UNIVERSIDAD CATÓLICA ANDRÉS BELLO FACULTAD DE INGENIERÍA ESCUELA DE INGENIERÍA CIVIL



INTRODUCCIÓN A LOS FENÓMENOS DE TRANSPORTE Y TRANSFORMACIÓN DE CONTAMINANTES EN EL AMBIENTE

Trabajo de Ascenso para optar al cargo de Profesor Asistente en el Escalafón de la Universidad Católica Andrés Bello

> Elaborado por: Ingeniero María Concepción Viana del Barrio

Índice.

| | | Página |
|----|--|--------|
| 1. | Introducción | 1 |
| 2. | Conceptos generales | 3 |
| 3 | Procesos de Transporte | 5 |
| ٠. | 3.1. Transporte Advectivo | 5 |
| | 3.2. Difusión | 9 |
| | 3.2.1. Difusión Molecular | 10 |
| | 3.2.2. Difusión Turbulenta | 16 |
| | 3.2.2.1 Transferencia de calor | |
| | 3.3. Dispersión | 24 |
| | 3.4. Fenómenos de Transporte en Aguas Superficiales | 25 |
| | 3.4.1. Ríos | 29 |
| | 3.4.1.1 Cálculo de la Velocidad en Ríos | 29 |
| | | 29 |
| | 3.4.1.2 Transporte de Fick en Ríos | 31 |
| | 3.4.2. Lagos 3.4.2.1 Cálculo de la Velocidad en Lagos | 33 |
| | 3.4.2.1 Calculo de la Velocidad en Lagos | 33 |
| | 3.4.2.2 Transporte de Fick en Lagos | 34 |
| | 3.5. Aguas Subsuperficiales y Subterráneas | 35 |
| | 3.5.1. Cálculo de la velocidad en medios porosos o flujo | 37 |
| | no saturado | 40 |
| | 3.5.2. Transporte de Fick en medios porosos | 43 |
| | 3.5.3. Retardo en medios porosos | 45 |
| | 3.6. Atmósfera | 47 |
| | 3.6.1. Características de la Atmósfera | 49 |
| | 3.6.1.1 Estabilidad Atmosférica | 49 |
| | 3.6.1.2 Circulación Atmosférica | 51 |
| | 3.6.1.3 Frentes | 53 |
| | 3.6.1.4 Zonas Ciclónicas y Anticiclónicas | 54 |
| | 3.6.2. Transporte Atmosférico a escalas local, urbana y global | 54 |
| | 3.6.2.1 Escala local | 54 |
| | 3.6.2.2 Escala Urbana | 60 |
| | 3.6.2.3 Modelos de Transporte a Escala Global | 00 |
| | 3.6.2.3.1. Regresión lineal | 62 |
| | 3.6.2.3.2. Modelos empíricos simples | 62 |
| | 3.6.2.3.3. Modelos matemáticos simples | 63 |
| | 3.6.2.3.3.1. Modelo de pluma Gaussiano | 64 |
| | 3.6.2.3.3.2. Modelo de caja | 65 |
| | 3.6.2.3.3.3. Enfoque EKMA | 65 |
| | | 00 |

Introducción a los Fenómenos de Transporte y Transformación de Contaminantes en el Ambiente

| | | Página |
|----|--|--------|
| | 3.6.2.3.4. Modelos de simulación complejos | 66 |
| | 3.6.2.3.4.1. Modelos Eulerianos | 67 |
| | 3.6.2.3.4.2. Modelos Lagrangianos | 68 |
| | 3.6.2.4 Uso y validación de los modelos de simulación | 68 |
| 4. | Fenómenos de Transformación | 70 |
| | 4.1. Química Ambiental Básica | 70 |
| | 4.1.1. Cinética de una reacción | 71 |
| | 4.1.1.1 Reacciones de primer orden | 76 |
| | 4.1.1.2 Reacciones de segundo orden | 77 |
| | 4.1.1.3 Vida media | 80 |
| | 4.1.1.4 Vida natural o tiempo de vida | 81 |
| | 4.1.2. Equilibrio químico | 82 |
| | 4.1.3. Soluciones de líquidos en líquidos | 85 |
| | 4.1.4. Partición | 86 |
| | 4.1.5. Coloides | 87 |
| | 4.1.6. Soluciones de gases en líquidos | 93 |
| | 4.1.6.1 Re – aireación | 95 |
| | 4.1.6.2 Difusión molecular en la interfase líquido – gas | 96 |
| | 4.2. Fotosíntesis y respiración | 99 |
| | 4.3. Crecimiento y mortalidad bacteriana | 101 |
| | 4.4. Deposición o Sedimentación | 103 |
| | 4.5. Adsorción | 105 |
| | 4.5.1. Adsorción de gases en sólidos | 106 |
| | 4.5.2. Adsorción de solutos en sólidos | 107 |
| | 4.6. Estratificación | 108 |
| | 4.6.1. Estratificación en lagos | 109 |
| | 4.6.2. Estratificación en estuarios | 110 |
| | 4.6.3. Estratificación en la atmósfera | 111 |
| | 4.7. Eutroficación | 111 |
| | 4.8. Demanda Bioquímica de Oxígeno | 112 |
| | 4.9. Demanda de oxígeno de los sedimentos | 114 |
| | 4.10. Degradación química por efecto de la luz | 116 |
| | 4.11. Impacto | 117 |
| | 4.12. Deposición Húmeda | 118 |
| 5. | Tipos de Fuentes | 119 |
| | 5.1. Fuente puntual | 119 |
| | 5.1.1. Fuente Puntual Instantánea | 119 |
| | 5.1.1.1. Fuente Puntual Instantánea sometida a | 120 |
| | Difusión Molecular | |

