2} + \frac{1,243800 \times 10^{10}}{T^3} - \frac{8,621949 \times 10^{11}}{T^4} \quad \text{Ec. [3.90]}$$

donde,  $OD_s$  es la concentración de saturación del oxígeno disuelto, y  $T$  es la temperatura absoluta del agua, en K.

Indudablemente, para determinar el valor de  $OD_s$  a partir de la ecuación [3.90], se debe aplicar la función exponencial en ambos lados, de modo que

$$OD_s = \exp \left[ -139,34411 + \frac{1,575701 \times 10^5}{T} - \frac{6,642308 \times 10^7}{T^2} + \frac{1,243800 \times 10^{10}}{T^3} - \frac{8,621949 \times 10^{11}}{T^4} \right] \quad \text{Ec. [3.91]}$$

No obstante, como ya se indicó, la presión atmosférica también modifica el valor de saturación del oxígeno en el agua, entonces la corrección de valor de saturación se puede calcular mediante la ecuación propuesta también por (Benson y Krause, 1980):

$$OD_s^p = OD_s P \left[ \frac{\left(1 - \frac{P_{wv}}{P}\right) (1 - \theta_0 P)}{(1 - P_{wv})(1 - \theta_0)} \right] \quad \text{Ec. [3.92]}$$

donde,  $OD_s^p$  es la concentración de saturación de oxígeno disuelto a una presión atmosférica particular  $P$  (atm),  $P_{wv}$  es la presión parcial del vapor de agua (atm), y  $\theta_0$  es el segundo coeficiente de presión en la expansión virial del comportamiento de gas real del oxígeno, que los autores citados utilizaron con base en los resultados de un reporte de tres investigadores del Centro Arnold de desarrollo de ingeniería de la Fuerza Aérea de los Estados

Unidos (AEDC, por sus siglas en inglés) bajo el título *Pressure-Volume-Temperature Relationships of Gases: Virial Coefficients* (Sengers, Klein y Gallagher, 1971). Como resulta evidente, el cálculo de  $OD_s^p$  con la ecuación [3.92] requiere la determinación previa de  $P_{wv}$  y  $\theta_0$ , para lo cual Benson y Krause (1980) establecieron las siguientes expresiones, respectivamente:

$$P_{wv} = \exp \left[ 11,8571 - \left( \frac{3840,70}{T} \right) - \left( \frac{216961}{T^2} \right) \right] \quad \text{Ec. [3.93]}$$

$$\theta_0 = 9,75 \times 10^{-4} - 1,426 \times 10^{-5}T + 6,436 \times 10^{-8}T^2 \quad \text{Ec. [3.94]}$$

### 3.5 Modelo de Streeter-Phelps

Como se recordará de la información contextual preliminar sobre los modelos matemáticos de calidad del agua presentada en la introducción del presente capítulo, como resultado de una investigación de la contaminación y capacidad de autodepuración del río Ohio, Harold Streeter y Earle Phelps propusieron en el año 1925 un modelo matemático basado en el balance del oxígeno disuelto en una corriente concebido simplemente como el resultado neto de la interacción de una fuente y un sumidero: la reaireación y la desoxigenación, respectivamente. Con el paso de los años, el modelo se amplió para abarcar otros sumideros que influyen en el balance, tales como la demanda bentónica de oxígeno, que se revisará brevemente en páginas posteriores.

#### 3.5.1 Formulación matemática del modelo clásico de Streeter-Phelps

La deducción del modelo de Streeter-Phelps se desarrolla a partir de la ecuación de advección-dispersión [2.65], considerando que el término  $S_m$  (fuentes y sumideros) representa el flujo total de oxígeno en el agua, concebido como la suma de las tasas de desoxigenación y reaireación,  $S_d$  y  $S_a$ , respectivamente, de acuerdo con las ecuaciones [3.45] y [3.81]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} = K_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + (S_d + S_a) \quad \text{Ec. [3.95]}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} = K_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - k_d L + k_a (C_s - C) \quad \text{Ec. [3.96]}$$

Uno de los supuestos básicos del modelo es el estado estacionario del sistema; además, es posible ignorar el transporte dispersivo de la corriente por ser despreciable en comparación con la advección; por lo tanto, la ecuación [3.96] se simplifica como sigue

$$v \frac{\partial C}{\partial x} = -k_d L + k_a (C_s - C) \quad \text{Ec. [3.97]}$$

### Definición 3.7

**El déficit de oxígeno disuelto**, denotado por  $D$ , es la diferencia entre el valor de saturación del oxígeno disuelto y su valor real medido en un cuerpo de agua; o, en otras palabras, es la cantidad de oxígeno disuelto que hace falta en el agua para alcanzar los niveles teóricos de saturación, y se produce cuando la tasa de desoxigenación es mayor que la tasa de reaireación.

Como se observa en la definición 3.7, es posible sustituir la diferencia  $C_s - C$  de la ecuación [3.97] por una nueva variable denominada déficit de oxígeno disuelto  $D$ , que, consecuentemente, sustituirá a  $C$  en el término izquierdo de la derivada parcial; entonces se tiene que

$$v \frac{\partial D}{\partial x} = K_d L - K_a D \quad \text{Ec. [3.98]}$$

La ecuación diferencial parcial [3.98] puede expresarse para una derivada total, advirtiendo que la concentración del déficit de oxígeno disuelto sólo variará en función de la distancia aguas abajo en la corriente; luego, si además se divide cada término por la velocidad de la corriente se obtiene

$$\frac{dD}{dx} = \left(\frac{k_d}{v}\right)L - \left(\frac{k_a}{v}\right)D \quad \text{Ec. [3.99]}$$

Recuerde que  $L$  es la demanda remanente de oxígeno, cuyo valor se calcula mediante la ecuación [3.8],  $L = L_0 e^{-k_a t}$ ; sin embargo, si ésta se amplía para abarcar, no sólo la remoción de DBO por desoxigenación, sino

también por sedimentación, entonces la constante de reacción  $k_d$  se reemplaza por  $k_r$ , y si además el tiempo  $t$  se sustituye por una expresión equivalente como el cociente entre la distancia aguas abajo  $x$  y la velocidad de la corriente  $v$ , entonces se tiene que

$$L = L_0 e^{-k_r \left(\frac{x}{v}\right)} \quad \text{Ec. [3.100]}$$

Luego, introduciendo la ecuación [3.100] dentro de [3.99], la derivada del déficit con respecto a la distancia adquiere la forma

$$\frac{dD}{dx} = \left(\frac{k_d}{v}\right) L_0 e^{-k_r \left(\frac{x}{v}\right)} - \left(\frac{k_a}{v}\right) D \quad \text{Ec. [3.101]}$$

Conviene ahora expresar la ecuación [3.101] bajo el arreglo de una ecuación diferencial lineal de primer orden en su forma estándar  $\frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x)$ ; así que

$$\frac{dD}{dx} + \left(\frac{k_a}{v}\right) D = \left(\frac{k_d}{v}\right) L_0 e^{-k_r \left(\frac{x}{v}\right)} \quad \text{Ec. [3.102]}$$

Así expresada la ecuación [3.102] se resuelve empleando el factor de integración  $e^{\int P(x)dx} = e^{\int \frac{k_a}{v} dx} = e^{\frac{k_a x}{v}}$ , mediante el procedimiento cuyos pasos sucesivos se muestran a continuación:

$$\frac{dD}{dx} \left( e^{\frac{k_a x}{v}} \right) + \left(\frac{k_a}{v}\right) D \left( e^{\frac{k_a x}{v}} \right) = \left(\frac{k_d}{v}\right) L_0 e^{-k_r \frac{x}{v}} \left( e^{\frac{k_a x}{v}} \right) \quad \text{Ec. [3.103]}$$

$$\frac{d}{dx} \left( D \cdot e^{\frac{k_a x}{v}} \right) = \left(\frac{k_d L_0}{v}\right) \left( e^{\frac{-k_r x}{v}} \right) \left( e^{\frac{k_a x}{v}} \right) \quad \text{Ec. [3.104]}$$

$$\int d \left( D \cdot e^{\frac{k_a x}{v}} \right) = \left(\frac{k_d L_0}{v}\right) \int \left[ e^{\frac{(k_a - k_r)x}{v}} \right] dx \quad \text{Ec. [3.105]}$$

$$D \left( e^{\frac{k_a x}{v}} \right) = \left(\frac{k_d L_0}{v}\right) \left(\frac{v}{k_a - k_r}\right) \left[ e^{\frac{(k_a - k_r)x}{v}} \right] + c \quad \text{Ec. [3.106]}$$

$$D \left( e^{\frac{k_a x}{v}} \right) = \left(\frac{k_d L_0}{k_a - k_r}\right) \left[ e^{\frac{(k_a - k_r)x}{v}} \right] + c \quad \text{Ec. [3.107]}$$

El valor de la constante de integración  $c$  se calcula para condiciones de contorno donde  $D = D_0$  cuando  $x = 0$ , así que

$$D_0(e^0) = \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) [e^0] + c \quad \text{Ec. [3.108]}$$

Luego, despejando  $c$ , el valor de la constante de integración se expresa literalmente como

$$c = D_0 - \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \quad \text{Ec. [3.109]}$$

Introduciendo la expresión de la constante de integración en la ecuación [3.107], el procedimiento final de la resolución de la ecuación diferencial para el déficit de oxígeno disuelto se desarrolla consecutivamente de la siguiente forma:

$$D \left( e^{\frac{k_a x}{v}} \right) = \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \left[ e^{\frac{(k_a - k_r)x}{v}} \right] + D_0 - \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \quad \text{Ec. [3.110]}$$

$$D = \frac{\left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \left[ e^{\frac{(k_a - k_r)x}{v}} \right]}{\left( e^{\frac{k_a x}{v}} \right)} + \frac{D_0}{\left( e^{\frac{k_a x}{v}} \right)} - \frac{\left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right)}{\left( e^{\frac{k_a x}{v}} \right)} \quad \text{Ec. [3.111]}$$

$$D = \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \left( e^{-\frac{k_r x}{v}} \right) + D_0 \left( e^{-\frac{k_a x}{v}} \right) - \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \left( e^{-\frac{k_a x}{v}} \right) \quad \text{Ec. [3.112]}$$

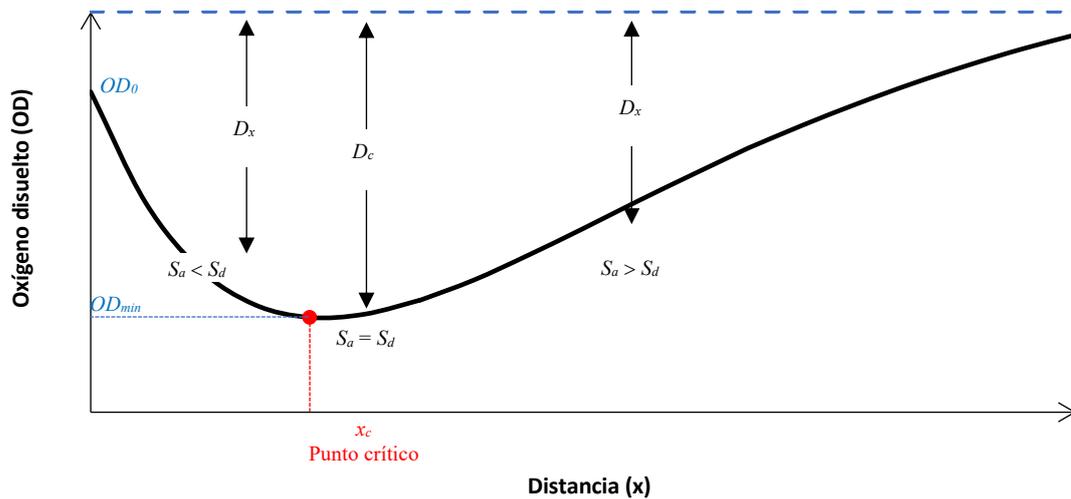
$$\therefore D = D_0 \left( e^{-\frac{k_a x}{v}} \right) + \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \left[ e^{-\frac{k_r x}{v}} - e^{-\frac{k_a x}{v}} \right] \quad \text{Ec. [3.113]}$$

La ecuación [3.113] constituye el modelo original de Streeter y Phelps (1925), el primer modelo matemático propuesto para describir el agotamiento o decaimiento del oxígeno disuelto en corrientes, asumiendo que la oxidación de la materia orgánica ocurre de acuerdo con una cinética de primer orden. No obstante, la validez del modelo se sostiene en los siguientes supuestos básicos:

- a) la fuente predominante de aporte de oxígeno es la reaireación;

- b) el sumidero predominante para la eliminación del oxígeno disuelto en la corriente es la oxidación de la materia orgánica carbonosa;
- c) aunque otros mecanismos del balance del oxígeno disuelto en el agua puedan resultar importantes, el modelo original ignora el efecto de la nitrificación, la demanda de oxígeno por los sedimentos del lecho (demanda bentónica), la respiración, y la fotosíntesis;
- d) el modelo funciona para una fuente puntual simple de DBO, por lo que las posibles fuentes no puntuales o distribuidas son omitidas;
- e) la corriente se encuentra en estado estacionario y, concebida como un canal recto unidimensional, se puede modelizar mediante la cinética de un reactor de flujo pistón;
- f) las características hidrodinámicas y geométricas de la corriente permanecen constantes o experimentan variaciones de magnitud despreciable.

La gráfica de la ecuación de Streeter-Phelps se conoce con el nombre de la **curva sag de oxígeno**, y representa el perfil de variación del OD como función de la distancia desde una fuente puntual de DBO,  $x$  (Figura 3-6). Su forma explica cómo el oxígeno comienza a consumirse desde que la materia orgánica ingresa a la corriente de agua y, por lo tanto, el déficit de oxígeno inicial,  $D_0$ , incrementa su valor a  $D_x$ , proporcionalmente a la tasa de reaireación, hasta una distancia  $x_c$ , conocida como punto crítico, donde se igualan la tasa de reaireación y la tasa de desoxigenación y, consecuentemente, el oxígeno disuelto alcanza su valor mínimo de concentración. A partir de este punto, el oxígeno empieza a recuperarse debido a que la tasa de reaireación supera a la de consumo, tendiendo hacia el valor de saturación en un proceso denominado comúnmente como capacidad de autodepuración de las corrientes naturales.



**Figura 3-6** Curva sag típica del oxígeno disuelto.

El trazado de la denominada curva sag requiere convertir los valores de déficit de oxígeno disuelto obtenidos mediante el modelo de Streeter-Phelps en concentraciones en función de la distancia, mediante la siguiente relación:

$$OD_x = OD_s - D_x \quad \text{Ec. [3.114]}$$

### 3.5.2 Tiempo y déficit críticos

La figura 3-6 reveló el significado y la ubicación del punto crítico, también llamado distancia crítica, en la curva sag del oxígeno disuelto. No obstante, es posible desglosar el punto crítico en dos componentes: el tiempo y el déficit críticos.

#### **Definición 3.7**

**El punto crítico**, o distancia crítica, es la longitud existente entre el punto de la descarga de aguas residuales y la coordenada aguas abajo ( $x_c$ ) que se corresponde con el valor mínimo del oxígeno disuelto ( $OD_{min}$ ) en la corriente, como resultado del descenso de su concentración causada por el consumo de oxígeno en el proceso de degradación aerobia de la materia orgánica que ingresa a la corriente en la fuente de contaminación.

El tiempo crítico, denotado por  $t_c$ , es el tiempo de viaje de la corriente desde la fuente de contaminación (descarga de aguas residuales) hasta el punto crítico. Su valor se calcula mediante la ecuación que se deduce a

partir del modelo de Streeter-Phelps (ecuación [3.113]), igualando a cero la derivada del déficit con respecto al tiempo,  $dD/dt$ , con base en el teorema de los valores extremos, una de las aplicaciones más importantes de la derivada, que permite encontrar el valor mínimo de una función derivable. Por lo tanto, haciendo cero el valor de  $dD/dt$ , se obtiene secuencialmente lo siguiente:

$$\frac{dD}{dt} = \frac{d}{dx} \left[ D_0 \left( e^{-\frac{k_a x}{v}} \right) + \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \left( e^{-\frac{k_r x}{v}} - e^{-\frac{k_a x}{v}} \right) \right] \quad \text{Ec. [3.115]}$$

$$0 = D_0 \frac{d}{dx} \left( e^{-\frac{k_a x}{v}} \right) + \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \frac{d}{dx} \left( e^{-\frac{k_r x}{v}} - e^{-\frac{k_a x}{v}} \right) \quad \text{Ec. [3.116]}$$

$$0 = D_0 \left( e^{-\frac{k_a x}{v}} \right) \left( \frac{-k_a}{v} \right) + \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \left[ \left( e^{-\frac{k_r x}{v}} \right) \left( \frac{-k_r}{v} \right) + \left( e^{-\frac{k_a x}{v}} \right) \left( \frac{-k_a}{v} \right) \right] \quad \text{Ec. [3.117]}$$

$$-\frac{\left[ \left( e^{-\frac{k_r x}{v}} \right) \left( \frac{-k_r}{v} \right) - \left( e^{-\frac{k_a x}{v}} \right) \left( \frac{k_a}{v} \right) \right]}{\left( e^{-\frac{k_a x}{v}} \right) \left( \frac{-k_a}{v} \right)} = \frac{D_0 (k_a - k_r)}{k_d L_0} \quad \text{Ec. [3.118]}$$

$$\frac{\left( e^{-\frac{k_r x}{v}} \right) k_r}{\left( e^{-\frac{k_a x}{v}} \right) k_a} - 1 = -\frac{D_0 (k_a - k_r)}{k_d L_0} \quad \text{Ec. [3.119]}$$

$$e^{\frac{x}{v}(k_a - k_r)} = \left( \frac{k_a}{k_r} \right) \left[ 1 - \frac{D_0 (k_a - k_r)}{k_d L_0} \right] \quad \text{Ec. [3.120]}$$

$$\ln e^{\frac{x(k_a - k_r)}{v}} = \ln \left\{ \frac{k_a}{k_r} \left[ 1 - \frac{D_0 (k_a - k_r)}{k_d L_0} \right] \right\} \quad \text{Ec. [3.121]}$$

$$\frac{x}{v} = \frac{1}{k_a - k_r} \ln \left\{ \frac{k_a}{k_r} \left[ 1 - \frac{D_0 (k_a - k_r)}{k_d L_0} \right] \right\} \quad \text{Ec. [3.122]}$$

$$\therefore t_c = \frac{1}{k_a - k_r} \ln \left\{ \frac{k_a}{k_r} \left[ 1 - \frac{D_0 (k_a - k_r)}{k_d L_0} \right] \right\} \quad \text{Ec. [3.123]}$$

La distancia crítica se obtiene despejando  $x$  de la ecuación [3.122]; esto es

$$\therefore x_c = \frac{v}{k_a - k_r} \ln \left\{ \frac{k_a}{k_r} \left[ 1 - \frac{D_0 (k_a - k_r)}{k_d L_0} \right] \right\} \quad \text{Ec. [3.124]}$$

Otro de los componentes del punto crítico es el déficit crítico  $D_c$ , cuya ecuación se deduce a partir de la ecuación [3.101], haciendo que  $\frac{dD}{dx}$  sea igual a cero, de modo que el déficit  $D$  se convierta en el déficit crítico  $D_c$ , y que la distancia se sustituya por la ecuación [3.124] de la distancia crítica. Los pasos sucesivos del procedimiento deductivo se muestran a continuación:

$$\frac{dD}{dx} = \left(\frac{k_d}{v}\right) L_0 e^{-k_r\left(\frac{x_c}{v}\right)} - \left(\frac{k_d}{v}\right) D_c = 0 \quad \text{Ec. [3.125]}$$

$$\left(\frac{k_d}{v}\right) D_c = \left(\frac{k_d}{v}\right) L_0 e^{\frac{-k_r}{k_a - k_r} \ln\left\{\frac{k_a}{k_r} \left[1 - \frac{D_0(k_a - k_r)}{k_d L_0}\right]\right\}} \quad \text{Ec. [3.126]}$$

$$D_c = \left(\frac{k_d}{k_a}\right) L_0 e^{\ln\left\{\frac{k_a}{k_r} \left[1 - \frac{D_0(k_a - k_r)}{k_d L_0}\right]\right\}^{\frac{-k_r}{k_a - k_r}}} \quad \text{Ec. [3.127]}$$

$$\therefore D_c = \frac{k_d L_0}{k_a} \left\{ \frac{k_a}{k_r} \left[ 1 - \frac{D_0(k_a - k_r)}{k_d L_0} \right] \right\}^{\frac{-k_r}{k_a - k_r}} \quad \text{Ec. [3.128]}$$

Sin embargo, si se cuenta con el valor de la distancia crítica, conviene simplificar la ecuación del déficit crítico, expresándola en función de tal valor a partir de la ecuación [3.125]. En consecuencia, una forma rápida de la ecuación del déficit crítico es

$$D_c = \frac{k_d L_0}{k_a} e^{-k_r\left(\frac{x_c}{v}\right)} \quad \text{Ec. [3.129]}$$

Finalmente, el valor mínimo de oxígeno disuelto ( $OD_{min}$ ) se podrá calcular restando el déficit crítico del valor de saturación, esto es, adaptando la ecuación [3.114] a la situación de valores críticos. Por lo tanto,

$$OD_{min} = OD_s - D_c \quad \text{Ec. [3.130]}$$

### Ejercicio 3.3

Una industria descarga sus efluentes en un río a razón de 50 l/s, con una  $DBO_u$  de 200 mg/l, una temperatura de 35°C y una cantidad despreciable de OD. Antes de la mezcla con las aguas residuales (aguas arriba) el río fluye con un caudal de 1,15 m<sup>3</sup>/s y una velocidad de 5 cm/s; además sus aguas se caracterizan por valores promedios de  $DBO_u$ , OD y temperatura de 5 mg/l, 7 mg/l y 25°C, respectivamente. Si la constante de reaireación a

20°C tiene un valor de 0,25 d<sup>-1</sup>, la constante de desoxigenación es 0,30 d<sup>-1</sup>, también a 20°C, y la remoción de la DBO debido a la sedimentación es insignificante, determine (a) la distancia crítica, (b) el tiempo crítico, (c) el déficit crítico y (d) el OD mínimo.

**Solución:**

En primer lugar, se debe aplicar un balance de masa en el punto de encuentro de la corriente del río con la descarga de aguas residuales, utilizando la ecuación [1.48] del capítulo 1, obteniéndose así los valores iniciales de DBO y OD, incluyendo la temperatura resultante de la mezcla:

$$DBO_0 = \frac{Q_r \cdot DBO_r + Q_d \cdot DBO_d}{Q_r + Q_d} = \frac{\left(1,15 \frac{m^3}{s}\right) \left(5 \frac{mg}{l}\right) + \left(0,050 \frac{m^3}{s}\right) \left(200 \frac{mg}{l}\right)}{1,15 \frac{m^3}{s} + 0,050 \frac{m^3}{s}} = 13,13 \frac{mg}{l}$$

$$OD_0 = \frac{Q_r \cdot OD_r + Q_d \cdot OD_d}{Q_r + Q_d} = \frac{\left(1,15 \frac{m^3}{s}\right) \left(7 \frac{mg}{l}\right) + \left(0,050 \frac{m^3}{s}\right) \left(0 \frac{mg}{l}\right)}{1,15 \frac{m^3}{s} + 0,050 \frac{m^3}{s}} = 6,71 \frac{mg}{l}$$

$$T = \frac{Q_r \cdot T_r + Q_d \cdot T_d}{Q_r + Q_d} = \frac{\left(1,15 \frac{m^3}{s}\right) (25^\circ C) + \left(0,050 \frac{m^3}{s}\right) (35^\circ C)}{1,15 \frac{m^3}{s} + 0,050 \frac{m^3}{s}} = 25,42^\circ C$$

Las constantes de desoxigenación y reaireación deben corregirse a la temperatura del río después de la mezcla, mediante las ecuaciones [3.74] y [3.88], respectivamente. Entonces se tiene que

$$k_{dT} = k_{d20} (1,047)^{T-20} = 0,30 \text{ d}^{-1} (1,047)^{25,42-20} = 0,38 \text{ d}^{-1}$$

$$k_{aT} = k_{a20} (1,024)^{T-20} = 0,25 \text{ d}^{-1} (1,024)^{25,42-20} = 0,28 \text{ d}^{-1}$$

$$k_r = k_d = 0,38 \text{ d}^{-1}$$

(a) La distancia crítica se calcula mediante la ecuación [3.124] como sigue

$$x_c = \frac{0,05 \frac{m}{s} \left(\frac{86400 \text{ s}}{1 \text{ d}}\right)}{0,28 \text{ d}^{-1} - 0,38 \text{ d}^{-1}} \ln \left\{ \frac{0,28 \text{ d}^{-1}}{0,38 \text{ d}^{-1}} \left[ 1 - \frac{1,54 \frac{mg}{l} (0,28 \text{ d}^{-1} - 0,38 \text{ d}^{-1})}{(0,38 \text{ d}^{-1}) \left(13,13 \frac{mg}{l}\right)} \right] \right\} = 11921 \text{ m}$$

(b) El tiempo crítico se puede calcular mediante la ecuación [3.123]; sin embargo, hay un atajo válido y sencillo que consiste en calcularlo mediante la división entre la distancia crítica y la velocidad de la corriente; esto es

$$t_c = \frac{x_c}{v} = \frac{11921 \text{ m}}{0,05 \frac{m}{s} \left(\frac{86400 \text{ s}}{1 \text{ d}}\right)} = 2,76 \text{ d}$$

(c) El déficit crítico se puede calcular tanto con la ecuación [3.128] como con la [3.129], pero, en este caso, se lo hará mediante la última ecuación indicada por haberse calculado previamente la distancia crítica y el hecho de que sea la expresión más sencilla de las dos. Luego,

$$D_c = \frac{(0,38 \text{ d}^{-1}) \left(13,13 \frac{mg}{l}\right)}{0,28 \text{ d}^{-1}} e^{-0,38 \text{ d}^{-1} \left[\frac{11879 \text{ m}}{0,05 \frac{m}{s} \left(\frac{86400 \text{ s}}{1 \text{ d}}\right)}\right]} = 6,24 \frac{mg}{l}$$

(d) El OD mínimo se obtiene mediante la diferencia entre su valor de saturación y el déficit crítico, tal como lo expresa la ecuación [3.130]. Para ello, previamente, es preciso aplicar la ecuación Ec. [3.91] para calcular la concentración de saturación del oxígeno disuelto en relación con la temperatura resultante después de la mezcla expresada en kelvin. De modo que,

$$OD_s = \exp \left[ -139,34411 + \frac{1,575701 \times 10^5}{(298,57 K)} - \frac{6,642308 \times 10^7}{(298,57 K)^2} + \frac{1,243800 \times 10^{10}}{(298,57 K)^3} - \frac{8,621949 \times 10^{11}}{(298,57 K)^4} \right]$$

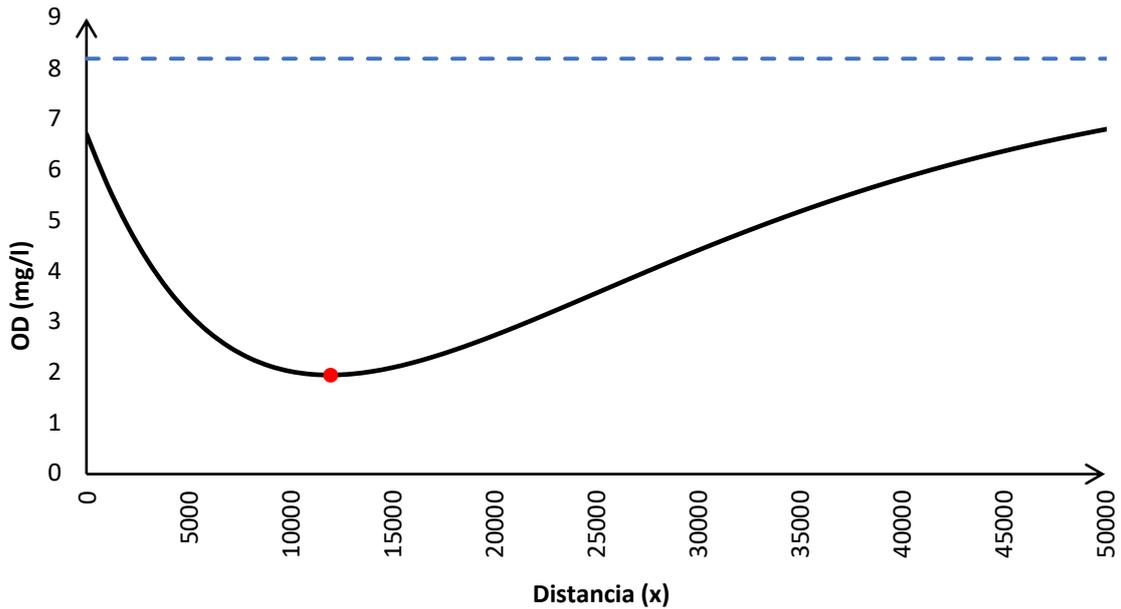
$$OD_s = 8,20 \frac{mg}{l}$$

Consecuentemente,

$$OD_{min} = 8,20 \frac{mg}{l} - 6,24 \frac{mg}{l}$$

$$\therefore OD_{min} = 1,96 \frac{mg}{l}$$

Los puntos que forman la curva sag resultante y su relación con el déficit y tiempo de viaje de la corriente deben corresponder a los siguientes valores:



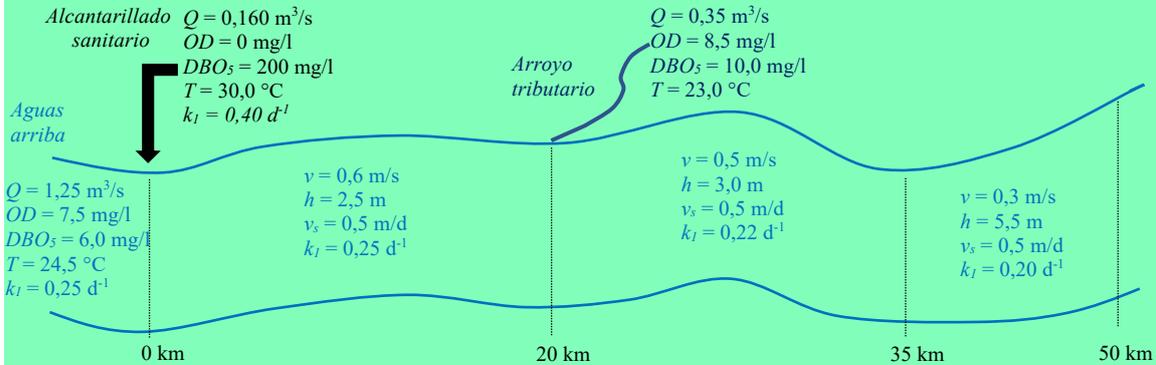
**Figura 3-7** Perfil de oxígeno disuelto con ubicación del punto crítico resultante del ejercicio 3.3.

El trazado de la curva sag mostrada está basado en los cálculos mostrados en la siguiente tabla, donde se muestra la variación del oxígeno disuelto en función de la distancia, incluyendo la variación del déficit de oxígeno y el tiempo de viaje de la corriente:

$x$ (m)	$t$ (d)	$D$ (mg/l)	$OD$ (mg/l)
0	0,000	1,49	6,71
1000	0,231	2,47	5,73
2000	0,463	3,29	4,91
3000	0,694	3,98	4,22
4000	0,926	4,55	3,65
5000	1,157	5,02	3,18
6000	1,389	5,40	2,80
7000	1,620	5,69	2,51
8000	1,852	5,91	2,29
9000	2,083	6,07	2,13
10000	2,315	6,17	2,03
11000	2,546	6,23	1,97
12000	2,778	6,24	1,96
13000	3,009	6,22	1,98
14000	3,241	6,17	2,03
15000	3,472	6,10	2,10
16000	3,704	6,00	2,20
17000	3,935	5,89	2,31
18000	4,167	5,76	2,44
19000	4,398	5,62	2,58
20000	4,630	5,47	2,73
21000	4,861	5,31	2,89
22000	5,093	5,14	3,06
23000	5,324	4,97	3,23
24000	5,556	4,80	3,40
25000	5,787	4,63	3,57
26000	6,019	4,46	3,74
27000	6,250	4,29	3,91
28000	6,481	4,12	4,08
29000	6,713	3,95	4,25
30000	6,944	3,79	4,41
31000	7,176	3,63	4,57
32000	7,407	3,47	4,73
33000	7,639	3,31	4,89
34000	7,870	3,17	5,03
35000	8,102	3,02	5,18
36000	8,333	2,88	5,32
37000	8,565	2,74	5,46
38000	8,796	2,61	5,59
39000	9,028	2,49	5,71
40000	9,259	2,37	5,83
41000	9,491	2,25	5,95
42000	9,722	2,14	6,06
43000	9,954	2,03	6,17
44000	10,185	1,93	6,27
45000	10,417	1,83	6,37
46000	10,648	1,73	6,47
47000	10,880	1,64	6,56
48000	11,111	1,56	6,64
49000	11,343	1,48	6,72
50000	11,574	1,40	6,80

**Ejercicio 3.4 (Múltiples descargas puntuales)**

Un río es segmentado en tres tramos para evaluar la calidad del agua en términos de OD y DBO. El primer tramo inicia en la descarga del sistema de alcantarillado sanitario de la ciudad y se extiende 20 km aguas abajo hasta la ubicación de la desembocadura de un estero (arroyo), a partir del cual el tramo dos se prolonga a lo largo de otros 15 km; el último tramo, el tercero, que se ha establecido por el cambio significativo de la velocidad de la corriente y la profundidad en relación con el tramo anterior, se extiende desde tal punto hasta los 60 km aguas abajo medidos desde el inicio del tramo uno. La caracterización fisicoquímica e hidrodinámica de la corriente, junto con su fuente puntual de contaminación y el tributario, se muestran en el siguiente diagrama:



Para la situación planteada, aplique el modelo de Streeter-Phelps y determine (a) el perfil del OD (curva sag) a lo largo de los tres tramos, y (b) el perfil de la DBO.

Nota: Asuma que (a) la constante de desoxigenación determinada en el laboratorio es igual tanto para el arroyo tributario como para aguas arriba del río; (b) la pendiente del cauce es 0,0005; y (c) el contenido de nitrógeno tanto en las corrientes naturales como en la descarga es despreciable.

**Solución:**

**A) Cálculos generales**

Note que el valor de la constante de desoxigenación reportado para la corriente principal, la descarga y el tributario corresponde al obtenido con datos de laboratorio ( $k_1$ ), por lo que se puede utilizar para calcular la DBO última ( $L_o$ ), expresando la ecuación [3.12] para un período de medición de cinco días por el hecho de haberse medido la  $DBO_5$  (recuerde que para aplicar el modelo de Streeter-Phelps requiere valores de  $L_o$ , no de  $DBO_5$ ):

$$DBO_5 = L_o [1 - e^{-k_1(5d)}]$$

Descarga	$L_o = \frac{DBO_5}{1 - e^{-k_1(5d)}} = \frac{200 \frac{mg}{l}}{1 - e^{-(0,40d^{-1})(5d)}} = 231,30 \frac{mg}{l}$
Aguas arriba	$L_o = \frac{DBO_5}{1 - e^{-k_1(5d)}} = \frac{6 \frac{mg}{l}}{1 - e^{-(0,25d^{-1})(5d)}} = 8,41 \frac{mg}{l}$
Arroyo tributario	$L_o = \frac{DBO_5}{1 - e^{-k_1(5d)}} = \frac{10 \frac{mg}{l}}{1 - e^{-(0,25d^{-1})(5d)}} = 14,02 \frac{mg}{l}$

Luego, debido a que el modelo de Streeter-Phelps incluye la constante de desoxigenación real de la corriente ( $k_d$ ), los valores de  $k_1$  dados en los datos deben ser convertidos a  $k_d$ , lo cual puede hacerse mediante alguno de los métodos presentados en la sección 3.3.4.2. En este caso, se utilizará el método propuesto por Bosko (1966), ya que se dispone de la pendiente del cauce natural ( $0,0005 = 0,05 \text{ m}/100 \text{ m}$ ):

$$\text{Tramo 1} \quad k_d = 0,25 \text{ d}^{-1} + 0,10 \left( \frac{0,6 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{2,5 \text{ m}} \right) = 0,27 \text{ d}^{-1}$$

$$\text{Tramo 2} \quad k_d = 0,22 \text{ d}^{-1} + 0,10 \left( \frac{0,5 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{3,0 \text{ m}} \right) = 0,24 \text{ d}^{-1}$$

$$\text{Tramo 3} \quad k_d = 0,20 \text{ d}^{-1} + 0,10 \left( \frac{0,3 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{5,5 \text{ m}} \right) = 0,21 \text{ d}^{-1}$$

Asimismo, el valor de la constante de reaeración para cada uno de los tramos de la corriente se calcula empleando las cuatro fórmulas empíricas presentadas en la sección 3.4.2, seleccionando entre ellas en dependencia de la velocidad de la corriente y la profundidad, observando que los valores de tales variables quepan dentro de los intervalos establecidos como criterios de selección en la tabla 3-6. De este modo, resulta evidente que la ecuación de Churchill et al. es la que debe emplearse para el cálculo de  $k_a$  en los dos primeros tramos, y la ecuación de O'Connor y Dobbins es la correcta para obtener el valor de  $k_a$  en el tercer tramo. Los cálculos indicados son:

$$\text{Tramo 1} \quad k_a = 5,026 \frac{0,6 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{(2,5 \text{ m})^{1,67}} = 0,65 \text{ d}^{-1}$$

$$\text{Tramo 2} \quad k_a = 5,026 \frac{0,5 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{(3,0 \text{ m})^{1,67}} = 0,40 \text{ d}^{-1}$$

$$\text{Tramo 3} \quad k_a = 3,930 \frac{(0,3 \frac{\text{m}}{\text{s}})^{0,5}}{(5,5 \text{ m})^{1,5}} = 0,17 \text{ d}^{-1}$$

## B) Cálculos del tramo uno

**Condiciones iniciales:** Se debe realizar un balance de masa para determinar las condiciones iniciales del tramo uno en el punto de la mezcla de la descarga con la corriente aguas arriba:

$$L_0 = \frac{Q_r \cdot L_{0(r)} + Q_d \cdot L_{0(d)}}{Q_r + Q_d} = \frac{\left(1,25 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right) \left(8,41 \frac{\text{mg}}{\text{l}}\right) + \left(0,160 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right) \left(231,30 \frac{\text{mg}}{\text{l}}\right)}{1,25 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} + 0,160 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}} = 33,70 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

$$OD_0 = \frac{Q_r \cdot OD_r + Q_d \cdot OD_d}{Q_r + Q_d} = \frac{\left(1,25 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right) \left(7,5 \frac{\text{mg}}{\text{l}}\right) + \left(0,160 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right) \left(0 \frac{\text{mg}}{\text{l}}\right)}{1,25 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} + 0,160 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}} = 6,65 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

$$T_m = \frac{Q_r \cdot T_r + Q_d \cdot T_d}{Q_r + Q_d} = \frac{\left(1,25 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right) (24,5^\circ\text{C}) + \left(0,160 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right) (30^\circ\text{C})}{1,25 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} + 0,160 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}} = 25,12^\circ\text{C}$$

$$OD_s = \exp \left[ -139,34411 + \frac{1,575701 \times 10^5}{(298,27 \text{ K})} - \frac{6,642308 \times 10^7}{(298,27 \text{ K})^2} + \frac{1,243800 \times 10^{10}}{(298,27 \text{ K})^3} - \frac{8,621949 \times 10^{11}}{(298,27 \text{ K})^4} \right]$$

$$= 8,25 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

$$D_0 = OD_s - OD_0 = 8,25 \frac{\text{mg}}{\text{l}} - 6,65 \frac{\text{mg}}{\text{l}} = 1,60 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