Introducción a los Fenómenos de Transporte y Transformación de Contaminantes en el Ambiente

| | Página |
|---|--------|
| 5.1.2. Fuente Puntual Continua | 123 |
| 5.1.2.1. Fuente Puntual Continua en Flujo Uniforme con | 123 |
| Turbulencia Homogénea y Anisotrópica | |
| 5.1.2.2. Solución Aproximada para Fuente Puntual | 129 |
| Continua en Flujo Uniforme con Turbulencia | |
| Homogénea y Anisotrópica, para la condición | |
| de concentración permanente y estable | |
| 5.1.2.3. Solución para Fuente Puntual Continua en Flujo | 131 |
| Uniforme con Turbulencia Homogénea y | |
| Isotrópica, para la condición de concentración | |
| permanente y estable | |
| 5.2. Fuente lineal | 133 |
| 5.2.1. Fuente Lineal Instantánea | 133 |
| 5.2.2. Fuente Lineal Continua | 138 |
| 5.1.2.1. Fuente Lineal Continua en Flujo Uniforme con | 138 |
| turbulencia Homogénea y Anisotrópica | |
| 5.1.2.2. Solución Aproximada para Fuente Lineal | 141 |
| Continua en Flujo Uniforme con turbulencia | |
| Homogénea y Anisotrópica, para la condición | |
| de concentración permanente y estable | |
| 5.3. Fuente Plana | 143 |
| 5.3.1. Fuente Plana Instantánea | 143 |
| 5.3.2. Fuente Plana Continua | 144 |
| Planos Límites | 151 |

1. Introducción.

Este trabajo presenta de una manera resumida y simplificada los fenómenos de transporte y transformación que sufren sustancias tales como los contaminantes en el ambiente.

Ha sido realizado con la idea de que pueda servir como una introducción al conocimiento de estos fenómenos por estudiantes de pregrado y postgrado que tengan la necesidad, o deseen realizar análisis del comportamiento de los contaminantes en el ambiente. Los conceptos se han desarrollado asumiendo que el lector dispone de conocimientos básicos de mecánica de los fluidos, química, física y cálculo diferencial e integral. En cuanto a estos últimos, el texto contiene ciertas simplificaciones en el desarrollo de la ecuaciones que, sin restarle rigurosidad matemática, persigue hacer amigable y accesible la lectura a los estudiantes.

En este sentido, el texto desarrolla en primera instancia conceptos básicos, tales como el principio de conservación de masas, masa y concentración, necesarios para la comprensión de los conceptos que se desarrollan posteriormente.

A continuación, se deducen las fórmulas que gobiernan los procesos de transporte dominados por la Ley de Fick que responden al modelo de pluma Gaussiano, los cuales afectan en general de manera similar los valores de concentración de las sustancias en el medio correspondiente (aire, suelo o agua), presentándose por razones prácticas solamente las ecuaciones para una fuente puntual instantánea. Se incluyen también en esta parte las ecuaciones de transporte para fuentes puntuales instantáneas en aguas superficiales, en aguas sub - superficiales y subterráneas (suelo), y en la atmósfera, con la finalidad de

señalar las características particulares de cada uno de estos medios con relación a los mecanismos que gobiernan los fenómenos de transporte en los mismos.

Luego se presentan algunos de los procesos de transformación, entendiéndose por tales, aquellos de afectan de forma diferente a cada sustancia. Estos procesos han sido catalogados como químicos, físicos y biológicos. Cabe señalar que la mayoría de ellos se rigen por las mismas consideraciones cinéticas, razón por la cual no resulta necesario utilizar formulaciones diferentes para cada sustancia o constituyente.

Después, se deducen las ecuaciones para los diferentes tipos de fuentes (puntuales, lineales o planas), y para las diversas maneras en que la sustancia entra en el medio (en un pulso o instantánea, y continua), que permiten simular las diferentes formas en las cuales una sustancia puede irrumpir en el ambiente.

Por último, se desarrolla el procedimiento de generación de imágenes lo que permite simular matemáticamente condiciones de borde del medio tales como superficie del suelo o de un cuerpo de agua en contacto con la atmósfera, inversiones térmicas en la atmósfera o en cuerpos de agua como lagos y embalses, o fondo marino o lecho fluvial para cuerpos de agua, entre otras.

El trabajo persigue facilitar la iniciación en el estudio sobre la materia, por lo que no pretende ser un ensayo exhaustivo y riguroso de la misma en virtud de la complejidad y amplitud que esa posee.