**Corrección de las constantes cinéticas y determinación de  $k_r$ :** Luego de establecer las condiciones iniciales, se procede a corregir el valor calculado de  $k_d$  y  $k_a$ , en relación con la temperatura resultante de la mezcla mediante las ecuaciones [3.74] y [3.88], y a calcular  $k_r$  en función de la velocidad de sedimentación y la profundidad:

$$k_{d_T} = k_{a_{20}}(1,047)^{T-20} = 0,27 \text{ d}^{-1}(1,047)^{25,12-20} = 0,34 \text{ d}^{-1}$$

$$k_{a_T} = k_{a_{20}}(1,024)^{T-20} = 0,65 \text{ d}^{-1}(1,024)^{25,12-20} = 0,73 \text{ d}^{-1}$$

$$k_r = k_d + k_s = 0,34 \text{ d}^{-1} + \frac{0,5 \text{ m}}{2,5 \text{ m}} = 0,54 \text{ d}^{-1}$$

**Aplicación del modelo de Streeter-Phelps:** Se emplea la ecuación [3.113] para calcular el déficit de oxígeno disuelto en función de la distancia a lo largo de toda la longitud del tramo uno (hasta los 25 km desde el punto de mezcla); luego se debe calcular la concentración de OD correspondiente mediante la ecuación [3.114]. A continuación, se muestra un cálculo de  $D_x$  y  $OD_x$  a modo de ejemplo, pero los valores de tales variables, a cada una de las distancias consideradas en el tramo, se muestran en la tabla posterior al referido cálculo:

$$D_x = D_0 \left( e^{\frac{-k_d x}{v}} \right) + \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \left[ e^{\frac{-k_r x}{v}} - e^{\frac{-k_d x}{v}} \right]$$

$$D_{1000m} = 1,60 \frac{mg}{l} \left\{ e^{-0,73 \text{ d}^{-1} \left[ \frac{1000 \text{ m}}{0,6 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 \text{ s}}{1 \text{ d}} \right)} \right]} \right\} + \frac{(0,34 \text{ d}^{-1}) \left( 33,70 \frac{mg}{l} \right)}{0,73 \text{ d}^{-1} - 0,54 \text{ d}^{-1}} \left\{ e^{-0,54 \text{ d}^{-1} \left[ \frac{1000 \text{ m}}{0,6 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 \text{ s}}{1 \text{ d}} \right)} \right]} - e^{-0,73 \text{ d}^{-1} \left[ \frac{1000 \text{ m}}{0,6 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 \text{ s}}{1 \text{ d}} \right)} \right]} \right\}$$

$$D_{1000m} = 1,60 \frac{mg}{l} (0,98602) + 60,31 \frac{mg}{l} (0,98964 - 0,98602)$$

$$\therefore D_{1000m} = 1,80 \frac{mg}{l}$$

Luego,  $OD_{1000m} = OD_s - D_{1000m} = 8,25 \frac{mg}{l} - 1,79 \frac{mg}{l}$

$$\therefore OD_{1000m} = 6,46 \frac{mg}{l}$$

Adicionalmente, se debe calcular también la variación de la DBO última con la distancia mediante la ecuación [3.100]

$$L_{1000m} = 33,70 \frac{mg}{l} \left\{ e^{-0,54 \text{ d}^{-1} \left[ \frac{1000 \text{ m}}{0,6 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 \text{ s}}{1 \text{ d}} \right)} \right]} \right\} = 33,35 \frac{mg}{l}$$

$x$ (m)	$D$ (mg/l)	$OD$ (mg/l)	$DBO$ (mg/l)
0	1,60	6,65	33,70
1000	1,80	6,45	33,35
2000	1,99	6,26	33,01
3000	2,17	6,08	32,66
4000	2,35	5,90	32,32
5000	2,53	5,72	31,99
6000	2,70	5,55	31,66
7000	2,87	5,38	31,33
8000	3,03	5,22	31,01
9000	3,19	5,06	30,68
10000	3,35	4,90	30,37
11000	3,50	4,75	30,05
12000	3,64	4,61	29,74
13000	3,78	4,47	29,43
14000	3,92	4,33	29,13
15000	4,05	4,20	28,83
16000	4,18	4,07	28,53
17000	4,31	3,94	28,23
18000	4,43	3,82	27,94
19000	4,55	3,70	27,65
20000	4,67	3,58	27,36

### C) Cálculos del tramo dos

**Condiciones iniciales:** Esta vez el balance de masa para determinar las condiciones iniciales en el tramo dos debe realizarse entre los datos de la segunda entrada al sistema (el arroyo tributario) y los valores de las variables al final del primer tramo (a los 20000 m); por lo tanto,

$$L_0 = \frac{Q_{T1} \cdot L_{0(T1)} + Q_a \cdot L_{0(a)}}{Q_{T1} + Q_a} = \frac{\left(1,41 \frac{m^3}{s}\right) \left(27,36 \frac{mg}{l}\right) + \left(0,35 \frac{m^3}{s}\right) \left(14,02 \frac{mg}{l}\right)}{1,41 \frac{m^3}{s} + 0,35 \frac{m^3}{s}} = 24,71 \frac{mg}{l}$$

$$OD_0 = \frac{Q_{T1} \cdot OD_{T1} + Q_a \cdot OD_a}{Q_{T1} + Q_a} = \frac{\left(1,41 \frac{m^3}{s}\right) \left(3,58 \frac{mg}{l}\right) + \left(0,35 \frac{m^3}{s}\right) \left(8,50 \frac{mg}{l}\right)}{1,41 \frac{m^3}{s} + 0,35 \frac{m^3}{s}} = 4,56 \frac{mg}{l}$$

$$T_m = \frac{Q_{T1} \cdot T_{T1} + Q_a \cdot T_a}{Q_{T1} + Q_a} = \frac{\left(1,41 \frac{m^3}{s}\right) (25,12^\circ C) + \left(0,35 \frac{m^3}{s}\right) (23,00^\circ C)}{1,41 \frac{m^3}{s} + 0,35 \frac{m^3}{s}} = 24,70^\circ C$$

$$OD_s = \exp \left[ -139,34411 + \frac{1,575701 \times 10^5}{(297,85 K)} - \frac{6,642308 \times 10^7}{(297,85 K)^2} + \frac{1,243800 \times 10^{10}}{(297,85 K)^3} - \frac{8,621949 \times 10^{11}}{(297,85 K)^4} \right]$$

$$= 8,31 \frac{mg}{l}$$

$$D_0 = OD_s - OD_0 = 8,31 \frac{mg}{l} - 4,56 \frac{mg}{l} = 3,75 \frac{mg}{l}$$

**Corrección de las constantes cinéticas y determinación de  $k_r$ :** El valor calculado de  $k_d$  y  $k_a$ , se debe corregir a la temperatura del tramo uno, y  $k_r$  se estima para el valor de velocidad de sedimentación y profundidad correspondiente al tramo dos:

$$k_{d_T} = k_{d_{20}}(1,047)^{T-20} = 0,24 \text{ d}^{-1}(1,047)^{24,70-20} = 0,30 \text{ d}^{-1}$$

$$k_{a_T} = k_{a_{20}}(1,024)^{T-20} = 0,40 \text{ d}^{-1}(1,024)^{24,70-20} = 0,45 \text{ d}^{-1}$$

$$k_r = k_d + k_s = 0,30 \text{ d}^{-1} + \frac{0,5 \frac{m}{d}}{3,0 m} = 0,47 \text{ d}^{-1}$$

**Aplicación del modelo de Streeter-Phelps:** A semejanza del cálculo para el tramo uno, se calculan el  $D_x$  y  $OD_x$  con el modelo de Streeter-Phelps, pero teniendo en cuenta que el valor que se utilizará para  $x$  corresponde a la diferencia entre la distancia medida desde el punto de mezcla (0 km) y la coordenada a la que termina el tramo uno (20 km); esto es al calcular el  $D_x$  y  $OD_x$ , por ejemplo, a la distancia que hará el cálculo ejemplo para este tramo (35000 m),  $x$  tendrá el valor 12000 m, resultante de la resta entre 32000 m y 20000 m:

$$D_{32000m} = 3,75 \frac{mg}{l} \left\{ e^{-0,45 \text{ d}^{-1} \left[ \frac{12000 \text{ m}}{0,5 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 \text{ s}}{1 \text{ d}} \right)} \right]} \right\} + \frac{(0,30 \text{ d}^{-1}) \left( 24,71 \frac{mg}{l} \right)}{0,45 \text{ d}^{-1} - 0,47 \text{ d}^{-1}} \left\{ e^{-0,47 \text{ d}^{-1} \left[ \frac{12000 \text{ m}}{0,5 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 \text{ s}}{1 \text{ d}} \right)} \right]} - e^{-0,45 \text{ d}^{-1} \left[ \frac{12000 \text{ m}}{0,5 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 \text{ s}}{1 \text{ d}} \right)} \right]} \right\}$$

$$D_{32000m} = 3,75 \frac{mg}{l} (0,88250) - 370,65 \frac{mg}{l} (0,87761 - 0,88250)$$

$$\therefore D_{32000m} = 5,12 \frac{mg}{l}$$

$$\text{Luego, } OD_{32000m} = OD_s - D_{32000m} = 8,31 \frac{mg}{l} - 5,12 \frac{mg}{l}$$

$$\therefore OD_{32000m} = 3,19 \frac{mg}{l}$$

Asimismo,

$$L_{32000m} = 24,71 \frac{mg}{l} \left\{ e^{-0,47 \text{ d}^{-1} \left[ \frac{12000 \text{ m}}{0,5 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 \text{ s}}{1 \text{ d}} \right)} \right]} \right\} = 21,69 \frac{mg}{l}$$

$x$ (m)	$D$ (mg/l)	$OD$ (mg/l)	$DBO$ (mg/l)
20000	3,75	4,56	24,71
21000	3,88	4,43	24,44
22000	4,01	4,30	24,18
23000	4,13	4,18	23,92
24000	4,25	4,06	23,66
25000	4,37	3,94	23,40
26000	4,49	3,82	23,15
27000	4,60	3,71	22,90
28000	4,71	3,60	22,65
29000	4,82	3,49	22,41
30000	4,92	3,39	22,16
31000	5,02	3,29	21,92
32000	5,12	3,19	21,69
33000	5,22	3,09	21,45
34000	5,31	3,00	21,22
35000	5,40	2,91	20,99

**D) Cálculos del tramo tres**

**Condiciones iniciales:** En el tercer tramo, las condiciones iniciales deben establecerse considerando que, aunque no hay una nueva entrada a la corriente principal, las características hidrodinámicas y geométricas cambian sustancialmente, de modo que, sin

mediar balance de masa alguno, los valores iniciales de las variables en el tramo tres quedan fijadas por sus valores correspondientes al final del tramo dos; esto es,

$$L_0 = 20,99 \frac{mg}{l}$$

$$OD_0 = 2,91 \frac{mg}{l}$$

$$T_m = 24,70^\circ C$$

$$OD_s = 8,31 \frac{mg}{l}$$

$$D_0 = 5,40 \frac{mg}{l}$$

**Corrección de las constantes cinéticas y determinación de  $k_r$ :** Por el hecho de no existir una nueva entrada al río, el valor calculado de  $k_d$  y  $k_a$ , se corrige a la temperatura del tramo dos;  $k_r$  se estima para el valor de velocidad de sedimentación y profundidad correspondiente al tramo tres:

$$k_{dT} = k_{d20} (1,047)^{T-20} = 0,21 d^{-1} (1,047)^{24,70-20} = 0,26 d^{-1}$$

$$k_{aT} = k_{a20} (1,024)^{T-20} = 0,17 d^{-1} (1,024)^{24,70-20} = 0,19 d^{-1}$$

$$k_r = k_d + k_s = 0,26 d^{-1} + \frac{0,5 \frac{m}{d}}{5,5 m} = 0,35 d^{-1}$$

**Aplicación del modelo de Streeter-Phelps:**  $D_x$  y  $OD_x$  se calculan con el criterio establecido para al tramo dos en relación con el valor de  $x$ :

$$D_{50000m} = 5,21 \frac{mg}{l} \left\{ e^{-0,19 d^{-1} \left[ \frac{15000 m}{0,3 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 s}{1 d} \right)} \right]} \right\} + \frac{(0,26 d^{-1}) \left( 20,99 \frac{mg}{l} \right)}{0,19 d^{-1} - 0,35 d^{-1}} \left\{ e^{-0,35 d^{-1} \left[ \frac{15000 m}{0,3 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 s}{1 d} \right)} \right]} - e^{-0,19 d^{-1} \left[ \frac{15000 m}{0,3 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 s}{1 d} \right)} \right]} \right\}$$

$$D_{50000m} = 5,21 \frac{mg}{l} (0,89588) - 34,11 \frac{mg}{l} (0,81665 - 0,89588)$$

$$\therefore D_{50000m} = 7,54 \frac{mg}{l}$$

$$\text{Luego, } OD_{50000m} = OD_s - D_{50000m} = 8,31 \frac{mg}{l} - 7,54 \frac{mg}{l}$$

$$\therefore OD_{50000m} = 0,77 \frac{mg}{l}$$

Asimismo,

$$L_{50000m} = 19,13 \frac{mg}{l} \left\{ e^{-0,35 d^{-1} \left[ \frac{15000 m}{0,3 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 s}{1 d} \right)} \right]} \right\} = 17,14 \frac{mg}{l}$$

$x$ (m)	$D$ (mg/l)	$OD$ (mg/l)	$DBO$ (mg/l)
35000	5,40	2,91	20,99
36000	5,57	2,74	20,71
37000	5,73	2,58	20,43
38000	5,89	2,42	20,16
39000	6,05	2,26	19,89
40000	6,21	2,10	19,62
41000	6,35	1,96	19,36
42000	6,50	1,81	19,10
43000	6,64	1,67	18,84
44000	6,78	1,53	18,59
45000	6,92	1,39	18,34
46000	7,05	1,26	18,09
47000	7,18	1,13	17,85
48000	7,30	1,01	17,61
49000	7,42	0,89	17,37
50000	7,54	0,77	17,14

Finalmente, la curva sag o el perfil del oxígeno disuelto resultante de la aplicación del modelo de Streeter-Phelps a la situación planteada es la siguiente:

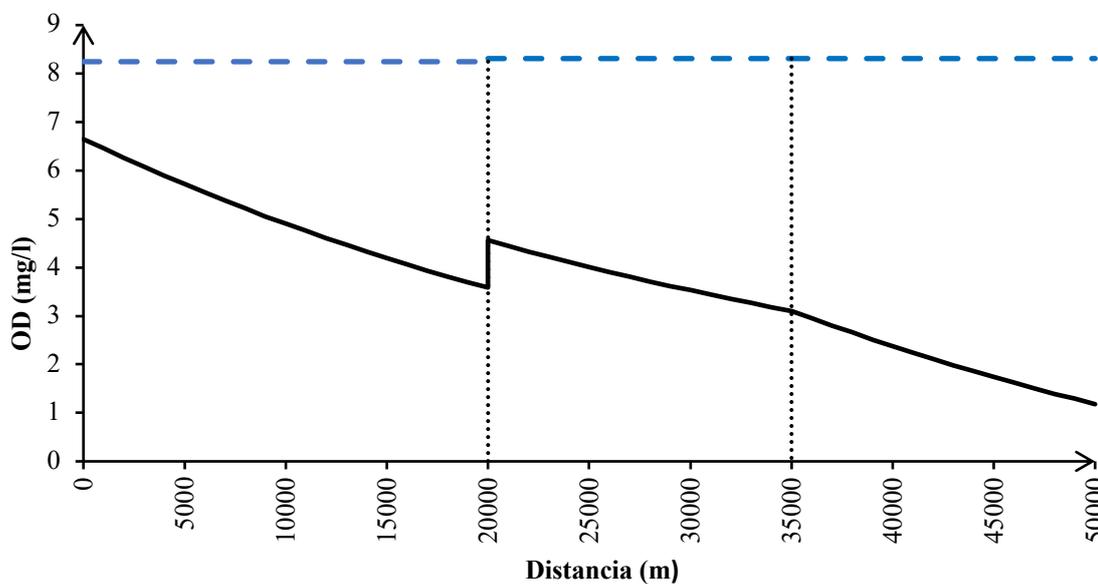


Figura 3-8 Perfil de oxígeno disuelto resultante de la resolución del ejercicio 3.4.

### 3.5.3 Condiciones anaerobias

El modelo de Streeter-Phelps revela que la materia orgánica en descomposición presente en el agua causa el descenso de la concentración de oxígeno disuelto hasta un valor crítico de déficit, luego de cual empieza a subir a causa de la capacidad natural de autorrecuperación por reaireación. Sin embargo, en ocasiones, el valor de la DBO que ingresa a la corriente natural desde una fuente puntual de

contaminación es tan alto que provoca que los valores del déficit de oxígeno disuelto calculado mediante la ecuación [3.113] sean superiores al nivel de saturación, lo cual es posible matemáticamente, aunque el hecho de que, consecuentemente, se obtengan valores negativos de OD bajo las condiciones indicadas, significa que el modelo de Streeter-Phelps debe ser modificado para representar correctamente el agotamiento total del oxígeno, ya que en su forma original sólo es válido para describir la variación del oxígeno disuelto en la corriente para valores del déficit superiores o iguales a su concentración de saturación.

Autores como Chapra (2008) y (Chin, 2013) recomiendan modificar el modelo de Streeter-Phelps de acuerdo con el planteamiento de Gundelach y Castillo (1976), un par de ingenieros civiles por aquel entonces de la Universidad de Chile, quienes, entre sus investigaciones en el área de la ingeniería sanitaria, propusieron una expresión general para modelizar las condiciones anaerobias en el proceso de purificación natural de las corrientes de agua. En su artículo titulado *Natural Stream Purification under Anaerobic Conditions*, en primer lugar, establecieron una ecuación para representar el decaimiento de la DBO ( $L$ ) en condiciones aeróbicas partiendo de la ecuación [2.30], en una dimensión, con el uso del coeficiente de difusión turbulenta  $E$ , bajo la forma de una ecuación de advección-difusión incluyendo dos sumideros (la oxidación biológica de la materia orgánica,  $k_d L$ , y la reducción de la DBO debido a la sedimentación,  $k_r L$ ) y una fuente de adición de materia orgánica,  $p$ , que representa la reflotación o nueva suspensión de la materia orgánica depositada en el fondo de sedimentos; tal ecuación es

$$\frac{\partial L}{\partial t} + v \frac{\partial L}{\partial x} = E \left( \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \right) - k_d L - k_r L + p \quad \text{Ec. [3.131]}$$

Luego, suponiendo estado estacionario Gundelach y Castillo (1976) obtuvieron la referida ecuación de fase aeróbica, tal como sigue:

$$E \left( \frac{d^2L}{dx^2} \right) - v \frac{dL}{dx} - k_d L - k_r L + p = 0 \quad \text{Ec. [3.132]}$$

Sin embargo, al adaptar la ecuación [3.132] a condiciones anaerobias, resulta evidente que cuando el oxígeno se agota completamente en la corriente, el decaimiento de la DBO, o tasa de desoxigenación debida a la biodegradación, ya no puede continuar expresándose de acuerdo con la ecuación [3.4], sino que a partir del punto en que se haya agotado el oxígeno, su valor dependerá sólo de la tasa de reaireación; esto es

$$\frac{dL}{dt} = -k_d L = -k_a C_s \quad \text{Ec. [3.133]}$$

Por lo que, incluyendo un término denotado por  $a$  que representa la adición de oxígeno por la actividad fotosintéticas de algas y plantas acuáticas en la propuesta de Gundelach y Castillo (1976), los investigadores chilenos expresaron de la siguiente forma la ecuación para modelizar las condiciones anaerobias:

$$E \left( \frac{d^2L}{dx^2} \right) - v \frac{dL}{dx} - k_a C_s - a - k_r L + p = 0 \quad \text{Ec. [3.134]}$$

La ecuación [3.134] se puede expresar como una ecuación diferencial lineal no homogénea de segundo orden, de modo que

$$\frac{d^2L}{dx^2} - \left( \frac{v}{E} \right) \frac{dL}{dx} - \frac{k_r L}{E} = \frac{k_a C_s + a - p}{E} \quad \text{Ec. [3.135]}$$

Luego, considerando que la solución de la ecuación [3.135] es la suma de su función complementaria ( $y_h$ ) y una solución particular ( $y_p$ ), en primer lugar, se obtendrá  $y_h$ , que no es más que la combinación lineal de funciones que constituyen la solución general de la parte homogénea de la ecuación [3.135]; el procedimiento detallado de lo indicado se muestra a continuación:

$$\frac{d^2L}{dx^2} - \left(\frac{v}{E}\right) \frac{dL}{dx} - \frac{k_r L}{E} = 0 \quad \text{Ec. [3.136]}$$

Formación de la ecuación auxiliar

$$m^2 - \left(\frac{v}{E}\right) m - \frac{k_r}{E} = 0 \quad \text{Ec. [3.137]}$$

Aplicación de la fórmula general

$$m_{1,2} = \frac{\frac{v}{E} \pm \sqrt{\frac{v^2}{E^2} + 4\left(\frac{k_r}{E}\right)}}{2} \quad \text{Ec. [3.138]}$$

Factor común del radicando

$$m_{1,2} = \frac{\frac{v}{E} \pm \sqrt{\frac{v^2}{E^2} \left(1 + \frac{4k_r E}{v^2}\right)}}{2} \quad \text{Ec. [3.139]}$$

Primera solución ( $m_1$ )

$$m_1 = \frac{v}{2E} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}}\right) \quad \text{Ec. [3.140]}$$

Primera solución ( $m_2$ )

$$m_2 = \frac{v}{2E} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}}\right) \quad \text{Ec. [3.141]}$$

Ahora, la solución particular de la ecuación no homogénea se obtiene mediante el método de los coeficientes indeterminados, aunque de manera muy sencilla, puesto que la expresión del lado derecho [3.135] es una función constante, cuya derivada es cero. Entonces, el procedimiento es el siguiente:

$$y_p = A_0 \quad \text{Ec. [3.142]}$$

Igualamiento de términos correspondientes

$$\left(-\frac{k_r}{E}\right) A_0 = \frac{k_a C_s + a - p}{E} \quad \text{Ec. [3.143]}$$

Obtención de la solución particular

$$y_p = A_0 = \frac{p - k_a C_s - a}{k_r} \quad \text{Ec. [3.144]}$$

De modo que, la solución general de la ecuación diferencial lineal no homogénea [3.135], entendida como la suma  $y_h + y_p$ , se expresa como

$$L = c_1 e^{m_1 x} + c_2 e^{m_2 x} + \frac{p - k_a C_s - a}{k_r} \quad \text{Ec. [3.145]}$$

$$L = c_1 e^{\frac{v}{2E} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}}\right) x} + c_2 e^{\frac{v}{2E} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}}\right) x} + \frac{p - k_a C_s - a}{k_r} \quad \text{Ec. [3.146]}$$

Sin embargo, debe advertirse que por el hecho de que  $m_2$  es positiva para todo el intervalo cuando  $x \rightarrow \infty$ , la constante toma un valor de cero (esto es,  $L$  diverge). Así, la ecuación [3.146] se reduce a

$$L = c_1 e^{\frac{v}{2E} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}}\right) x} + \frac{p - k_a C_s - a}{k_r} \quad \text{Ec. [3.147]}$$

Con la ecuación reducida [3.147], se calcula el valor de la constante  $c_1$ , utilizando la condición inicial  $L = L_i$  cuando  $x = x_i$ . Entonces,

$$L_i = c_1 e^{\frac{v}{2E} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}}\right) x_i} - \frac{p - k_a C_s - a}{k_r} \quad \text{Ec. [3.148]}$$

$$c_1 = \frac{L_i - \frac{p - k_a C_s - a}{k_r}}{e^{\frac{v}{2E} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}}\right) x_i}} \quad \text{Ec. [3.149]}$$

donde,  $L_i$  y  $x_i$  representan el valor de la concentración de DBO en el inicio de la zona anaeróbica y la coordenada o distancia medida desde el punto de mezcla donde ocurre tal valor, respectivamente.

La forma definitiva de la ecuación general propuesta por Gundelach y Castillo (1976) se obtiene reemplazando la ecuación [3.149] en [3.147]. Por lo tanto,

$$L = \left[ \frac{L_i - \frac{p - k_a C_s - a}{k_r}}{e^{\frac{v}{2E} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}}\right) x_i}} \right] e^{\frac{v}{2E} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}}\right) x} + \frac{p - k_a C_s - a}{k_r} \quad \text{Ec. [3.150]}$$

$$\therefore L = \left( L_i + \frac{k_a C_s + a - p}{k_r} \right) e^{\frac{v}{2E} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}}\right) (x - x_i)} - \frac{k_a C_s + a - p}{k_r} \quad \text{Ec. [3.151]}$$

Ahora bien, para efectos de considerar la zona anaerobia en el contexto de la aplicación del modelo clásico de Streeter-Phelps, la ecuación [3.151]

debe simplificarse a partir de los supuestos de hacer cero  $E$ ,  $a$ , y  $p$ , ya que estos parámetros no forman parte de la ecuación [3.113]; así, recurriendo a la regla de L'Hôpital para evitar una indeterminación en el cálculo del exponente, se obtiene

$$\lim_{E \rightarrow 0} \frac{v}{2E} \left( 1 - \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}} \right) = \lim_{E \rightarrow 0} \frac{\frac{d}{dE} \left[ v - v \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}} \right]}{\frac{d}{dE} (2E)} \quad \text{Ec. [3.152]}$$

$$\lim_{E \rightarrow 0} \frac{v}{2E} \left( 1 - \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}} \right) = \lim_{E \rightarrow 0} \frac{- \left( \frac{1}{2\sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}}} \right) \left( \frac{4k_r}{v^2} \right) v}{2} \quad \text{Ec. [3.153]}$$

$$\lim_{E \rightarrow 0} \frac{v}{2E} \left( 1 - \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}} \right) = \lim_{E \rightarrow 0} - \frac{k_r}{v \sqrt{1 + \frac{4k_r E}{v^2}}} = - \frac{k_r}{v} \quad \text{Ec. [3.154]}$$

Consecuentemente, la ecuación que describe el **decaimiento de la DBO a lo largo de la zona anaerobia** de la corriente y que, obviamente, permite calcular la concentración de la DBO al final de esta, en la coordenada  $x$ , es

$$L = \left( L_i + \frac{k_a C_s}{k_r} \right) e^{-\frac{k_r}{v}(x-x_i)} - \frac{k_a C_s}{k_r} \quad \text{Ec. [3.155]}$$

No obstante, de manera similar se puede demostrar que, si se ignora la sedimentación como mecanismo de eliminación de la DBO, la ecuación [3.151] se reduce a

$$L = L_i - k_a C_s \left( \frac{x - x_i}{v} \right) \quad \text{Ec. [3.156]}$$

Por otra parte, la **longitud de la zona anaerobia** se calcula considerando que al final de esta, la tasa de aporte de oxígeno a la corriente mediante

reacción, ignorando la fotosíntesis, iguala a la tasa de desoxygenación; esto es

$$k_a C_s = k_d L \quad \text{Ec. [3.157]}$$

Luego, sustituyendo la ecuación [3.157] dentro de la [3.155] se obtiene que

$$\frac{k_a C_s}{k_d} = \left( L_i + \frac{k_a C_s}{k_r} \right) e^{-\frac{k_r}{v}(x-x_i)} - \frac{k_a C_s}{k_r} \quad \text{Ec. [3.158]}$$

Despeje del término exponencial

$$e^{-\frac{k_r}{v}(x-x_i)} = \frac{\frac{k_a C_s}{k_d} + \frac{k_a C_s}{k_r}}{L_i + \frac{k_a C_s}{k_r}} \quad \text{Ec. [3.159]}$$

Propiedad de logaritmos

$$-\frac{k_r}{v}(x-x_i) = \ln \left[ \frac{\frac{k_a C_s}{k_d} + \frac{k_a C_s}{k_r}}{L_i + \frac{k_a C_s}{k_r}} \right] \quad \text{Ec. [3.160]}$$

Inversión de argumento del logaritmo y multiplicación por  $k_d$

$$\therefore x - x_i = \frac{v}{k_r} \ln \left[ \frac{k_d L_i + \frac{k_d k_a C_s}{k_r}}{k_a C_s + \frac{k_d k_a C_s}{k_r}} \right] \quad \text{Ec. [3.161]}$$

La ecuación [3.161], además de dar la longitud de la zona anaerobia, evidentemente, permite determinar la distancia aguas abajo en la corriente (despejando  $x$ ) a partir del cual el oxígeno disuelto será superior a cero y, consecuentemente, su comportamiento podrá ser estimado mediante el modelo clásico de Streeter-Phelps.

Asimismo, de manera similar a lo anterior, se puede demostrar que cuando es despreciable la sedimentación como mecanismo de eliminación de la DBO, esto es  $k_d = k_r$ , la longitud de la zona anaerobia se calcula, luego de sustituir la ecuación [3.157] en la [3.156], mediante la siguiente expresión:

$$\frac{k_a C_s}{k_d} = L_i - k_a C_s \left( \frac{x - x_i}{v} \right) \quad \text{Ec. [3.162]}$$

$$x - x_i = \frac{v}{k_a C_s} \left( L_i - \frac{k_a C_s}{k_d} \right) \quad \text{Ec. [3.163]}$$

$$\therefore x - x_i = \frac{vL_i}{k_a C_s} - \frac{v}{k_d} \quad \text{Ec. [3.164]}$$

Finalmente, es necesario puntualizar que la forma de determinar el valor de la distancia de inicio del tramo anaerobio ( $x_i$ ) es la ecuación resultante de igualar el oxígeno disuelto de saturación con la ecuación [3.113], puesto que, en tal punto, el hecho de que el déficit de oxígeno sea numéricamente igual a su concentración de saturación da como resultado un valor de concentración cero de oxígeno disuelto en el agua. Por lo tanto,

$$OD_s = D_0 \left( e^{\frac{-k_a x_i}{v}} \right) + \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \left[ e^{\frac{-k_r x_i}{v}} - e^{\frac{-k_a x_i}{v}} \right] \quad \text{Ec. [3.165]}$$

Sin embargo, es evidente que la forma de encontrar el valor de  $x_i$  es mediante algún método numérico, pues al intentar despejarla se obtiene una expresión implícita.

### Ejercicio 3.5

Considere el ejemplo 3.3, pero ahora suponga que la industria ha empeorado la calidad de sus aguas residuales que se descargan al río receptor, de modo que en el punto de mezcla la DBO se ha incrementado a 25,0 mg/l, el oxígeno disuelto ha disminuido a 5,5 mg/l, y la temperatura resultante ha cambiado a 27°C. Si se mantiene invariable tanto el caudal del río después de la mezcla en el referido problema como la velocidad de la corriente, y los valores de las constantes cinéticas a 20°C también se conservan, determine (a) la forma correcta de la curva sag para las nuevas condiciones en la corriente y (b) el perfil de decaimiento de la DBO última.

#### Solución:

**Condiciones iniciales:** A diferencia de los problemas precedentes, debido a que los datos dan los valores de las condiciones iniciales producto de la mezcla, ya no es necesario hacer un balance de masa. Por lo tanto, las condiciones iniciales, incluyendo el cálculo de la concentración de saturación y el déficit de oxígeno disuelto son:

$$L_0 = 25,00 \frac{\text{mg}}{\text{l}} \quad OD_0 = 5,50 \frac{\text{mg}}{\text{l}} \quad T_0 = 27^\circ\text{C} \quad OD_s = 7,97 \frac{\text{mg}}{\text{l}} \quad D_0 = 2,47 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

**Corrección de constantes cinéticas:** Las constantes de desoxigenación y reaeración deben corregirse a la temperatura resultante de la mezcla, mediante las ecuaciones [3.74] y [3.88], respectivamente.

$$k_{d_T} = 0,30 \text{ d}^{-1} (1,047)^{25,0-20} = 0,41 \text{ d}^{-1}$$

$$k_{a_T} = 0,25 \text{ d}^{-1} (1,024)^{25,0-20} = 0,30 \text{ d}^{-1}$$

$$k_r = k_d = 0,41 \text{ d}^{-1}$$

**Determinación del punto crítico:** El cálculo de la distancia y el déficit críticos es el criterio para demostrar o descartar la ocurrencia de condiciones anaerobias en el algún tramo de la corriente.

$$x_c = \frac{0,05 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 s}{1 d} \right)}{0,30 d^{-1} - 0,41 d^{-1}} \ln \left\{ \frac{0,30 d^{-1}}{0,41 d^{-1}} \left[ 1 - \frac{1,54 \frac{mg}{l} (0,30 d^{-1} - 0,41 d^{-1})}{(0,41 d^{-1}) \left( 25,00 \frac{mg}{l} \right)} \right] \right\} = 11240 m$$

$$D_c = \frac{(0,41 d^{-1}) \left( 25,00 \frac{mg}{l} \right)}{0,30 d^{-1}} e^{-0,41 d^{-1} \left[ \frac{11240 m}{0,05 \frac{m}{s} \left( \frac{86400 s}{1 d} \right)} \right]} = 11,76 \frac{mg}{l}$$

Luego, debido a que  $D_c \left( 11,76 \frac{mg}{l} \right) > OD_s \left( 7,97 \frac{mg}{l} \right)$ , se confirma que hay una zona anaerobia en la corriente. Tome en cuenta que, si se calcula el  $OD_{min}$ , éste dará como resultado un valor de  $-3,79 \frac{mg}{l}$ , aunque en realidad lo que ha ocurrido es que se ha agotado todo el oxígeno disuelto en el agua, en otras palabras, todos sus valores negativos, incluso el crítico corresponde a una concentración de  $0 \frac{mg}{l}$ .

**Análisis de la zona anaerobia:** Una vez se ha confirmado la existencia de un tramo anaerobio, el siguiente paso es determinar la distancia correspondiente al inicio de este ( $x_i$ ). Entonces, utilizando la ecuación [3.165], la expresión implícita resultante de despejar  $x_i$ , que asegura la convergencia en la sucesión de posibles valores que se probarán, es

$$x_i = -\frac{4320 d}{0,41 d^{-1}} \ln \left\{ \frac{7,97 \frac{mg}{l} - 2,47 \frac{mg}{l} \left[ e^{\frac{-(0,30 d^{-1})x_i}{4320 \frac{m}{d}}} \right]}{(0,41 d^{-1}) \left( 25,0 \frac{mg}{l} \right)} + e^{\frac{-(0,30 d^{-1})x_i}{4320 \frac{m}{d}}} \right\}$$

Luego, por el método de iteración de punto fijo, utilizando como valor inicial de iteración la mitad de la distancia crítica (5620 m), que siempre es una buena primera aproximación al valor verdadero que se busca, se obtiene que  $x_i = 3329 m$ . Note que si la precisión hubiese sido de una centésima de metro (1 cm), el valor exacto habría sido 3328,82 m; sin embargo, se trata de una diferencia despreciable dentro de la longitud completa de la corriente en estudio (50 km), así que se acepta un valor entero de la distancia. Los resultados de tal iteración admitida para un error de 0,001% son los siguientes:

Iteración	$x_i$	Lado derecho	Error relativo
1	5620	5221	7,106
2	5221	4888	6,371
3	4888	4612	5,647
4	4612	4384	4,953
5	4384	4195	4,303
6	4195	4039	3,706
7	4039	3912	3,168
8	3912	3806	2,689
9	3806	3720	2,269
10	3720	3649	1,905
11	3649	3591	1,592
12	3591	3543	1,326
13	3543	3504	1,101
14	3504	3472	0,911
15	3472	3446	0,753
16	3446	3425	0,621
17	3425	3407	0,511
18	3407	3393	0,420
19	3393	3381	0,345
20	3381	3372	0,283
21	3372	3364	0,232
22	3364	3358	0,191
23	3358	3352	0,156
24	3352	3348	0,128
25	3348	3345	0,105
26	3345	3342	0,086
27	3342	3339	0,070
28	3339	3337	0,057
29	3337	3336	0,047
30	3336	3335	0,038
31	3335	3334	0,031
32	3334	3333	0,026
33	3333	3332	0,021
34	3332	3331	0,017
35	3331	3331	0,014
36	3331	3331	0,011
37	3331	3330	0,009
38	3330	3330	0,008
39	3330	3330	0,006
40	3330	3330	0,005
41	3330	3329	0,004
42	3329	3329	0,003
43	3329	3329	0,003
44	3329	3329	0,002
45	3329	3329	0,002
46	3329	3329	0,002
47	3329	3329	0,001
48	3329	3329	0,001
49	3329	3329	0,001
50	3329	3329	0,001

Con el valor de  $x_i$  se calcula la DBO en el punto de inicio del tramo anaerobio mediante una adaptación de la ecuación del [3.100] a las condiciones indicadas; entonces

$$L_i = L_0 e^{-k_r \left(\frac{x_i}{v}\right)} = 25,0 \frac{mg}{l} e^{-0,41 d^{-1} \left(\frac{3329 \frac{m}{d}}{4320 \frac{m}{d}}\right)} = 18,23 \frac{mg}{l}$$

El tercer paso del análisis anaerobio consiste en calcular la longitud de tal tramo mediante la ecuación [3.164], de modo que

$$x - x_i = \frac{v L_i}{k_a C_s} - \frac{v}{k_d} = \frac{\left(4320 \frac{m}{d}\right) \left(18,23 \frac{mg}{l}\right)}{\left(0,30 d^{-1}\right) \left(7,97 \frac{mg}{l}\right)} - \frac{4320 \frac{m}{d}}{0,41 d^{-1}} = 22401 m$$

Del resultado anterior se desprende que la distancia a la que termina la zona anaerobia dentro de la corriente es  $x = 22401 m + x_i = 22401 m + 3329 m = 25730 m$

El análisis anaerobio concluye con el cálculo de la DBO a la distancia  $x$ , esto es, al final del tramo de oxígeno disuelto cero, mediante la ecuación [3.156], entonces

$$L = L_i - k_a C_s \left(\frac{x - x_i}{v}\right) = 18,23 \frac{mg}{l} - 0,30 d^{-1} \left(7,97 \frac{mg}{l}\right) \left(\frac{22401 m}{4320 \frac{m}{d}}\right) = 5,83 \frac{mg}{l}$$

**Corrección de la curva sag:** Como resultó evidente del cálculo de las condiciones críticas, si se emplea el modelo de Streeter-Phelps para representar el perfil del OD, sin tomar en cuenta las ecuaciones de la zona anaerobia, se obtendrán valores negativos a lo largo de tal tramo. Los cálculos se muestran en la siguiente tabla, donde se ha incorporado la distancia del inicio y final de la zona anaerobia:

x (m)	D (mg/l)	OD (mg/l)
1000	4,49	3,48
2000	6,18	1,79
3000	7,57	0,40
3329	7,97	0,00
4000	8,71	-0,74
5000	9,62	-1,65
6000	10,33	-2,36
7000	10,88	-2,91
8000	11,27	-3,30
9000	11,54	-3,57
10000	11,69	-3,72
11000	11,75	-3,78
12000	11,74	-3,77
13000	11,65	-3,68
14000	11,50	-3,53
15000	11,31	-3,34
16000	11,08	-3,11
17000	10,81	-2,84
18000	10,52	-2,55
19000	10,21	-2,24
20000	9,89	-1,92
21000	9,55	-1,58
22000	9,21	-1,24
23000	8,86	-0,89
24000	8,51	-0,54
25000	8,17	-0,20

x (m)	D (mg/l)	OD (mg/l)
25730	7,92	0,05
26000	7,82	0,15
27000	7,48	0,49
28000	7,15	0,82
29000	6,82	1,15
30000	6,51	1,46
31000	6,20	1,77
32000	5,90	2,07
33000	5,60	2,37
34000	5,32	2,65
35000	5,05	2,92
36000	4,79	3,18
37000	4,54	3,43
38000	4,30	3,67
39000	4,07	3,90
40000	3,86	4,11
41000	3,65	4,32
42000	3,45	4,52
43000	3,25	4,72
44000	3,07	4,90
45000	2,90	5,07
46000	2,74	5,23
47000	2,58	5,39
48000	2,43	5,54
49000	2,29	5,68
50000	2,16	5,81

No obstante, de la tabla anterior se desprende que la distancia final del tramo anaerobio (25730 m) no arroja una concentración exactamente de cero para el oxígeno disuelto si se utiliza el modelo de Streeter-Phelps; en realidad tal modelo predice que la zona anaerobia concluye a una distancia de 25571 m (realizando una iteración similar a la empleada para el cálculo de  $x_i$ , esto es, la longitud de las condiciones anaerobias calculada mediante el método de Gundelach y Castillo (1976) difiere de la obtenida mediante el modelo de Streeter-Phelps en 159 m.