2. Conceptos generales.

En este momento conviene recordar la ecuación de conservación de la masa, dado que la misma es el fundamento de los análisis que se presentarán a continuación. Esta ecuación se basa en la medida de la masa de cualquier elemento o sustancia en un volumen estacionario de dimensiones fijas llamado volumen de control.

Analizando la figura Nº 1, podemos concluir que la ecuación de balance de masas en el volumen de control de dimensiones dx dy dz mostrado es:

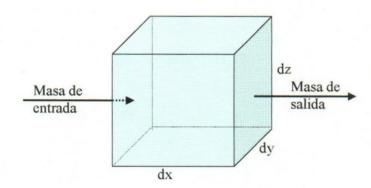


Figura Nº 1: Balance de masas en un volumen de control

Una manera de expresar la masa de una sustancia es a través de la concentración de la misma, entendiéndose por concentración la medida de la cantidad de esa sustancia en un volumen o masa específico de agua, aire, suelo u otro material.

La concentración de la sustancia puede expresarse en función de moles (Molaridad), equivalentes químicos (Normalidad), masa o volumen (porcentaje); también es frecuente expresar la concentración en partes por millón (ppm), billón (ppb) o trillón (ppt), ya sea en relación al peso, volumen o número de moles en la solución. En ocasiones estas relaciones no resultan evidentes, razón por la cual es conveniente aclarar que en general, cuando se refieren a gases la relación es volumétrica, en el caso de líquidos se usan indistintamente en volumen o en peso, y en el caso de sólidos se emplea el peso.

Otra manera de representar la concentración es por medio de la densidad relativa, concentración relativa o fracción de masa de la sustancia; esta manera de representar la concentración asume que en un sistema binario conformado por las sustancias A y B, la composición total del sistema se define por la suma de las fracciones de sus partes, es decir:

$$x_A + x_B = 1 \; ; \; y_A + y_B = 1$$
 (2.2)

donde:

x: fracción molar en fase líquida;

y: fracción molar en fase gaseosa;

 x_A, y_A : fracción de la sustancia o compuesto A en el sistema; y,

 x_B, y_B : fracción de la sustancia o compuesto B en el sistema.

En general, para un sistema conformado por A, B, ... N sustancias o compuestos:

$$\sum_{i=A}^{N} x_i = 1 \tag{2.3}$$

3. Fenómenos de Transporte.

Existen tres procesos básicos de transporte. El primero es el transporte advectivo o advección que se produce como consecuencia del flujo o movimiento de la masa de fluido en la cual se encuentra disuelta o suspendida la sustancia. El segundo es la difusión que se efectúa debido a la diferencia de concentración entre la sustancia y el medio (difusión molecular), o debido a los remolinos que se originan en el fluido debido a su movimiento (difusión turbulenta). El tercer tipo de proceso es la dispersión, éste se produce cuando el flujo de la sustancia se realiza a través de un medio en el cual existen componentes transversales de la velocidad.

Tal y como se indicó en la introducción de este capítulo, todas las deducciones de ecuaciones se harán para una fuente puntual instantánea, es decir para una descarga única realizada en un tiempo infinitesimal.

3.1. Transporte advectivo.

El transporte advectivo o advección que se produce como consecuencia del flujo o movimiento de la masa de fluido, es el arrastre de masa debido a la velocidad del fluido en el cual se encuentra disuelta o suspendida la sustancia.

La figura N° 3.1 representa el transporte advectivo en la pluma de una chimenea, donde la superficie unitaria imaginaria A se ubica perpendicular a la velocidad del viento y la concentración del contaminante es C.

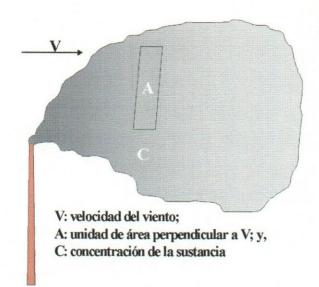


Figura Nº 3.1: Transporte Advectivo.

La expresión matemática general que representa la densidad de flujo de la sustancia que atraviesa la sección unitaria del fluido es:

$$J = V \times C \tag{3.1.1}$$

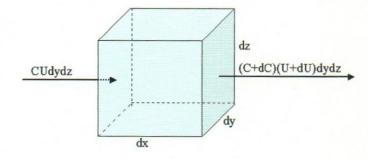
siendo:

J: densidad de flujo $(m/L^2t)^1$;

V: velocidad media del fluido (L/t); y,

C: concentración (M).

Figura Nº 3.2: Esquema del balance de masas y el transporte advectivo unidireccional.



¹ La convención usada en el presente trabajo con relación a las unidades empleadas es: m: masa;

L: longitud;

t: tiempo;

E: energía;

F: fuerza

Representando la variación de esta expresión por unidad de tiempo, asociada a un volumen de control de dimensiones infinitesimales $dx\ dy\ dz$ (figura N° 3.2) y en función de la velocidad media del fluido en la dirección x (U), los términos de la ecuación de conservación de la masa asumen las siguientes expresiones:

- ✓ velocidad de aumento de la masa en el volumen de control: $\frac{\partial C}{\partial t} dx dy dz$
- ✓ velocidad de entrada de masa en el volumen de control: CUdydz ; y,
- √ velocidad de pérdida de masa dentro del volumen de control:

$$\left(C + \frac{\partial C}{\partial x}dx\right)\left(U + \frac{\partial U}{\partial x}dx\right)$$

donde:

C: concentración del contaminante (m/L³); U: velocidad del flujo en la dirección x (L/t); dx, dy, dz: dimensiones del volumen de control infinitesimal en las direcciones x, y y z, respectivamente (L); y t: tiempo (t).