Por otro lado, como resulta evidente en la tabla siguiente, los valores de oxígeno disuelto obtenidos para distancias mayores a 25730 m (considerando tal punto como un nuevo inicio para el funcionamiento normal del modelo de Streeter-Phelps) son sensiblemente menores de los que se habían calculado previamente con el modelo sin la corrección de la zona anaerobia:

x (m)	D (mg/l)	OD corregido (mg/l)	OD no corregido
25730	7,97	0,000	0,05
26000	7,97	0,002	0,15
27000	7,93	0,04	0,49
28000	7,85	0,12	0,82
29000	7,73	0,24	1,15
30000	7,59	0,38	1,46
31000	7,42	0,55	1,77
32000	7,23	0,74	2,07
33000	7,03	0,94	2,37
34000	6,81	1,16	2,65
35000	6,59	1,38	2,92
36000	6,36	1,61	3,18
37000	6,12	1,85	3,43
38000	5,89	2,08	3,67
39000	5,65	2,32	3,90
40000	5,42	2,55	4,11
41000	5,19	2,78	4,32
42000	4,96	3,01	4,52
43000	4,73	3,24	4,72
44000	4,51	3,46	4,90
45000	4,30	3,67	5,07
46000	4,10	3,87	5,23
47000	3,89	4,08	5,39
48000	3,70	4,27	5,54
49000	3,51	4,46	5,68
50000	3,33	4,64	5,81

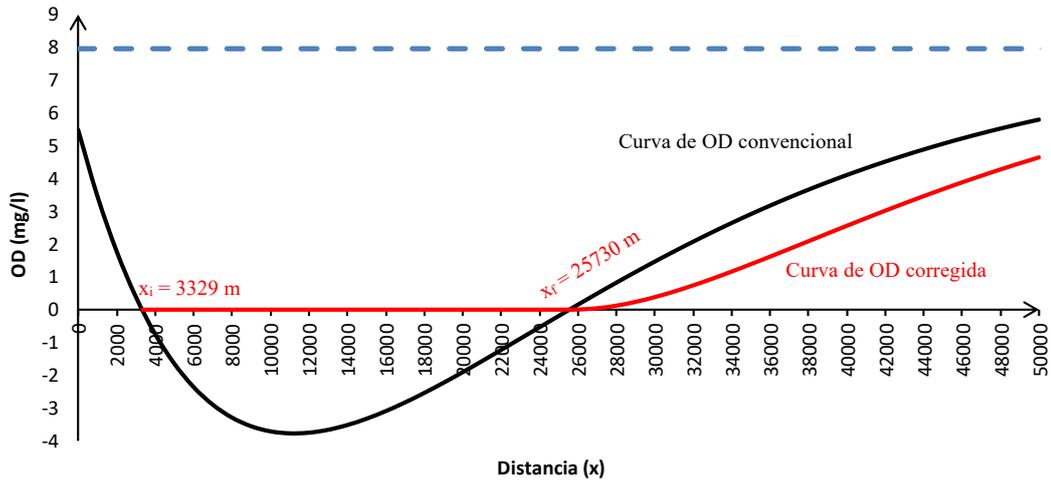
Es preciso aclarar que los valores del déficit de oxígeno disuelto mostrados en la tabla anterior y que producen las concentraciones correspondientes se obtienen mediante el modelo de Streeter-Phelps, pero utilizando los valores 7,97 mg/l y 5,83 mg/l para el  $D_0$  y  $L_0$ , respectivamente; además se debe tener en cuenta que el valor de la distancia x es la diferencia entre una distancia posterior al final del tramo anaerobio y el valor correspondiente a tal término (25730 m). Un ejemplo de cálculo se presenta a continuación:

$$D_{40000m} = 7,97 \frac{mg}{l} e^{-0,30 d^{-1} \left[ \frac{40000 m - 25730 m}{4320 \frac{m}{d}} \right]} + \frac{(0,41 d^{-1}) \left( 5,83 \frac{mg}{l} \right)}{0,30 d^{-1} - 0,41 d^{-1}} \left\{ e^{-0,41 d^{-1} \left[ \frac{40000 m - 25730 m}{4320 \frac{m}{d}} \right]} - e^{-0,30 d^{-1} \left[ \frac{40000 m - 25730 m}{4320 \frac{m}{d}} \right]} \right\}$$

$$\therefore D_{40000m} = 5,42 \frac{mg}{l}$$

Luego,  $OD_{40000m} = 7,97 \frac{mg}{l} - 5,42 \frac{mg}{l} = 2,55 mg/l$ .

Finalmente, el gráfico de abajo muestra la diferencia entre la curva convencional de OD obtenida mediante la ecuación clásica de Streeter-Phelps y la curva corregida para las condiciones anaerobias analizadas mediante el método de Gundelach y Castillo (1976):



**Figura 3-9** Comparación de los perfiles de oxígeno disuelto obtenidos en la resolución del ejercicio 3.5.

**Decaimiento de la DBO:** La zona anaerobia también produce una modificación en la variación de la DBO, ya que, a lo largo de ésta, su valor depende solo de la constante de reaireación, tal como lo establece la ecuación [3.156], que es la aplicable para el caso en que la sedimentación es despreciable. A modo de ejemplo se muestra su cálculo en el tramo anaerobio a los 5000 m:

$$L_{6000} = 18,23 \frac{mg}{l} - (0,30 d^{-1}) \left( 7,97 \frac{mg}{l} \right) \left( \frac{6000 m - 3329 m}{43200 \frac{m}{d}} \right) = 16,75 \frac{mg}{l}$$

Después del tramo anaerobio, la DBO una vez más decae de acuerdo con la ecuación [3.97], utilizando como valor inicial de DBO el correspondiente a la distancia  $x_f$ . El siguiente es un ejemplo de cálculo:

$$L = L_0 e^{-k_r \left( \frac{x}{v} \right)} = 18,23 \frac{mg}{l} \left[ e^{-0,41 d^{-1} \left( \frac{40000 m}{43200 \frac{m}{d}} \right)} \right] = 1,51 \frac{mg}{l}$$

El decaimiento de la DBO a lo largo de la longitud total de la corriente (50 km) se muestra en la siguiente tabla, teniendo en cuenta que, desde el punto de mezcla hasta el inicio del tramo anaerobio, la DBO se debe calcular también con la ecuación [3.100], pero utilizando como  $L_0$  el obtenido en las condiciones iniciales:

x (m)	DBO corregida (mg/l)	DBO no corregida
2000	20,68	20,68
3329	18,23	18,23
4000	17,86	17,10
6000	16,75	14,15
8000	15,64	11,70
10000	14,54	9,68
12000	13,43	8,00
14000	12,32	6,62
16000	11,22	5,48
18000	10,11	4,53
20000	9,00	3,75
22000	7,90	3,10
24000	6,79	2,56

x (m)	DBO corregida (mg/l)	DBO no corregida
25730	5,83	2,17
26000	5,68	2,12
28000	4,70	1,75
30000	3,89	1,45
32000	3,22	1,20
34000	2,66	0,99
36000	2,20	0,82
38000	1,82	0,68
40000	1,51	0,56
42000	1,25	0,46
44000	1,03	0,38
46000	0,85	0,32
48000	0,70	0,26

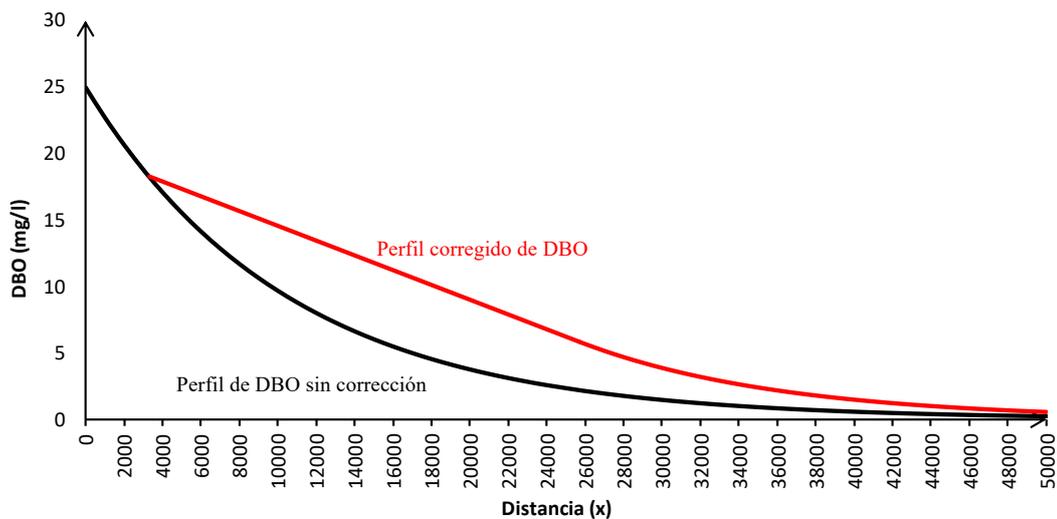


Figura 3-10 Comparación de los perfiles de DBO obtenidos en la resolución del ejercicio 3.5.

### 3.6 Nitrificación

La degradación de la materia orgánica con contenido de nitrógeno es un mecanismo adicional de consumo de oxígeno en los cuerpos de agua. Si se ignora la nitrificación, su omisión puede pagarse con un error bastante significativo en la estimación de una completa demanda de oxígeno. Una de las alternativas más comunes para incorporar la nitrificación en el modelo de Streeter-Phelps es el modelo de la demanda bioquímica de oxígeno nitrogenada (DBON) que, básicamente, sigue el mismo proceso cinético que la DBOC y, consecuentemente, a semejanza de las

ecuaciones [3.100] y [3.113], el modelo DBON se representa por el siguiente par de ecuaciones:

$$L_N = L_0^N e^{-k_n \left(\frac{x}{v}\right)} \quad \text{Ec. [3.166]}$$

$$D_N = D_0 \left( e^{\frac{-k_a x}{v}} \right) + \left( \frac{k_n L_0}{k_a - k_n} \right) \left[ e^{\frac{-k_n x}{v}} - e^{\frac{-k_a x}{v}} \right] \quad \text{Ec. [3.167]}$$

donde, como se recordará de la sección 3.3.2.2,  $L_0^N$  es la DBO última nitrogenada y  $k_n$  es la tasa de oxidación durante la nitrificación. De modo que, cuando se considera el efecto de la descomposición aerobia de la materia orgánica nitrogenada además de la carbonosa en el contexto del modelo de Streeter-Phelps, éste puede ser ampliado para ser expresado como la suma de ambos componentes; consecuentemente, las ecuaciones [3.100] y [3.113] se transforman en las expresiones para calcular la demanda de oxígeno total ( $L_T$ ) y el déficit de oxígeno disuelto causado por el ejercicio de la DBOC y la DBON ( $D_{CN}$ ), tal como sigue

$$L_T = L + L_N = L_0 e^{-k_r \left(\frac{x}{v}\right)} + L_0^N e^{-k_n \left(\frac{x}{v}\right)} \quad \text{Ec. [3.168]}$$

$$D_T = D_0 \left( e^{\frac{-k_a x}{v}} \right) + \left( \frac{k_a L_0}{k_a - k_r} \right) \left[ e^{\frac{-k_r x}{v}} - e^{\frac{-k_a x}{v}} \right] + \left( \frac{k_n L_0}{k_a - k_n} \right) \left[ e^{\frac{-k_n x}{v}} - e^{\frac{-k_a x}{v}} \right] \quad \text{Ec. [3.169]}$$

No obstante, con el paso del tiempo este enfoque ha sido descartado como método válido para representar el efecto de la nitrificación en el balance del oxígeno disuelto en un cuerpo de agua. Este rechazo de la comunidad científica se explica en términos de tres defectos que provocan el fallo del modelo DBON para representar satisfactoriamente el aporte de la nitrificación al déficit del oxígeno disuelto: (a) la cuantificación conjunta del nitrógeno orgánico y el amoniacal dentro de la DBON tiende a provocar la omisión de un tiempo de retardo en el proceso a medida que crece la cantidad de nitrógeno orgánico inicial, (b) aunque la nitrificación es un proceso que ocurre en dos etapas consecutivas, el modelo DBON lo simplifica a una reacción de primer orden con una tasa de descomposición global; y (c) el modelo ignora el impacto de factores potenciales de retraso

e inhibición del proceso tales como la concentración de bacterias nitrificantes, el pH, y la concentración de oxígeno disuelto que debería ser superior a 2 mg/l (Chapra, 2008; Chin, 2013).

Por todo lo anterior, numerosos esfuerzos se han realizado para describir satisfactoriamente el efecto de la nitrificación en el decaimiento del oxígeno disuelto. Una de estas alternativas es el modelo propuesto por (Chapra, 2008), que considera por separado la razón de cambio de la concentración con respecto al tiempo de las diferentes especies involucradas en la nitrificación: nitrógeno orgánico, amonio, nitritos y nitratos. Tales derivadas están dadas por

$$\frac{dN_{org}}{dt} = -k_o N_{org} \quad \text{Ec. [3.170]}$$

$$\frac{dNH_4}{dt} = k_o N_{org} - k_m NH_4 \quad \text{Ec. [3.171]}$$

$$\frac{dNO_2}{dt} = k_m NH_4 - k_i NO_2 \quad \text{Ec. [3.172]}$$

$$\frac{dNO_3}{dt} = k_i NO_2 \quad \text{Ec. [3.173]}$$

donde,  $k_o$ ,  $k_m$  y  $k_i$  son las tasas de oxidación del nitrógeno orgánico a amonio, del amonio a nitritos y de nitritos a nitratos, respectivamente.

La solución de las ecuaciones [3.170], [3.171], [3.172] y [3.173] da la concentración de cada una de las cuatro especies de nitrógeno involucradas en la nitrificación, y se obtiene aplicando los métodos precedentes que se utilizaron para estudiar la cinética de reacciones y el modelo de Streeter-Phelps. El procedimiento detallado por especie se presenta a continuación, básicamente con la intención de reforzar la habilidad de deducción, pues los métodos ya se han aplicado y descrito claramente con anterioridad:

- Concentración de  $N_{org}$ : La deducción se realiza mediante separación de variables para una cinética de primer orden, tal como se realizó en casos anteriores

$$\int_{N_{org_0}}^{N_{org}} \frac{dN_{org}}{N_{org}} = -k_o \int_0^t dt \quad \text{Ec. [3.174]}$$

$$N_{org} = N_{org_0} e^{-k_o t} \quad \text{Ec. [3.175]}$$

- Concentración de  $NH_4$ : Por tratarse de una ecuación diferencial lineal de primer orden, su solución se desarrolla a semejanza de la deducción del modelo de Streeter-Phelps.

Sustitución de ecuación [3.175]

$$\frac{dNH_4}{dt} = k_o N_{org_0} e^{-k_o t} - k_m NH_4 \quad \text{Ec. [3.176]}$$

Arreglo a la forma estándar de una EDO lineal

$$\frac{dNH_4}{dt} + k_m NH_4 = k_o N_{org_0} e^{-k_o t} \quad \text{Ec. [3.177]}$$

Multiplicación por el factor integrante

$$\frac{d(NH_4 \cdot e^{k_m t})}{dt} = k_o N_{org_0} e^{-k_o t} e^{k_m t} \quad \text{Ec. [3.178]}$$

Integración de miembros; ley de exponentes

$$NH_4 \cdot e^{k_m t} = k_o N_{org_0} \int e^{(k_m - k_o)t} dt \quad \text{Ec. [3.179]}$$

División por el factor integrante

$$NH_4 = \left( \frac{k_o N_{org_0}}{k_m - k_o} \right) \frac{e^{(k_m - k_o)t}}{e^{k_m t}} + c e^{-k_m t} \quad \text{Ec. [3.180]}$$

Cálculo de la constante de integración

$$NH_4 = \left( \frac{k_o N_{org_0}}{k_m - k_o} \right) e^{-k_o t} + \left( NH_{4_0} - \frac{k_o N_{org_0}}{k_m - k_o} \right) e^{-k_m t} \quad \text{Ec. [3.181]}$$

$$\therefore NH_4 = NH_{4_0} e^{-k_m t} + \left( \frac{k_o N_{org_0}}{k_m - k_o} \right) (e^{-k_o t} - e^{-k_m t}) \quad \text{Ec. [3.182]}$$

- Concentración de  $NO_2$ : su obtención requiere también la solución de una ecuación diferencial lineal de primer orden, a semejanza del procedimiento aplicado para la concentración del amonio.

$$\frac{dNO_2}{dt} = k_m \left[ NH_{40} e^{-k_m t} + \left( \frac{k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) (e^{-k_o t} - e^{-k_m t}) \right] - k_i NO_2 \quad \text{Ec. [3.183]}$$

$$\frac{dNO_2}{dt} + k_i NO_2 = k_m \left[ NH_{40} e^{-k_m t} + \left( \frac{k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) (e^{-k_o t} - e^{-k_m t}) \right] \quad \text{Ec. [3.184]}$$

$$\frac{d(NO_2 \cdot e^{k_i t})}{dt} = k_m \left[ NH_{40} e^{-k_m t} + \left( \frac{k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) (e^{-k_o t} - e^{-k_m t}) \right] e^{k_i t} \quad \text{Ec. [3.185]}$$

$$NO_2 \cdot e^{k_i t} = k_m \left[ NH_{40} \int e^{-k_m t} e^{k_i t} + \left( \frac{k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) \int (e^{-k_o t} - e^{-k_m t}) e^{k_i t} \right] \quad \text{Ec. [3.186]}$$

$$NO_2 = \frac{k_m}{e^{k_i t}} \left\{ \frac{NH_{40}}{k_i - k_m} e^{(k_i - k_m)t} + \left( \frac{k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) \left[ \frac{e^{(k_i - k_o)t}}{k_i - k_o} - \frac{e^{(k_i - k_m)t}}{k_i - k_m} \right] + c e^{-k_i t} \right\} \quad \text{Ec. [3.187]}$$

$$NO_2 = \frac{k_m NH_{40}}{k_i - k_m} e^{-k_m t} + \left( \frac{k_m k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) \left[ \frac{e^{-k_o t}}{k_i - k_o} - \frac{e^{-k_m t}}{k_i - k_m} \right] + \left[ 0 - \frac{k_m NH_{40}}{k_i - k_m} - \frac{k_m k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \left( \frac{1}{k_i - k_o} - \frac{1}{k_i - k_m} \right) \right] e^{-k_i t} \quad \text{Ec. [3.188]}$$

$$NO_2 = \frac{k_m NH_{40}}{k_i - k_m} e^{-k_m t} + \left( \frac{k_m k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) \left[ \frac{e^{-k_o t}}{k_i - k_o} - \frac{e^{-k_m t}}{k_i - k_m} \right] - \left( \frac{k_m NH_{40}}{k_i - k_m} \right) e^{-k_i t} - \frac{k_m k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \left( \frac{e^{-k_i t}}{k_i - k_o} - \frac{e^{-k_i t}}{k_i - k_m} \right) \quad \text{Ec. [3.189]}$$

$$NO_2 = \frac{k_m NH_{40}}{k_i - k_m} (e^{-k_m t} - e^{-k_i t}) + \left( \frac{k_m k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) \left[ \frac{e^{-k_o t}}{k_i - k_o} - \frac{e^{-k_m t}}{k_i - k_m} - \left( \frac{e^{-k_i t}}{k_i - k_o} - \frac{e^{-k_i t}}{k_i - k_m} \right) \right] \quad \text{Ec. [3.190]}$$

$$NO_2 = \frac{k_m NH_{40}}{k_i - k_m} (e^{-k_m t} - e^{-k_i t}) + \left( \frac{k_m k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) \left[ \left( \frac{e^{-k_o t}}{k_i - k_o} - \frac{e^{-k_i t}}{k_i - k_o} \right) - \left( \frac{e^{-k_m t}}{k_i - k_m} - \frac{e^{-k_i t}}{k_i - k_m} \right) \right] \quad \text{Ec. [3.191]}$$


---

$$\therefore NO_2 = \frac{k_m NH_{40}}{k_i - k_m} (e^{-k_m t} - e^{-k_i t}) + \left( \frac{k_m k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) \left[ \frac{e^{-k_o t} - e^{-k_i t}}{k_i - k_o} - \frac{e^{-k_m t} - e^{-k_i t}}{k_i - k_m} \right] \quad \text{Ec. [3.192]}$$

- Concentración de  $NO_3$ : por su forma, la ecuación [3.173] se resuelve también por separación de variables, pero luego de expresar el producto  $k_i NO_2$  por la expresión resultante de despejar tal producto en la ecuación [3.172].

$$\frac{dNO_3}{dt} = k_m NH_4 - \frac{dNO_2}{dt} \quad \text{Ec. [3.193]}$$

$$\frac{dNO_3}{dt} = -\frac{dN_{org}}{dt} - \frac{dNH_4}{dt} - \frac{dNO_2}{dt} \quad \text{Ec. [3.194]}$$

$$\int_{N_{org0} + NH_{40}}^{NO_3} dNO_3 = \int_0^t \left( -\frac{dN_{org}}{dt} - \frac{dNH_4}{dt} - \frac{dNO_2}{dt} \right) dt \quad \text{Ec. [3.195]}$$

$$NO_3 - (N_{org0} + NH_{40}) = -\int_0^t \frac{dN_{org}}{dt} dt - \int_0^t \frac{dNH_4}{dt} dt - \int_0^t \frac{dNO_2}{dt} dt \quad \text{Ec. [3.196]}$$

$$NO_3 - (N_{org0} + NH_{40}) = -\int_0^t \frac{dN_{org}}{dt} dt - \int_0^t \frac{dNH_4}{dt} dt - \int_0^t \frac{dNO_2}{dt} dt \quad \text{Ec. [3.197]}$$

$$\therefore NO_3 = N_{org0} + NH_{40} - N_{org0} e^{-k_o t} - NH_{40} e^{-k_m t} - \left( \frac{k_o N_{org}}{k_m - k_o} \right) (e^{-k_o t} - e^{-k_m t}) - \frac{k_m NH_{40}}{k_i - k_m} (e^{-k_m t} - e^{-k_i t}) - \left( \frac{k_m k_o N_{org}}{k_m - k_o} \right) \left[ \frac{e^{-k_o t} - e^{-k_i t}}{k_i - k_o} - \frac{e^{-k_m t} - e^{-k_i t}}{k_i - k_m} \right] \quad \text{Ec. [3.198]}$$

Con todos los elementos anteriores, es posible realizar un balance centrado en el déficit de oxígeno disuelto y obtener una ecuación que permita calcular tal déficit en función de la concentración de las formas de nitrógeno involucradas en la formación de nitratos, mediante la solución de una ecuación diferencial semejante a [3.98], que incluye esta vez, además de una fuente de oxígeno, que sigue siendo la reaireación, dos sumideros de éste (la oxidación del amonio y la oxidación del nitrito). Tal balance está dado por

$$\frac{dD_N}{dt} = r_{om}k_mNH_4 + r_{oi}k_iNO_2 - k_aD \tag{Ec. [3.199]}$$

donde,  $r_{om}$  y  $r_{oi}$  representan la cantidad de oxígeno consumido por las bacterias en la formación de nitratos a partir de la oxidación del amonio y la oxidación de los nitritos, respectivamente. Sus valores son 3,43 gO<sub>2</sub>/gN y 1,14 gO<sub>2</sub>/gN. El procedimiento de solución de la ecuación [3.199] se detalla en los siguientes pasos sucesivos:

Sustitución de ecuaciones [3.182] y [3.192] en [3.199]

$$\begin{aligned} \frac{dD_N}{dt} + k_aD = & r_{om}k_m \left\{ NH_{40}e^{-k_mt} + \left( \frac{k_oN_{org0}}{k_m - k_o} \right) (e^{-k_0t} - e^{-k_mt}) \right\} \\ & + r_{oi}k_i \left\{ \frac{k_mNH_{40}}{k_i - k_m} (e^{-k_mt} - e^{-k_it}) + \left( \frac{k_mk_oN_{org}}{k_m - k_o} \right) \left[ \frac{e^{-k_0t} - e^{-k_it}}{k_i - k_o} - \frac{e^{-k_mt} - e^{-k_it}}{k_i - k_m} \right] \right\} \end{aligned} \tag{Ec. [3.200]}$$

Eliminación de signos de agrupación

$$\begin{aligned} \frac{dD_N}{dt} + k_aD = & r_{om}k_mNH_{40}e^{-k_mt} + r_{om}k_m \left( \frac{k_oN_{org0}}{k_m - k_o} \right) e^{-k_0t} - r_{om}k_m \left( \frac{k_oN_{org0}}{k_m - k_o} \right) e^{-k_mt} + r_{oi}k_i \frac{k_mNH_{40}}{k_i - k_m} e^{-k_mt} \\ & - r_{oi}k_i \frac{k_mNH_{40}}{k_i - k_m} e^{-k_it} + r_{oi}k_i \left( \frac{k_mk_oN_{org0}}{k_m - k_o} \right) \left( \frac{e^{-k_0t}}{k_i - k_o} \right) - r_{oi}k_i \left( \frac{k_mk_oN_{org0}}{k_m - k_o} \right) \left( \frac{e^{-k_it}}{k_i - k_o} \right) \\ & - r_{oi}k_i \left( \frac{k_mk_oN_{org0}}{k_m - k_o} \right) \left( \frac{e^{-k_mt}}{k_i - k_m} \right) + r_{oi}k_i \left( \frac{k_mk_oN_{org0}}{k_m - k_o} \right) \left( \frac{e^{-k_it}}{k_i - k_m} \right) \end{aligned} \tag{Ec. [3.201]}$$

Agrupación  
por factor  
común

$$\begin{aligned} \frac{dD_N}{dt} + k_a D = & \left\{ r_{om} k_m \left( \frac{k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) + r_{oi} k_i \left[ \frac{k_m k_o N_{org0}}{(k_m - k_o)(k_i - k_o)} \right] \right\} e^{-k_o t} \\ & + \left\{ r_{om} k_m NH_{40} - r_{om} k_m \left( \frac{k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) + r_{oi} k_i \frac{k_m NH_{40}}{k_i - k_m} - r_{oi} k_i \left[ \frac{k_m k_o N_{org0}}{(k_m - k_o)(k_i - k_m)} \right] \right\} e^{-k_m t} \\ & + \left\{ r_{oi} k_i \frac{k_m NH_{40}}{k_m - k_i} - r_{oi} k_i \left[ \frac{k_m k_o N_{org0}}{(k_m - k_o)(k_i - k_o)} \right] + r_{oi} k_i \left[ \frac{k_m k_o N_{org0}}{(k_m - k_o)(k_i - k_m)} \right] \right\} e^{-k_i t} \end{aligned} \quad \begin{array}{l} \text{Ec.} \\ [3.202] \end{array}$$

Uso de variable  
sustituta 1

$$N_o = r_{om} k_m \left( \frac{k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) + r_{oi} k_i \left[ \frac{k_m k_o N_{org0}}{(k_m - k_o)(k_i - k_o)} \right] \quad \begin{array}{l} \text{Ec.} \\ [3.203] \end{array}$$

Uso de variable  
sustituta 2

$$N_m = r_{om} k_m NH_{40} - r_{om} k_m \left( \frac{k_o N_{org0}}{k_m - k_o} \right) + r_{oi} k_i \frac{k_m NH_{40}}{k_i - k_m} - r_{oi} k_i \left[ \frac{k_m k_o N_{org0}}{(k_m - k_o)(k_i - k_m)} \right] \quad \begin{array}{l} \text{Ec.} \\ [3.204] \end{array}$$

Uso de variable  
sustituta 3

$$N_i = r_{oi} k_i \frac{k_m NH_{40}}{k_m - k_i} - r_{oi} k_i \left[ \frac{k_m k_o N_{org0}}{(k_m - k_o)(k_i - k_o)} \right] + r_{oi} k_i \left[ \frac{k_m k_o N_{org0}}{(k_m - k_o)(k_i - k_m)} \right] \quad \begin{array}{l} \text{Ec.} \\ [3.205] \end{array}$$

$$\frac{dD_N}{dt} + k_a D = N_o e^{-k_o t} + N_m e^{-k_m t} + N_i e^{-k_i t} \quad \begin{array}{l} \text{Ec.} \\ [3.206] \end{array}$$

$$\frac{d(D_N \cdot e^{k_a t})}{dt} = (N_o e^{-k_o t} + N_m e^{-k_m t} + N_i e^{-k_i t}) e^{k_a t} \quad \begin{array}{l} \text{Ec.} \\ [3.207] \end{array}$$

$$\int d(D_N \cdot e^{k_a t}) = \int (N_o e^{-k_o t} + N_m e^{-k_m t} + N_i e^{-k_i t}) e^{k_a t} dt \quad \begin{array}{l} \text{Ec.} \\ [3.208] \end{array}$$

$$D_N e^{k_a t} = N_o \int e^{(k_a - k_o)t} dt + N_m \int e^{(k_a - k_m)t} dt + N_i \int e^{(k_a - k_i)t} dt \quad \begin{array}{l} \text{Ec.} \\ [3.209] \end{array}$$

$$D_N = \frac{N_o}{e^{k_a t}} \left[ \frac{e^{(k_a - k_o)t}}{k_a - k_o} \right] + \frac{N_m}{e^{k_a t}} \left[ \frac{e^{(k_a - k_m)t}}{k_a - k_m} \right] + \frac{N_i}{e^{k_a t}} \left[ \frac{e^{(k_a - k_i)t}}{k_a - k_i} \right] + c e^{-k_a t} \quad \text{Ec. [3.210]}$$

Cálculo del valor de la constante de integración

$$D_N = \frac{N_o}{e^{k_a t}} \left[ \frac{e^{(k_a - k_o)t}}{k_a - k_o} \right] - \frac{N_m}{e^{k_a t}} \left[ \frac{e^{(k_a - k_m)t}}{k_a - k_m} \right] - \frac{N_i}{e^{k_a t}} \left[ \frac{e^{(k_a - k_i)t}}{k_a - k_i} \right] + \left[ D_0 - \frac{N_o}{k_a - k_o} - \frac{N_m}{k_a - k_m} - \frac{N_i}{k_a - k_i} \right] e^{-k_a t} \quad \text{Ec. [3.211]}$$

$$D_N = D_0 e^{-k_a t} + \left[ \left( \frac{N_o e^{-k_o t}}{k_a - k_o} \right) - \left( \frac{N_o e^{-k_a t}}{k_a - k_o} \right) \right] + \left[ \left( \frac{N_m e^{-k_m t}}{k_a - k_m} \right) - \left( \frac{N_m e^{-k_a t}}{k_a - k_m} \right) \right] + \left[ \left( \frac{N_i e^{-k_i t}}{k_a - k_i} \right) - \left( \frac{N_i e^{-k_a t}}{k_a - k_i} \right) \right] \quad \text{Ec. [3.212]}$$

$$\therefore D_N = D_0 e^{-k_a t} + \frac{N_o}{k_a - k_o} (e^{-k_o t} - e^{-k_a t}) + \frac{N_m}{k_a - k_m} (e^{-k_m t} - e^{-k_a t}) + \frac{N_i}{k_a - k_i} (e^{-k_i t} - e^{-k_a t}) \quad \text{Ec. [3.213]}$$

Finalmente, se si precisa determinar el déficit máximo de oxígeno disuelto que ocurre en el punto crítico, uno de los mejores métodos para ello es el de Newton, el cual requiere el cálculo de diferentes valores posibles  $D_{i+1}$  hasta obtener el valor de convergencia final; esto es

$$t_{i+1} = t_i - \frac{D'(t)}{D''(t)} \quad \text{Ec. [3.214]}$$

donde  $D'(t)$  y  $D''(t)$  son las primera y segunda derivada, respectivamente, de la ecuación del déficit de oxígeno disuelto por nitrificación ( $D_N$ ) y se expresan como

$$D' = -D_0 k_a e^{-k_a t} + \frac{N_o}{k_a - k_o} [-k_o e^{-k_o t} - k_a e^{-k_a t}] + \frac{N_m}{k_a - k_m} [-k_m e^{-k_m t} - k_a e^{-k_a t}] + \frac{N_i}{k_a - k_i} [-k_i e^{-k_i t} - k_a e^{-k_a t}] \quad \text{Ec. [3.215]}$$

$$D'' = D_0 k_a^2 e^{-k_a t} + \frac{N_o}{k_a - k_o} [k_o^2 e^{-k_o t} + k_a^2 e^{-k_a t}] + \frac{N_m}{k_a - k_m} [k_m^2 e^{-k_m t} + k_a^2 e^{-k_a t}] + \frac{N_i}{k_a - k_i} [k_i^2 e^{-k_i t} + k_a^2 e^{-k_a t}] \quad \text{Ec. [3.216]}$$

**Ejercicio 3.6**

El efluente de una planta de tratamiento de aguas residuales municipales que no incluye una unidad de eliminación de nitrógeno se descarga a un río a razón de 300 l/s, una temperatura de 20°C, una concentración de oxígeno disuelto igual a 3,00 mg/l y con un contenido de nitrógeno orgánico y de amonio igual a 20 mg/l y 35 mg/l, respectivamente. La corriente receptora, antes de la descarga, se caracteriza por valores promedio de caudal, velocidad, profundidad, oxígeno disuelto y temperatura iguales a 1,45 m<sup>3</sup>/s, 0,15 m/s, 1,50 m, 7 mg/l y 20°C, en ese orden; además, su contenido de compuestos de nitrógeno se puede considerar despreciable. Para medir el impacto del nitrógeno en la corriente natural, un grupo de ingenieros ambientales determinó en el laboratorio el valor de las constantes cinéticas incluidas en el modelo de nitrificación por especies, obteniendo los resultados  $k_o = 0,50 \text{ d}^{-1}$ ,  $k_m = 0,40 \text{ d}^{-1}$  y  $k_i = 0,60 \text{ d}^{-1}$ . Con base en esta información, determine (a) el perfil de OD o curva sag producida por el proceso de nitrificación; (b) la concentración mínima de oxígeno disuelto que se producirá en el río, y (c) trace las curvas de concentración de las cuatro formas de nitrógeno en función de la distancia aguas debajo de la mezcla.

**Solución:****A) Obtención de la curva sag**

**Condiciones iniciales:** Se debe realizar un balance de masa para determinar las condiciones iniciales de la corriente receptora en el punto de mezcla.

$$OD_0 = \frac{Q_r \cdot OD_r + Q_d \cdot OD_d}{Q_r + Q_d} = \frac{\left(1,45 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right) \left(7 \frac{\text{mg}}{\text{l}}\right) + \left(0,300 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right) \left(3,00 \frac{\text{mg}}{\text{l}}\right)}{1,45 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} + 0,300 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}} = 6,31 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

$$N_{org_0} = \frac{Q_r \cdot N_{org_r} + Q_d \cdot N_{org_d}}{Q_r + Q_d} = \frac{\left(1,45 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right) \left(0 \frac{\text{mg}}{\text{l}}\right) + \left(0,300 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right) \left(20,00 \frac{\text{mg}}{\text{l}}\right)}{1,45 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} + 0,300 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}} = 3,43 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

$$NH_{4_0} = \frac{Q_r \cdot NH_{4_r} + Q_d \cdot NH_{4_d}}{Q_r + Q_d} = \frac{\left(1,45 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right) \left(0 \frac{\text{mg}}{\text{l}}\right) + \left(0,300 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}\right) \left(35,00 \frac{\text{mg}}{\text{l}}\right)}{1,45 \frac{\text{m}^3}{\text{s}} + 0,300 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}} = 6,00 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

$$OD_s = \exp \left[ -139,34411 + \frac{1,575701 \times 10^5}{(293,15 \text{ K})} - \frac{6,642308 \times 10^7}{(293,15 \text{ K})^2} + \frac{1,243800 \times 10^{10}}{(293,15 \text{ K})^3} - \frac{8,621949 \times 10^{11}}{(293,15 \text{ K})^4} \right]$$

$$= 9,10 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

$$D_0 = OD_s - OD_0 = 9,10 \frac{\text{mg}}{\text{l}} - 6,31 \frac{\text{mg}}{\text{l}} = 2,79 \frac{\text{mg}}{\text{l}}$$

**Cálculo y corrección de las constantes cinéticas:** Se calcula la constante de reaeración utilizando los datos proporcionados de velocidad y profundidad, que corresponden a la fórmula empírica de O'Connor y Dobbins; sin embargo, no es necesaria la corrección de su valor porque la temperatura resultante de la mezcla es 20°C.

$$k_a = 3,93 \frac{\left(0,15 \frac{\text{m}}{\text{s}}\right)^{0,5}}{\left(1,5 \text{ m}\right)^{1,5}} = 0,83 \text{ d}^{-1}$$

**Cálculo de las cantidades  $N_o$ ,  $N_m$  y  $N_i$ :** Sus valores se obtienen sustituyendo los datos en las ecuaciones [3.203], [3.204] y [3.205].

$$N_o = 3,43(0,40 d^{-1}) \left[ \frac{(0,50 d^{-1}) \left( 3,43 \frac{mg}{l} \right)}{0,40 d^{-1} - 0,50 d^{-1}} \right] + 1,14(0,60 d^{-1}) \left[ \frac{(0,40 d^{-1})(0,50 d^{-1}) \left( 3,43 \frac{mg}{l} \right)}{(0,40 d^{-1} - 0,50 d^{-1})(0,60 d^{-1} - 0,50 d^{-1})} \right] = -70,45 \frac{mg}{l \cdot d}$$

$$N_m = (3,43)(0,40 d^{-1}) \left( 6,00 \frac{mg}{l} \right) - (3,43)(0,40 d^{-1}) \left[ \frac{(0,50 d^{-1}) \left( 3,43 \frac{mg}{l} \right)}{0,40 d^{-1} - 0,50 d^{-1}} \right] + (1,14)(0,60 d^{-1}) \left[ \frac{(0,40 d^{-1}) \left( 6,00 \frac{mg}{l} \right)}{0,60 d^{-1} - 0,40 d^{-1}} \right] - (1,14)(0,60 d^{-1}) \left[ \frac{(0,40 d^{-1})(0,50 d^{-1}) \left( 3,43 \frac{mg}{l} \right)}{(0,40 d^{-1} - 0,50 d^{-1})(0,60 d^{-1} - 0,40 d^{-1})} \right] = 63,43 \frac{mg}{l \cdot d}$$

$$N_i = (1,14)(0,60 d^{-1}) \left[ \frac{(0,40 d^{-1}) \left( 6,00 \frac{mg}{l} \right)}{0,40 d^{-1} - 0,60 d^{-1}} \right] - (1,14)(0,60 d^{-1}) \left[ \frac{(0,40 d^{-1})(0,50 d^{-1}) \left( 3,43 \frac{mg}{l} \right)}{(0,40 d^{-1} - 0,50 d^{-1})(0,60 d^{-1} - 0,50 d^{-1})} \right] + (1,14)(0,60 d^{-1}) \left[ \frac{(0,40 d^{-1})(0,50 d^{-1}) \left( 3,43 \frac{mg}{l} \right)}{(0,40 d^{-1} - 0,50 d^{-1})(0,60 d^{-1} - 0,40 d^{-1})} \right] = 15,25 \frac{mg}{l \cdot d}$$