Sustituyendo estas expresiones en la ecuación de conservación de la masa tenemos que:

$$\frac{\partial C}{\partial t} dx dy dz = C U dy dz - \left(C + \frac{\partial C}{\partial x} dx\right) \left(U + \frac{\partial U}{\partial x} dx\right)$$
(3.1.2)

Efectuando todas las operaciones y simplificando los términos comunes en la expresión anterior, se tiene:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} - C \frac{\partial U}{\partial x} - \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial U}{\partial x} dx \tag{3.1.3}$$

Además, el último término de la expresión anterior puede omitirse por resultar su valor despreciable en comparación con el resto de los componentes de la ecuación. En consecuencia, la expresión del proceso advectivo o advección unidireccional asume la forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} - C \frac{\partial U}{\partial x} \tag{3.1.4}$$

Si a la expresión anterior se le adicionan los términos correspondientes a las variaciones resultantes del flujo en las direcciones y y z, se obtiene la forma general de la expresión para el proceso advectivo en tres direcciones, es decir:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U\frac{\partial C}{\partial x} - C\frac{\partial U}{\partial x} - V\frac{\partial C}{\partial y} - C\frac{\partial V}{\partial y} - W\frac{\partial C}{\partial z} - C\frac{\partial W}{\partial z}$$
(3.1.5)

donde:

V: es la velocidad del fluido en la dirección y (L/t); y

W: es la dirección del fluido en la dirección z (L/t).

Por otra parte, si se asume flujo uniforme, es decir que la velocidad es igual en todos los puntos, todos los términos que incluyen diferenciales de la velocidad con respecto a x, y o z son iguales a cero. En consecuencia, la

expresión para un proceso advectivo en tres direcciones en flujo uniforme asume la forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} - V \frac{\partial C}{\partial y} - W \frac{\partial C}{\partial z}$$
(3.1.5)

3.2. Difusión.

.....

Los fenómenos de transporte debidos a difusión responden a la Primera Ley de Fick, la cual establece que la velocidad de transferencia o flujo de masa por unidad de área normal a dicho flujo, varía directamente proporcional al gradiente negativo de la concentración de la sustancia con respecto a la dirección del flujo (figura 3.2.1). La expresión matemática general para la Primera Ley de Fick, tomando en consideración variaciones de la concentración en la dirección x, es:

$$J = -D\frac{\partial C}{\partial x} \tag{3.2}$$

siendo:

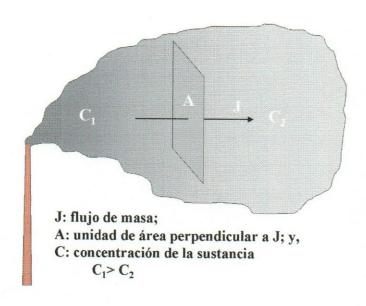
J: densidad de flujo de masa (m/L²t);

D: coeficiente de difusión (L²/t); y,

x: dirección en la que varía la concentración (L).

El signo negativo en la expresión, indica que el flujo o transporte se realiza desde la zona de mayor concentración de la sustancia, hacia la de menor concentración.

3.2.1. Difusión Molecular.



La difusión molecular es el transporte de material de regiones de alta concentración a otras de baja concentración. La No 3.2.1 figura representa el flujo de masa a través de un área unitaria A, debida diferencia de concentraciones en la

dirección x.

Figura Nº 3.2.1: Difusión Molecular.

Además de la Ley de Fick, se puede determinar la ecuación de continuidad para la variación del flujo de la sustancia en una dirección en función de la variación de la concentración del mismo. Dicha expresión es:

$$\frac{\partial J}{\partial x} = -\frac{\partial C}{\partial t} \tag{3.2.1.1}$$

Derivando la expresión (3.2) con respecto a x, y sustituyendo la expresión resultante en la ecuación (3.2.1.1), tenemos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_m \frac{\partial^2 C}{\partial^2 x} \tag{3.2.1.2}$$

donde:

00000

 D_m : coeficiente de difusión molecular (L²/t).

El coeficiente de difusión molecular $D_{\it m}$ depende del fluido en el cual ocurre el fenómeno, de la sustancia que se está difundiendo, de la concentración relativa entre sustancia y fluido, así como de la temperatura y presión a la cual se encuentra sometido el sistema.

Resolviendo la ecuación diferencial (3.2.1.2) mediante transformadas de Laplace, se obtiene:

$$C = \frac{B}{\sqrt{t}}e^{-\left(\frac{x^2}{4D_m t}\right)}$$
(3.2.1.3)

Con la finalidad de determinar la constante de integración B, se asume que la masa (m) de la sustancia se conserva. En consecuencia:

$$m = \int CA dx = A \int dx \tag{3.2.1.4}$$

Donde A es el área de la sección transversal que atraviesa el fluido.

Sustituyendo (3.2.1.4) en (3.2.1.3), y haciendo uso de la integral de probabilidad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi}$$
(3.2.1.5)

se determina que la constante B de integración es $\frac{m}{A\sqrt{4\pi D_m}}$, la cual, al sustituirse dentro de la expresión (3.2.1.3) determina que:

$$C = \frac{m}{A\sqrt{4\pi D_m t}} e^{-\left(x^2/4D_m t\right)}$$
(3.2.1.6)

Para los casos en que sólo ocurre difusión molecular la ecuación (3.2.1.6) representa la expresión que permite calcular la concentración correspondiente a la inyección instantánea de una masa m de una cierta sustancia efectuada por una fuente puntual, calculada en un punto cualquiera del fluido a una distancia x medida desde la fuente, luego de transcurrido un tiempo t desde la liberación de la sustancia en el fluido.

Uno de los problemas que enfrenta el cálculo analítico de las concentraciones es la utilización del coeficiente de difusión molecular adecuado. Dado que, como ya se señaló anteriormente, éste depende de las características particulares del medio y de la sustancia, en ocasiones no se encuentra disponible.

Es por ello que resulta necesario disponer de un medio que permita el cálculo analítico del coeficiente mediante la obtención de datos experimentales de fácil determinación.

En tal sentido, el análisis de las propiedades de la función de distribución espacial de la concentración ofrece información valiosa sobre ciertos parámetros necesarios para el cálculo de dicho coeficiente, en particular, los tres primeros momentos con respecto al centro de masas, es decir los de órdenes cero, uno y dos (mi), resultan útiles en la determinación analítica del valor del coeficiente de difusión molecular de una sustancia en un determinado medio.

Tomemos como ejemplo una distribución espacial de la concentración de una determinada fuente, en dicha distribución los momentos de órdenes cero, uno y dos responden a las siguientes expresiones:

$$m_{0} = \int_{-\infty}^{+\infty} c(x,t)dx$$

$$m_{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} xc(x,t)dx$$

$$m_{2} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2}c(x,t)dx$$
(3.2.1.7)

Dado que la masa se conserva (ecuación 3.2.1.4), $\it m_0$ resulta independiente del tiempo, en consecuencia:

...

$$m_0 = \frac{m}{A}$$
 (3.2.2.8)

Además, aplicando propiedades estadísticas de los momentos tenemos que:

$$x_{c} = \frac{m_{1}}{m_{2}}$$

$$y,$$

$$\sigma_{x}^{2} = \frac{m_{2}}{m_{0}} - \left(\frac{m_{1}}{m_{0}}\right)^{2}$$
(3.2.2.9)

donde:

 x_c : coordenada x del centro de masas de la distribución; y,

 σ_x^2 : varianza de la distribución.

Por otra parte, al analizar la forma que asume la distribución, similar a la distribución normal o curva Gaussiana, se determina que ésta es simétrica con relación al centro de masas. En consecuencia, el primer momento tiene un valor igual a cero ($m_1=0$), y el segundo momento puede expresarse como:

$$m_2 = 2\frac{m}{A}D_m ag{3.2.1.10}$$

Sustituyendo estos valores en la ecuación (3.2.2.9) correspondiente a la varianza, se tiene que:

$$\sigma_x^2 = \frac{2\frac{m}{A}D_m}{\frac{m}{A}} - \left(\frac{0}{2\frac{m}{A}}\right)^2$$
 (3.2.1.11)

Suprimiendo los términos semejantes:

$$\sigma_x^2 = 2D_m$$

$$\delta$$

$$D_m = \frac{\sigma_x^2}{2}$$
(3.2.1.12)

Sustituyendo en la ecuación (3.2.1.6):

........

$$C = \frac{m}{A\sqrt{2\pi\sigma_{x}^{2}t}}e^{-\left(\frac{x^{2}}{2\sigma_{x}^{2}t}\right)}$$
 (3.2.1.13)

Esta expresión que relaciona la concentración de una sustancia con la varianza de la distribución de dicha concentración, permite el análisis y cálculo experimental de los coeficientes de difusión molecular mediante la medición de las concentraciones de dicha sustancia en el medio, procedimiento que simplifica la determinación de ese factor para unas condiciones dadas.