**Cálculo del déficit y concentración de oxígeno disuelto:** El déficit de oxígeno disuelto causado por la nitrificación se calcula mediante la ecuación [3.213] para diferentes distancias a partir del punto de mezcla; como ejemplo, se presenta el cálculo correspondiente a una distancia de 4000 m:

$$D_N = \left( 2,79 \frac{mg}{l} \right) e^{-0,83 d^{-1} \left( \frac{4000 m}{12960 \frac{m}{d}} \right)} + \frac{-70,45 \frac{mg}{l \cdot d}}{0,83 d^{-1} - 0,50 d^{-1}} \left[ e^{-0,50 d^{-1} \left( \frac{4000 m}{12960 \frac{m}{d}} \right)} - e^{-0,83 d^{-1} \left( \frac{4000 m}{12960 \frac{m}{d}} \right)} \right] + \frac{63,43 \frac{mg}{l \cdot d}}{0,83 d^{-1} - 0,40 d^{-1}} \left[ e^{-0,40 d^{-1} \left( \frac{4000 m}{12960 \frac{m}{d}} \right)} - e^{-0,83 d^{-1} \left( \frac{4000 m}{12960 \frac{m}{d}} \right)} \right] + \frac{15,25 \frac{mg}{l \cdot d}}{0,83 d^{-1} - 0,60 d^{-1}} \left[ e^{-0,60 d^{-1} \left( \frac{4000 m}{12960 \frac{m}{d}} \right)} - e^{-0,83 d^{-1} \left( \frac{4000 m}{12960 \frac{m}{d}} \right)} \right] \therefore D_N = 4,42 \frac{mg}{l}$$

Luego, la concentración de oxígeno disuelto resultante a esa distancia se calcula mediante una expresión similar a la ecuación [3.114], esto es, restando el déficit causado por la nitrificación de la concentración de saturación del oxígeno disuelto:

$$OD_{4000} = 9,10 \frac{mg}{l} - 4,42 \frac{mg}{l} = 4,68 \frac{mg}{l}$$

La siguiente tabla muestra el cálculo del déficit y el oxígeno disuelto hasta una distancia de 100 km desde el punto de mezcla con los que se graficará la curva sag correspondiente:

x (m)	t (d)	D (mg/l)	OD (mg/l)
0	0,000	2,79	6,31
2000	0,154	3,65	5,45
4000	0,309	4,42	4,68
6000	0,463	5,10	4,00
8000	0,617	5,70	3,40
10000	0,772	6,22	2,88
12000	0,926	6,67	2,43
14000	1,080	7,05	2,05
16000	1,235	7,36	1,74
18000	1,389	7,62	1,48
20000	1,543	7,83	1,27
22000	1,698	7,99	1,11
24000	1,852	8,11	0,99
26000	2,006	8,19	0,91
28000	2,160	8,23	0,87
30000	2,315	8,23	0,87
32000	2,469	8,21	0,89
34000	2,623	8,17	0,93
36000	2,778	8,10	1,00
38000	2,932	8,01	1,09
40000	3,086	7,90	1,20
42000	3,241	7,77	1,33
44000	3,395	7,63	1,47
46000	3,549	7,48	1,62
48000	3,704	7,32	1,78
50000	3,858	7,16	1,94
52000	4,012	6,98	2,12
54000	4,167	6,80	2,30
56000	4,321	6,62	2,48
58000	4,475	6,43	2,67
60000	4,630	6,24	2,86
62000	4,784	6,05	3,05
64000	4,938	5,86	3,24
66000	5,093	5,67	3,43
68000	5,247	5,48	3,62
70000	5,401	5,29	3,81
72000	5,556	5,10	4,00
74000	5,710	4,92	4,18
76000	5,864	4,74	4,36
78000	6,019	4,56	4,54
80000	6,173	4,39	4,71
82000	6,327	4,22	4,88
84000	6,481	4,05	5,05
86000	6,636	3,89	5,21
88000	6,790	3,73	5,37
90000	6,944	3,58	5,52
92000	7,099	3,43	5,67
94000	7,253	3,29	5,81
96000	7,407	3,15	5,95
98000	7,562	3,01	6,09
100000	7,716	2,88	6,22

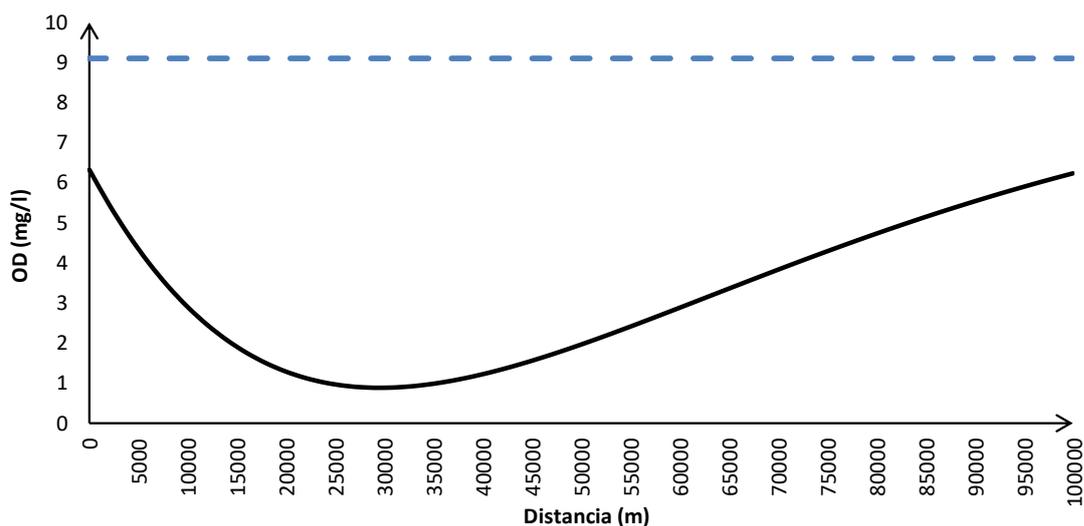


Figura 3-11 Perfil del OD producido por el proceso de nitrificación en el ejercicio 3.6.

### B) Determinación del punto crítico

La distancia crítica se halla mediante el método de Newton empleando las ecuaciones [3.215] y [3.216]. Los resultados se resumen en la siguiente tabla:

t (d)	D (t)	D'(t)	D''(t)
2,000	8,18	0,28	-1,43
2,194	8,23	0,02	-1,26
2,208	8,23	0,00	-1,24
2,208	8,23	0,00	-1,24

Resulta evidente que la sucesión alcanza un valor máximo del déficit de oxígeno disuelto a un tiempo de 2,208 d, el cual representa el tiempo crítico. Luego, la distancia crítica es

$$x_c = v \cdot t_c = \left(12960 \frac{m}{d}\right) (2,208 d) = 28616 m$$

El déficit crítico se obtiene sustituyendo directamente el valor del tiempo crítico en la ecuación [3.213]

$$\begin{aligned}
 D_c = & \left(2,79 \frac{mg}{l}\right) e^{-(0,83 d^{-1})(2,208 d)} + \frac{-70,45 \frac{mg}{l \cdot d}}{0,83 d^{-1} - 0,50 d^{-1}} \left[ e^{-(0,50 d^{-1})(2,208 d)} - e^{-(0,83 d^{-1})(2,208 d)} \right] \\
 & + \frac{63,43 \frac{mg}{l \cdot d}}{0,83 d^{-1} - 0,40 d^{-1}} \left[ e^{-(0,40 d^{-1})(2,208 d)} - e^{-(0,83 d^{-1})(2,208 d)} \right] \\
 & + \frac{15,25 \frac{mg}{l \cdot d}}{0,83 d^{-1} - 0,60 d^{-1}} \left[ e^{-(0,60 d^{-1})(2,208 d)} - e^{-(0,83 d^{-1})(2,208 d)} \right] \\
 \therefore D_c = & 8,23 \frac{mg}{l}
 \end{aligned}$$

Consecuentemente, el valor mínimo de oxígeno disuelto es

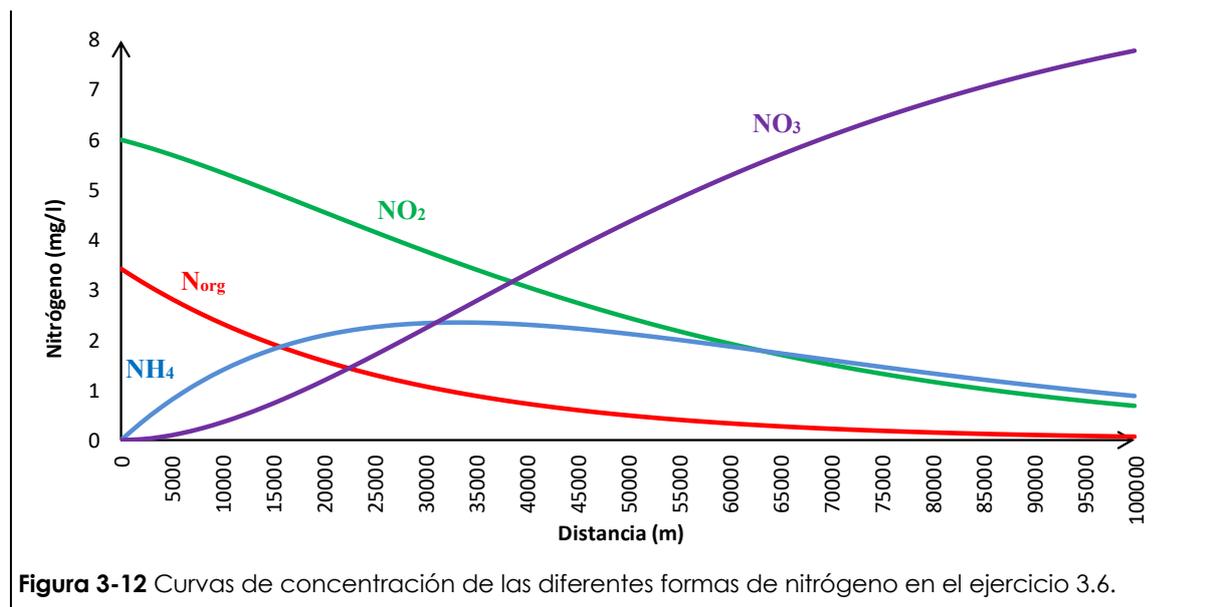
$$OD_{min} = OD_s - D_c = 9,10 \frac{mg}{l} - 8,23 \frac{mg}{l} = 0,87 \frac{mg}{l}$$

### C) Variación de las cuatro formas del nitrógeno aguas abajo del punto de mezcla

La concentración del nitrógeno orgánico, amonio, nitritos y nitratos a una determinada distancia se obtiene reemplazando las condiciones iniciales y el valor de las constantes

cinéticas en las ecuaciones [3.175], [3.182], [3.192] y [3.198]. Los resultados hasta una distancia de 100 km desde el punto de mezcla, y su gráfico, se presentan a continuación:

x (m)	N <sub>org</sub> (mg/l)	NH <sub>4</sub> (mg/l)	NO <sub>2</sub> (mg/l)	NO <sub>3</sub> (mg/l)
0	3,43	6,00	0,00	0,00
2000	3,18	5,89	0,35	0,02
4000	2,94	5,76	0,66	0,06
6000	2,72	5,63	0,94	0,14
8000	2,52	5,49	1,18	0,24
10000	2,33	5,34	1,40	0,36
12000	2,16	5,19	1,59	0,50
14000	2,00	5,03	1,75	0,65
16000	1,85	4,88	1,88	0,82
18000	1,71	4,72	2,00	1,00
20000	1,59	4,56	2,10	1,19
22000	1,47	4,40	2,18	1,39
24000	1,36	4,24	2,24	1,59
26000	1,26	4,09	2,29	1,80
28000	1,16	3,93	2,32	2,01
30000	1,08	3,78	2,34	2,23
32000	1,00	3,63	2,35	2,45
34000	0,92	3,49	2,35	2,66
36000	0,86	3,34	2,35	2,88
38000	0,79	3,21	2,33	3,10
40000	0,73	3,07	2,31	3,31
42000	0,68	2,94	2,28	3,53
44000	0,63	2,81	2,25	3,74
46000	0,58	2,69	2,22	3,94
48000	0,54	2,57	2,17	4,15
50000	0,50	2,46	2,13	4,35
52000	0,46	2,34	2,08	4,54
54000	0,43	2,24	2,03	4,73
56000	0,40	2,13	1,98	4,92
58000	0,37	2,03	1,93	5,10
60000	0,34	1,94	1,88	5,28
62000	0,31	1,85	1,82	5,45
64000	0,29	1,76	1,77	5,61
66000	0,27	1,68	1,71	5,77
68000	0,25	1,59	1,66	5,93
70000	0,23	1,52	1,60	6,08
72000	0,21	1,44	1,55	6,23
74000	0,20	1,37	1,49	6,37
76000	0,18	1,30	1,44	6,50
78000	0,17	1,24	1,39	6,63
80000	0,16	1,18	1,34	6,76
82000	0,15	1,12	1,29	6,88
84000	0,13	1,06	1,24	7,00
86000	0,12	1,01	1,19	7,11
88000	0,12	0,96	1,14	7,22
90000	0,11	0,91	1,09	7,32
92000	0,10	0,86	1,05	7,42
94000	0,09	0,82	1,01	7,52
96000	0,08	0,77	0,96	7,61
98000	0,08	0,73	0,92	7,70
100000	0,07	0,70	0,88	7,78



### 3.7 Modelo de Streeter-Phelps modificado o total

Esta última sección del capítulo presentará muy brevemente tres nuevos componentes del balance del oxígeno disuelto en el agua, que permite modificar o ampliar el modelo convencional de Streeter-Phelps. En este contexto, es necesario puntualizar que, en su forma original, tal como se recordará de las secciones precedentes, el modelo de Streeter-Phelps supone que el consumo o eliminación del oxígeno disuelto en las corrientes superficiales es causado sólo por la degradación de la materia orgánica medido como DBO, y que la única fuente de recuperación de oxígeno es a través de la reaireación desde la atmósfera.

Desde un enfoque más amplio se sabe que, por un lado, además de la reaireación, existe otra fuente de OD para las corrientes, denominada *fotosíntesis* (de plantas acuáticas), proceso realizado principalmente por las algas u otro perifitón, aunque también puede ser realizado por organismos del fitoplancton, tal como las cianobacterias o algas verdiazules. Por otra parte, los sumideros del OD pueden incluir también (a) la *respiración* de plantas acuáticas, (b) la *DBO distribuida* o difusa, que proviene de fuentes no puntuales de contaminación, y (c) la *demanda bentónica de oxígeno* (SOD,

por sus siglas en inglés), la cual consiste en la oxidación de la materia orgánica sedimentada en el fondo de los cuerpos de agua, proceso que puede verificarse principalmente en condiciones anaerobias dentro del manto de lodos, pero también puede ser aerobio cuando se produce en la parte superior de los depósitos bentónicos que están en contacto con la columna de agua.

Con base en lo anterior, el modelo de Streeter-Phelps convencional se puede ampliar hasta configurar una forma denominada modelo total o modificado de Streeter-Phelps (Thomann y Mueller, 1987), cuya expresión para el déficit de OD es

$$D_x = \underbrace{D_0 \left( e^{\frac{-k_a x}{v}} \right) + \left( \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \right) \left[ e^{\frac{-k_r x}{v}} - e^{\frac{-k_a x}{v}} \right]}_{\text{Modelo convencional}} + \underbrace{\frac{R - P + S_b}{k_a} (1 - e^{-k_a t})}_{\text{Respiración/fotosíntesis/SOD}} + \underbrace{\frac{k_d}{k_r k_a} (1 - e^{-k_a t}) - \frac{k_d S_L}{k_r (k_a - k_r)} \left[ e^{\frac{-k_r x}{v}} - e^{\frac{-k_a x}{v}} \right]}_{\text{DBO distribuida}} \quad \text{Ec. [3.217]}$$

donde,  $R$  y  $P$  son las tasas volumétricas de respiración y fotosíntesis de las plantas acuáticas, respectivamente, y expresadas generalmente en  $\text{g/m}^3\text{d}$ , aunque sus unidades pueden ser cualesquiera coherentes con su expresión dimensional  $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$ ;  $S_b$  es la tasa volumétrica de consumo bentónico de oxígeno ( $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$ ) y su valor puede ser corregido por efecto de la temperatura utilizando una expresión similar a las empleadas en la corrección de las constantes cinéticas del modelo de Streeter-Phelps, pero con un valor del coeficiente  $\theta$  igual a 1,065.

No obstante, el término  $S_b$  de la ecuación [3.217] se calcula de la siguiente forma:

$$S_b = \frac{S'_b}{h} \quad \text{Ec. [3.218]}$$

donde,  $S'_b$  es la demanda superficial bentónica de oxígeno disuelto ( $ML^{-2}T^{-1}$ ), cuyos valores típicos pueden variar de 1,5 a 4  $g/m^3d$  en lodos de aguas residuales municipales; y  $h$  es la profundidad promedio de la corriente.

En el componente de la DBO distribuida, el término  $S_L$  representa la tasa a la que la DBO es ejercida desde una fuente distribuida ( $ML^{-3}T^{-1}$ ).

Problemas propuestos

3.1 Una serie de muestras de agua tomada en un río contaminado se llevaron al laboratorio para medir su DBO<sub>5</sub>; el valor promedio resultante fue de 240 mg/l. Además, se determinó en el laboratorio que la constante de desoxigenación tiene un valor de 0,20 d<sup>-1</sup>. (a) Calcule el valor de la DBO última, (b) trace las curvas que representen la variación de la DBO remanente y ejercida hasta 21 días, y (c) ¿qué podría concluirse si la constante de reacción fuese mayor (0,30 d<sup>-1</sup>) o si fuese menor (0,10 d<sup>-1</sup>)?

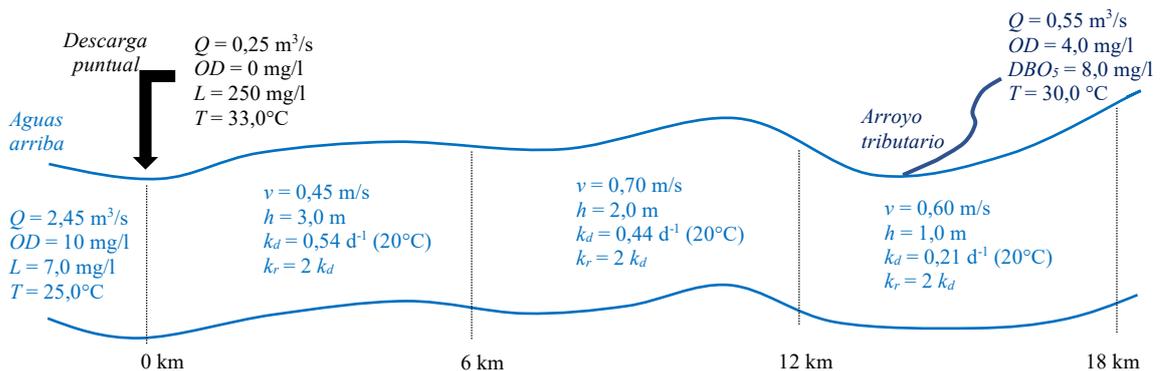
3.2 Resolver el problema 3.1 suponiendo que la DBO se degrada de acuerdo con una cinética de segundo orden y que la constante de reacción se expresa ahora como 0,20 l/mg.d. *Nota: utilice el modelo de Young y Clark (1965).*

3.3 Suponer que en las muestras de agua del problema 3.1 se ha medido también la presencia de nitrógeno, obteniéndose concentraciones de nitrógeno orgánico y amoniacal de 30 mg/l y 50 mg/l, respectivamente. Si la constante de oxidación por nitrificación tiene un valor de 0,15 d<sup>-1</sup>, determine (a) la DBON última y (b) la DBO total diaria hasta los 21 días; (c) trace las curvas resultantes de la DBOC, DBON y DBO total.