La tabla Nº 3.2.1 ofrece algunos valores del coeficiente de difusión molecular para algunas combinaciones de sustancias y/o elementos y fluidos.

| Componentes | Temperatura (°C) | D_m (cm ² /seg) |
|----------------------------|--|------------------------------|
| Sólid | os disueltos en agua | |
| NaCl | 15° | 1,10x10 ⁻⁵ |
| NaCl | 25° | 1,61x10 ⁻⁵ |
| soluciones altamente dilui | Los valores señalados correspo das. | |
| | disueltos en agua | |
| CO_2 | 18° | 1,71x10 ⁻⁵ |
| O_2 | 20° | 2,03x10 ⁻⁵ |
| Cl_2 | 20° | 1,40x10 ⁻⁵ |
| Gases disueltos e | n aire a 1 atmósfera de p | oresión |
| Amoníaco en aire | 0° | 0,20 |
| CO ₂ en aire | 0° | 0,14 |
| SO ₂ en aire | 0° | 0,12 |
| Vapor de agua en aire | 25° | 0,26 |

Tabla Nº 3.2.1: Valores del coeficiente de difusión molecular para algunas soluciones. (Fuente: Harleman, D., Transport Proceses in Environmental Engineering. Massachusetts Institute of Technology, Department of Civil Engineering. 1990. Página 1-9).

3.2.2. Difusión turbulenta.

La difusión turbulenta es el transporte de material debido a la presencia de remolinos originados por las componentes de velocidad del flujo. Estos remolinos generan un intercambio aleatorio y continuo de masa entre las diferentes zonas del campo de flujo lo cual propicia la mezcla.

Cabe señalar que la condición del flujo en este caso es no uniforme debido precisamente a su condición turbulenta la cual hace que existan componentes del vector velocidad en todas las direcciones. Sin embargo, la deducción que se realizará a continuación resultará válida siempre y

cuando el espesor de la sub - capa laminar sea despreciable con relación al ancho total del flujo, y asumiendo que la velocidad utilizada para el cálculo es la velocidad promedio en la sección transversal. Por tanto, la concentración resultante será considerada también como la concentración promedio. Las simplificaciones antes expuestas resultan aceptables para la mayoría de los problemas prácticos que se presentan en ingeniería.

Expresando la ecuación de continuidad tomando en consideración las variaciones de la velocidad del fluido en la dirección del flujo, es decir:

$$\frac{\partial J}{\partial x} = -\frac{\partial C}{\partial t} - U \frac{\partial C}{\partial x}$$
(3.2.2.1)

siendo:

U: velocidad promedio del fluido en la dirección x (L/t)

Si además se considera aplicable la Ley de Fick expresada por la ecuación (3.2), la cual, en consecuencia, debe derivarse con respecto a x a fin de sustituirla en la expresión (3.2.2.1), tenemos:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D_t \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$
(3.2.2.2)

siendo:

Dt: coeficiente de difusión turbulenta (L^2/t).

Cabe señalar que, a diferencia de Dm, Dt no depende de la naturaleza del fluido en el cual se encuentra disuelto o suspendido la sustancia. El

valor del coeficiente de difusión turbulenta depende del carácter de los remolinos o turbulencia del flujo, con lo cual su valor resume la característica de flujo no uniforme en el fluido.

Obsérvese que en el caso de asumir que no existe difusión turbulenta $(D_t=0)$, la segunda parte de la ecuación (3.2.2.2) se anula, entonces dicha ecuación establece que la sustancia se mueve en la dirección de la velocidad sin cambio de concentración. En otras palabras el transporte se realiza por simple advección, y la ecuación (3.2.2.2) adquiere la forma unidimensional de la ecuación (3.1.5).

Resolviendo la ecuación diferencial (3.2.2.2) en su forma general, se obtiene:

$$C = \frac{B}{\sqrt{t}}e^{-\left(\frac{(x-Ut)^2}{4D_t t}\right)}$$
 (3.2.2.3)

Con la finalidad de determinar la constante de integración *B*, se asume que la masa de la sustancia se conserva. En consecuencia:

$$m = \int CAdx = A \int Cdx \tag{3.2.2.4}$$

donde A es el área de la sección transversal que atraviesa el fluido.

Sustituyendo (3.2.2.4) en (3.2.2.3), y haciendo uso de la integral de probabilidad, o función normal o Gaussiana:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi}$$
(3.2.2.5)

se determina que la constante B de integración es $M/A\sqrt{4\pi D_t}$, la cual, al sustituirse dentro de la expresión (3.2.2.3) determina que:

$$C = \frac{m}{A\sqrt{4\pi D_t t}} e^{-\left(\frac{(x-Ut)^2}{4D_t t}\right)}$$
(3.2.2.6)

Cuando sobre la sustancia se ejerce un proceso de difusión turbulenta la ecuación (3.2.2.6) representa la expresión que permite calcular la concentración correspondiente a una masa m de una cierta sustancia que se encuentra disuelta o suspendida en un fluido que se mueve en una dirección en condición turbulenta a una velocidad promedio U, en un punto cualquiera del fluido a una distancia x medida desde el origen de la fuente en la dirección del flujo, luego de transcurrido un tiempo t desde la liberación de la sustancia en el fluido.

000000000000

Con relación a los valores que asume el coeficiente de difusión turbulenta cabe señalar que son mayores a los correspondientes a la difusión molecular de la misma sustancia en el mismo medio. Tomemos por ejemplo el caso del oxígeno en agua. La difusión molecular a 20° C es aproximadamente 2,03 x 10⁻⁵ cm²/s, mientras que la difusión turbulenta a la misma temperatura en el mismo fluido es aproximadamente 4,89 x 10⁻⁴ cm²/s, es decir, la difusión turbulenta es un orden de magnitud mayor que la molecular.

Por otra parte, si se analizan comparativamente las ecuaciones (3.2.1.6) y (3.2.2.6), correspondientes a las concentraciones mediante transporte por difusión molecular y turbulenta, respectivamente, se puede apreciar que para la misma sustancia, en el mismo medio, en el mismo punto del espacio, luego de transcurrido un tiempo dado desde la inmisión de la sustancia en el medio, la concentración calculada disminuirá, de conformidad con la primera parte de ambas expresiones, de manera inversamente proporcional a la raíz cuadrada del aumento del coeficiente de difusión correspondiente ($D_m < D_t$), pero aumentará exponencialmente (el término exponencial es negativo), en la medida en que disminuya el coeficiente de difusión y la velocidad. En consecuencia, para condiciones similares, la difusión turbulenta arrojará valores menores de concentración que los obtenidos mediante difusión molecular.

Al igual que en el caso de la difusión molecular, uno de los principales problemas que enfrenta el cálculo analítico de las concentraciones es la utilización del coeficiente de difusión adecuado.

Nuevamente, el análisis de las propiedades de la función de distribución espacial de la concentración ofrece información valiosa sobre ciertos parámetros necesarios para el cálculo de dicho coeficiente.

Siguiendo el mismo camino analítico empleado para la determinación de un medio para el cálculo de la difusión molecular, tenemos que los momentos de órdenes cero, uno y dos responden a las siguientes expresiones:

$$m_{0} = \int_{-\infty}^{+\infty} c(x,t)dx$$

$$m_{1} = \int_{-\infty}^{+\infty} xc(x,t)dx$$

$$m_{2} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^{2}c(x,t)dx$$
(3.2.2.7)

Dado que la masa se conserva (ecuación 3.2.2.4), $\it m_0$ resulta independiente del tiempo, en consecuencia:

$$m_0 = \frac{m}{A}$$
 (3.2.2.8)

Además, aplicando propiedades estadísticas de los momentos:

$$x_{c} = \frac{m_{1}}{m_{2}}$$

$$y,$$

$$\sigma_{x}^{2} = \frac{m_{2}}{m_{0}} - \left(\frac{m_{1}}{m_{0}}\right)^{2}$$
(3.2.2.9)

donde:

....

 x_c : coordenada x del centro de masas de la distribución; y,

 σ_x^2 : varianza de la distribución.

Por otra parte, al analizar la forma que asume la distribución de la concentración para un fenómeno de difusión turbulenta, similar a la distribución normal o curva Gaussiana, se determina que ésta es simétrica con relación al centro de masas. En consecuencia, el primer momento tiene un valor igual a cero ($m_1=0$), y el segundo momento puede expresarse como:

$$m_2 = 2\frac{m}{A}D_t (3.2.2.10)$$

Sustituyendo estos valores en la ecuación (3.2.2.9) correspondiente a la varianza, se tiene que:

0000000

$$\sigma_x^2 = \frac{2\frac{m}{A}D_t}{\frac{m}{A}} - \left(\frac{0}{2\frac{m}{A}}\right)^2$$
 (3.2.2.11)

Suprimiendo los términos semejantes en la expresión anterior:

$$\sigma_x^2 = 2D_t$$

$$\delta$$

$$D_t = \frac{\sigma_x^2}{2}$$
(3.2.2.12)

Por último, sustituyendo en la ecuación (3.2.2.6), se tiene que:

$$C = \frac{m}{A\sqrt{2\pi\sigma_x^2 t}}e^{-\left(\frac{(x-Ut)^2}{2\sigma_x^2 t}\right)}$$
(3.2.2.13)

Esta expresión permite el análisis y cálculo experimental de los coeficientes de difusión turbulenta unidireccionales, mediante la medición de las concentraciones de una determinada sustancia en el medio.

Cabe señalar que todas las expresiones señaladas hasta este momento para difusión molecular y turbulenta poseen validez para flujos con números de Mach inferiores o iguales a 0,3 ($M \le 0,3$), siendo:

$$M = \frac{v}{\sqrt{\frac{kp}{\rho}}}$$
 (3.2.2.14)

donde:

v: velocidad del fluido;

$$\sqrt{\frac{kp}{\rho}}$$
 : velocidad del sonido, siendo:

k: constante adiabática;

p: presión; y,

ho: densidad del medio.

A efectos prácticos de ingeniería, esto ocurre siempre en líquidos y en gran número de casos de gases, siempre y cuando no haya transferencia de calor.