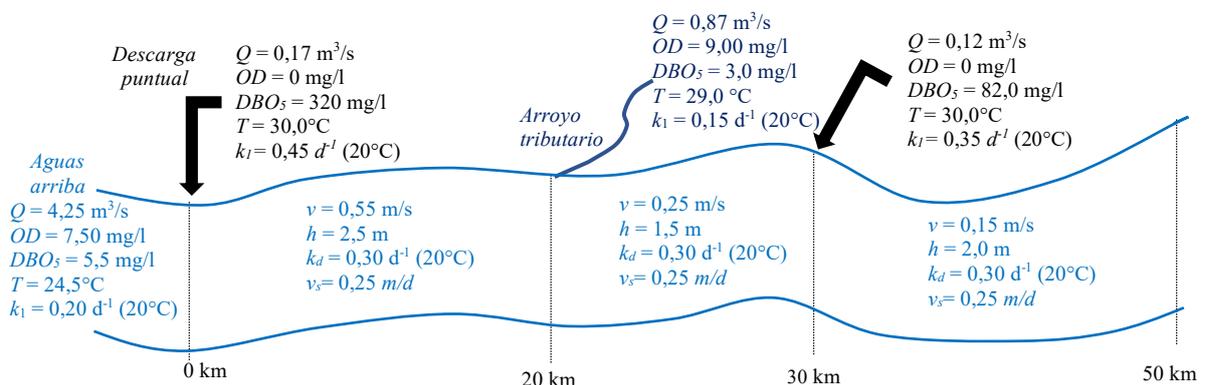
3.4 En un análisis de laboratorio se midió la DBO ejercida por los microorganismos en una muestra de agua, durante siete días consecutivos. Determine k<sub>1</sub> y L<sub>0</sub> mediante (a) el método de Thomas, (b) el método de la pendiente y (c) el método de la diferencia logarítmica, si los resultados obtenidos fueron los que se muestran en la siguiente tabla:

t (d)	1	2	3	4	5	6	7
DBO <sub>5</sub> (mg/l)	56	74	88	96	102	107	111

3.4 Para la situación de contaminación puntual de una corriente superficial descrita en el diagrama, aplique el modelo de Streeter-Phelps y grafique el perfil del oxígeno disuelto (curva sag) y de la DBO:



3.5 Para la situación de contaminación de una corriente superficial por dos fuentes puntuales de contaminación descrita en el diagrama, y el aporte de oxígeno por un arroyo tributario, aplique el modelo de Streeter-Phelps y grafique el perfil del oxígeno:



3.6 La mezcla de un flujo de aguas residuales y la corriente de un río producen una DBO última de 29,20 mg/l, una concentración de OD igual a 7,45 mg/l, y una temperatura de 20,90°C. Además, se ha determinado que la velocidad media de la corriente es de 5 cm/s, y que las constantes de reaireación y desoxigenación tiene valores correspondientes de 0,25 d<sup>-1</sup>, 0,30 d<sup>-1</sup>. Suponiendo que  $k_r$  tiene un valor triple al de  $k_d$  corregida, determine (a) la distancia crítica, (b) el tiempo crítico, (c) el déficit crítico, (d) el OD mínimo, y (e) la forma de la curva sag.

3.7 Después de la mezcla con una descarga de aguas residuales industriales, la corriente de un río presenta una DBO de 35 mg/l, una velocidad de 8 cm/s y una temperatura de 26,5°C. Si las constantes de desoxigenación y reaireación tienen un valor de 0,24 d<sup>-1</sup> y 0,18 d<sup>-1</sup>, respectivamente, pero la sedimentación es despreciable, determine (a) la concentración mínima de OD en la corriente y (b) la concentración de OD que se debió producir en el punto de mezcla para que ocurra el valor mínimo determinado en el literal a.

3.8 Un sistema de alcantarillado descarga las aguas servidas anóxicas de una ciudad a razón de 150 l/s con una concentración de DBO de 400 mg/l y una temperatura promedio de 35°C, en un río, que aguas arriba de la descarga, fluye con un cuyo caudal promedio de 4,5 m<sup>3</sup>/s, y presenta valores medios de DBO, OD y temperatura iguales a 6 mg/l, 8 mg/l y 25°C, respectivamente. Por otro lado, se ha estimado que la DBO se elimina de la corriente de acuerdo con una constante de desoxigenación medida en el río igual a 0,27 d<sup>-1</sup> (20°C), pero que el efecto de la sedimentación de la materia orgánica es despreciable, mientras que la reaireación se produce a una tasa de 0,18 d<sup>-1</sup> (20°C). (a) Aplique el modelo de Streeter-Phelps y verifique si se presentan condiciones anaeróbicas; (b) si existe un tramo anaerobio, determine su longitud y corrija la forma de la curva sag.

3.9 Si la solución para eliminar la zona anaerobia en el río producida en el problema 3.8 por la descarga de aguas servidas a través del alcantarillado es la construcción y operación de una planta de tratamiento de aguas residuales para disminuir el impacto de la carga orgánica en los niveles de oxígeno disuelto, determine (a) la concentración de la DBO última que debería haber en el efluente tratado para que no se forme ningún tramo anaerobio, y (b) la concentración de DBO última que debería producir el tratamiento en la Planta para cumplir con el estándar ambiental de una concentración de OD máxima permisible de 5 mg/l en el río.

3.10 Una industria procesadora de carnes genera un flujo volumétrico de 90 l/s de aguas residuales con una temperatura de 30°C, una concentración de oxígeno disuelto de 2,00 mg/l y un contenido de nitrógeno orgánico y de amonio igual a 40 mg/l y 50 mg/l, respectivamente. La corriente receptora, antes de la descarga, se caracteriza por valores promedio de caudal, velocidad, profundidad, oxígeno disuelto y temperatura de 1,10 m<sup>3</sup>/s, 0,08 m/s, 0,75 m, 6,5 mg/l y 25°C, en ese orden; además, su contenido de compuestos de nitrógeno se reparte en 4,0 mg/l de nitrógeno orgánico y 6,0 mg/l de amonio. Además, se ha estimado que el valor de las constantes cinéticas correspondientes al modelo de nitrificación por especies es  $k_o = 0,35$  d<sup>-1</sup>,  $k_m = 0,25$  d<sup>-1</sup> y  $k_i = 0,45$  d<sup>-1</sup>. Con base en esta información, determine (a) el perfil de OD o curva sag producida por el proceso de nitrificación; (b) la concentración mínima de oxígeno disuelto que se producirá en el río, y (c) trace las curvas de concentración de las cuatro formas de nitrógeno en función de la distancia aguas debajo de la mezcla.

3.11 Si se utilizara el método del modelo DBON con una constante de nitrificación igual a 0,30 d<sup>-1</sup> a 20°C, ¿qué resultados se obtendría en la evaluación del impacto de la descarga de la industria de carnes del problema 3.10 en la calidad de la corriente receptora?

## Referencias

Adrian, D. D. and Sanders, T. G. (1992) 'Oxygen sag equation for half order BOD kinetics', *Journal of Environmental Systems*, 22(4), pp. 341–351.

Adrian, D. D. and Sanders, T. G. (1998) 'Oxygen sag equation for second-order BOD decay', *Water Research*, 32(2), pp. 840–848.

APHA, A. P. H. A. (1954) 'The Lasker Awards for 1953', *American Journal of Public Health and the Nations Health*, 44(1), pp. 124–128. doi: 10.2105/AJPH.44.1.124.

Baca, R. G. and Arnett, R. C. (1976) *A limnological model for eutrophic lakes and impoundments*.

Bennett, J. P. and Rathbun, R. E. (1971) *Reaeration in Open-Channel Flow*. US Government Printing Office.

Benson, B. B. and Krause, D. (1980) 'The concentration and isotopic fractionation of gases dissolved in freshwater in equilibrium with the atmosphere. 1. Oxygen', *Limnology and Oceanography*, 25(4), pp. 662–671.

Borsuk, M. E. and Stow, C. A. (2000) 'Bayesian parameter estimation in a mixed-order model of BOD decay', *Water Research*, 34(6), pp. 1830–1836.

Calvert, H. T. (1898) 'The eighth report of the royal commission on sewage disposal', *Journal of the Society of Chemical Industry*, 32(6), pp. 265–274.

Chapra, S. C. (2008) *Surface Water-Quality Modeling*, McGraw-Hill Series in Water Resources and Environmental Engineering. Long Grove, Illinois: Press, Waveland.

Chin, D. A. (2013) *Water-quality engineering in natural systems: fate and transport processes in the water environment*. 2nd edn. Hoboken, New Jersey: Wiley.

Churchill, M. A., Elmore, H. L. and Buckingham, R. A. (1962) *The Prediction of Stream Reaeration Rates*. Chattanooga, Tennessee: Sanitary Eng. Div. ASCE.

Cooper, P. F. (2001) 'Historical aspects of wastewater treatment', in Lens, P., Zeeman, G., and Gatzke, L. (eds) *Decentralised sanitation and reuse: concepts, systems and implementation*. IWA Publishing, pp. 11–38.

Covar, A. P. (1976) 'Selecting the proper reaeration coefficient for use in water quality models', in *Proceedings of the Conference on Environmental Modeling and Simulation*. Cincinnati, Ohio: Environmental Protection Agency.

Díaz Lozada, J. M. *et al.* (2015) 'Estimación del coeficiente de dispersión longitudinal en ríos de la región central de Argentina utilizando ADCP', *Ribagua*, 2(1), pp. 26–37.

Ellis, K. V., White, G. and Warn, A. E. (1989) *Surface water pollution and its control*. The Macmillan Press.

Fair, G. M. (1936) 'The "Log-Difference" Method of Estimating the Constants of the First-Stage Bio-Chemical Oxygen Demand Curve', *Sewage Works Journal*, 8(3), pp. 430–434.

Fischer, H. B. *et al.* (1979) *Mixing in Inland and Coastal Waters, Mixing in Inland and Coastal Waters*. New York: Academic Press.

Fujimoto, Y. (1964) 'Graphical Use of First-Stage BOD Equation', *Water Pollution Control Federation*, 36(1), pp. 69–71.

Gameson, A. L. H. Truesdale, G. A. and Downing, A. L. (1955) 'Reaeration studies in a lakeland beck', *Journal of the Institute of Water Engineering*, 9, pp. 57–94.

Gaudy, A. F. and Gaudy, E. T. (1980) *Microbiology for environmental scientists and engineers*. New York: McGraw-Hill.

Gil, M. (2006) *Depuración de aguas residuales: modelización de procesos de*

*lodos activos*. Madrid: Editorial CSIC.

Gray, N. F. (2004) *Biology of wastewater treatment*. 2nd edn. London: Imperial College Press.

Gundelach, J. M. and Castillo, J. E. (1976) 'Natural stream purification under anaerobic conditions', *Journal of the Water Pollution Control Federation*, 48(7), pp. 1753–1758.

Henry, J. G. and Heinke, G. W. (1999) *Ingeniería Ambiental*. 2nd edn. México: Prentice Hall Hispanoamericana.

Hewitt, J., Hunter, J. V. and Lockwood, D. (1979) 'A multiorder approach to bod kinetics', *Water Research*, 13(3), pp. 325–329.

Hewitt, J. P. and Hunter, J. V. (1975) 'A comparison of the methods used to calculate first order BOD equation constants', *Water Research*, 9(7), pp. 683–687.

Hydroscience (1971) *Simplified Mathematical Modeling of Water Quality*. Washington, D.C.

Jayawardena, A. W. (2014) *Environmental and hydrological systems modelling, Environmental and Hydrological Systems Modelling*. Boca Raton, Florida: CRC Press.

Ji, Z. G. (2017) *Hydrodynamics and water quality: Modeling rivers, lakes, and estuaries*. 2nd edn, *Hydrodynamics and Water Quality: Modeling Rivers, Lakes, and Estuaries*. 2nd edn. Edited by Wiley. Hoboken, New Jersey.

Johnstone, D. W. M. and Horan, N. J. (1996) 'Institutional developments, standards and river quality: a UK history and some lessons for industrialising countries', *Water Science and Technology*, 33(3), pp. 211–222.

Jørgensen, S. E. (ed.) (2009) *Applications in ecological engineering*. Academic

Press.

Koussis, A. D. and Rodríguez-Mirasol, J. (1998) 'Hydraulic estimation of dispersion coefficient for streams', *Journal of Hydraulic Engineering*, 124(3), pp. 317–320.

Kowalska, B., Kowalski, D. and Musz, A. (2006) 'Chlorine decay in water distribution systems', *Environment Protection Engineering*, 32(2), pp. 5–16.

Krenkel, P. and Orlob, G. A. (1963) 'Turbulent diffusion and the reaeration coefficient', *Transaction of the American society of civil engineers*, 128, pp. 295–334.

Langbein, W. B. and Durum, W. H. (1967) *The aeration capacity of streams*. Washington, D.C.

Lewis, W. K. and Whitman, W. G. (1924) 'Principles of Gas Absorption', *Industrial and Engineering Chemistry*, 16(12), pp. 1215–1220.

Lilienfeld, A. M. (1983) 'Wade hampton frost: Contributions to epidemiology and public health', *American Journal of Epidemiology*, 117(4), pp. 379–383.

Lin, S. D. (2014) *Water and wastewater calculations manual*. 3rd edn. McGraw-Hill Education.

Lofrano, G. and Brown, J. (2010) 'Wastewater management through the ages: A history of mankind', *Science of the Total Environment*, 408(22), pp. 5254–5264.

Marske, D. M. and Polkowski, L. B. (1972) 'Evaluation of Methods for Estimating Biochemical Oxygen Demand Parameters', *Water Pollution Control Federation*, 44(10), pp. 1987–2000.

Martínez, S. A. and Rodríguez, M. G. (2005) *Tratamiento de aguas residuales con Matlab*. México: Reverté Ediciones.

Mihelcic, J. and Zimmerman, J. (2012) *Ingeniería Ambiental: Fundamentos*,

*Sustentabilidad, Diseño*. México: ALFAOMEGA.

Moore, E. W. (1941) 'Long-Time Biochemical Oxygen Demands at Low Temperatures', *Sewage Works Journal*, 13(3), pp. 561–577.

Moore, E. W., Thomas Jr., H. A. and Snow, William Brewster Ruchhoff, C. C. (1950) 'Simplified Method for Analysis of B.O.D. Data', *Sewage and Industrial Wastes*, 22(10), pp. 1343–1355.

Novotny, V. (2003) *Water Quality. Diffuse Pollution and Watershed Management*. 2nd edn. Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons.

NWFSC, N. F. S. C. (1998) 'Harold W. NO AA Research Vessel Harold W. Streeter', *Fish Matters*.

O'Connor, D. J. and Dobbins, W. E. (1958) 'Mechanism of reaeration in natural streams', *Transactions of the American Society of Civil Engineers*, 123(1), pp. 641–666.

Orford, H. E. and Ingram, W. T. (1953) 'Deoxygenation of Sewage', *Sewage and Industrial Wastes*, 25(4), pp. 419–434.

Orlob, G. T. (1983) *Mathematical modeling of water quality: Streams, lakes and reservoirs*. Edited by G. T. Orlob. Bath, England: John Wiley & Sons.

Orozco, Á. (2005) *Bioingeniería de las aguas residuales. Teoría y diseño*. Bogotá: ACODAL.

Owens, M., Edwards, R. W. and Gibbs, J. W. (1964) 'Some reaeration studies in streams', *Air and water pollution*, 8, pp. 469–486.

Padilla, P. (ed.) (2011) *Anoxia*. InTech.

Pazmiño Rodríguez, J. C. *et al.* (2018) 'Water quality modeling of the Aguas Claras stream, canton Quevedo, Ecuador', *Revista DYNA*, 85(204), pp. 204–214.

Radojević, M. and Bashkin, V. (2006) *Practical environmental analysis*. Cambridge: RSC Publishing.

Reed, L. J. and Theriault, E. J. (1931) 'The Statistical Treatment of Reaction-Velocity, Data. II. Least-Squares Treatment of the Unimolecular Expression:  $Y = L(1 - e^{-Kt})$ ', *The Journal of Physical Chemistry*, 35(4), pp. 950–971.

Roldán, G. A. and Ramírez, J. J. (2008) *Fundamentos de limnología neotropical*. 2nd edn, Editorial Universidad de Antioquia. 2nd edn. Medellín, Colombia: Editorial Universidad de Antioquia.

Schnoor, J. L. (1996) *Environmental modeling: fate and transport of pollutants in water, air, and soil*. John Wiley and Sons.

Sengers, J. M. H., Klein, M. and Gallagher, J. S. (1971) *Pressure-Volume-Temperature Relationships of Gases*. Washington, D.C.

Sierra, C. (2011) *Calidad del agua. Evaluación y diagnóstico*. Bogotá: Universidad de Medellín.

Spellman, F. R. and Whiting, N. E. (2005) *Safety engineering. Principles and Practices*. 2nd edn. Lanham, Maryland: Government Institute Press.

Streeter, H. W. (1926) 'The Rate of Atmospheric Reaeration of Sewage Polluted Streams', *Public Health Reports*, 41(7), pp. 247–262.

Streeter, H. W. and Phelps, E. B. (1925) 'A Study of the Pollution and Natural Purification of the Ohio River', *Public Health Bulletin*, 146.

Streeter, H. W., Wright, C. T. and Kehr, R. W. (1936) 'Measures of natural oxidation in polluted streams. III. An experimental study of atmospheric reaeration under stream-flow conditions', *Sewage Works Journal*, pp. 282–316.

Tarr, J. A. (1985) 'Industrial wastes and public health: Some historical notes, Part 1, 1876-1932', *American Journal of Public Health*, 75(9), pp. 1059–1067.

Tchobanoglous, G. and Schroeder, E. D. (1985) *Water quality: characteristics, modeling, modification*. Addison-Wesley Longman.

Tebbutt, T. H. Y. and Berkun, M. (1976) 'Respirometric determination of BOD', *Water Research*, 10(7), pp. 613–617.

Thomann, R. V. and Mueller, J. A. (1987) *Principles of surface water quality modeling and control*. Harper & Row.

Thomas, A. H. (1950) 'Graphical determination of BOD curve constants', *Water & Sewage Works*, 97, pp. 123–124.

Thomas, H. A. (1937) 'The "Slope" Method of Evaluating the Constants of the First-Stage Biochemical Oxygen Demand Curve', *Sewage Works Journal*, 9(3), pp. 425–430.

Thomas, H. A. (1948) 'Pollution load capacity of streams', *Water and Sewage Works Journal*, 95(11), p. 409.

Watson, S. W., Valois, F. W. and Waterbury, J. B. (1981) 'The Family Nitrobacteraceae', in Starr, M. P. et al. (eds) *The Prokaryotes*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, pp. 1005–1022.

Weber, W. J. (1972) *Physicochemical processes for water quality control*. New York: Interscience.

Woodward, R. L. (1953) 'Deoxygenation of Sewage: A Discussion', *Sewage and Industrial Wastes*, 25(8), pp. 918–920.

WPCF, W. P. C. F. (1981) 'Water Pollution Control Federation Yearbook: 1981', *Water Pollution Control Federation*, 53(3), pp. 15a, 17a-18a, 30a, 37a-38a, 1172, 40a-42a, 44a-50a.

Young, J. C. and Clark, J. W. (1965) 'Second order equation for BOD', *Journal of the Sanitary Engineering Division*, 91(1), pp. 43–58.

Zanoni, A. E. (1967) 'Waste water deoxygenation at different temperatures', *Water Research*, 1(8-9), pp. 543-566.

Zison, S. W. *et al.* (1978) *Rates, constants, and kinetics formulations in surface water quality modeling*. Lafayette, California: Office of Research and Development, Environmental Research Laboratory.

## ***Descubre tu próxima lectura***

Si quieres formar parte de nuestra comunidad, regístrate en <https://www.grupocompas.org/suscribirse> y recibirás recomendaciones y capacitación



   @grupocompas.ec  
compasacademico@icloud.com

compAs  
Grupo de capacitación e investigación pedagógica



@grupocompas.ec  
compasacademico@icloud.com