Para un fluido anisotrópico (fluido con variaciones en todas las direcciones), D_t no es constante, ni un valor escalar. En este caso la expresión general (3.1.5), transformada mediante las debidas sustituciones en una expresión similar a la (3.2.2), asume la forma de un tensor de segundo orden con nueve componentes, tal y como se refleja en la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} + u \frac{\partial \overline{c}}{\partial x} + v \frac{\partial \overline{c}}{\partial y} + w \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{11} \frac{\partial \overline{c}}{\partial x} + D_{12} \frac{\partial \overline{c}}{\partial y} + D_{13} \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} \right)
+ \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{21} \frac{\partial \overline{c}}{\partial x} + D_{22} \frac{\partial \overline{c}}{\partial y} + D_{23} \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{31} \frac{\partial \overline{c}}{\partial x} + D_{32} \frac{\partial \overline{c}}{\partial y} + D_{33} \frac{\partial \overline{c}}{\partial z} \right)
(3.2.2.15)$$

Dadas las dificultades para la determinación de los valores de cada una de las componentes de dicho tensor, en la mayoría de los casos, y por razones prácticas, se emplean soluciones aproximadas asumiendo fluido isotrópico, resultando por tanto aceptable la solución unidireccional representada por la expresión (3.2.2.6).

3.2.2.1. <u>Transferencia de calor</u>.

Un caso particular de difusión turbulenta es la transferencia de calor, la cual puede calcularse mediante la siguiente expresión:

$$H = -c_p \eta \frac{\partial T}{\partial y} = -c_p \rho l^2 \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y}$$
(3.2.2.1.1)

donde:

H: transferencia de calor(E/L²t);

 c_p : calor específico del fluido a presión constante (F/mºK);

η: viscosidad o conductividad de remolino (m/Lt);

ρ: densidad del fluido (m/L3);

I: longitud de mezcla (L);

ди

 ∂y : gradiente de velocidad (1/t); y,

T: temperatura (°K).

Donde el signo negativo indica la variación de calor de la zona de mayor temperatura a la de menor.

3.3. Dispersión.

La dispersión es un fenómeno de transporte similar a la difusión turbulenta, en el cual el mecanismo de mezcla se produce como consecuencia de las modificaciones de la dirección del flujo. Dichas modificaciones pueden ser el resultado del cambio de curso de una corriente o río, o la variación de dirección que experimenta un fluido cuando atraviesa los intersticios existentes entre las partículas sólidas del suelo, o los cambios en la dirección en el flujo de aire en ciudades debido a la presencia de edificaciones de cierta altura.

En los casos de las modificaciones señaladas en el párrafo anterior, no pueden omitirse los efectos sobre la mezcla de los cambios de dirección del vector velocidad. Sin embargo, la deducción de la expresión correspondiente puede seguir un proceso similar al utilizado para la determinación de las ecuaciones correspondientes a la difusión molecular y la turbulenta, dado que continúan siendo aplicables la Ley de Conservación de Masa, la ecuación de continuidad y la Ley de Fick. Por tanto se concluye que la expresión que responde a este fenómeno es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_d \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$
(3.3.1)

siendo:

00000000000

 D_d : coeficiente de dispersión (L2/t); y,

 u: velocidad del flujo en la dirección x, obtenida como el cociente del gasto entre el área;

c: concentración promedio en la sección analizada.

En este caso, el coeficiente de dispersión D_d incluye la variabilidad de la distribución de la velocidad real del fluido.

Algunos investigadores han desarrollado expresiones que permiten calcular valores del coeficiente de dispersión. Por ejemplo, para el cálculo del coeficiente de dispersión en tuberías de radio a, y esfuerzo cortante en la pared del tubo τ_0 , Taylor (1954) sugirió:

$$D_d = 10,1a\sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}}$$
 (3.3.2)

Esa expresión se transforma en el caso de canales abiertos en:

$$D_d = kd\sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}} \tag{3.3.3}$$

Donde d es la profundidad del fluido o tirante, y k es un coeficiente que varía con la geometría del canal y la distribución de velocidad. Los valores del

coeficiente son mayores en cauces naturales que en canales, debido a los efectos combinados de secciones transversales no uniformes y a la presencia de curvas, los cuales generan velocidades secundarias transversales. El valor de k será aproximadamente 6 para corrientes con variaciones pequeñas de la velocidad transversal, mientras que para el caso de ríos los valores experimentales indican límites entre 75 y 7.500.

Una simplificación de la expresión (3.3.3) en función de parámetros geométricos del canal se obtiene al sustituir la expresión $\sqrt{\tau_0/\rho}$, llamada velocidad tangencial, por \sqrt{gRS} , donde g es la aceleración de gravedad, R es el radio hidráulico del canal y S la pendiente del fondo del mismo. En consecuencia, la expresión (3.3.3) se transforma en:

$$D_d = kd\sqrt{gRS} \tag{3.3.4}$$

Otra expresión empleada para estimar la dispersión longitudinal en ríos y estuarios es:

$$D_d = 0.011 \frac{U^2 B^2}{d\sqrt{gRS}}$$
 (3.3.5)

donde:

U: velocidad promedio en la dirección longitudinal (L/t); y,

B: ancho (L).

En casos de dispersión en suelos, al integrar la expresión (3.3.1), y considerando solamente el coeficiente de dispersión longitudinal en la dirección preponderante del flujo, se tiene la expresión encontrada por Ogata (1970):

$$C = \frac{C_0}{2} \left[erfc \left(\frac{x - Ut}{2\sqrt{D_L t}} \right) + exp \left(\frac{Ut}{D_l} \right) erfc \left(\frac{x + Ut}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right]$$
(3.3.6)

siendo:

 C_{θ} : concentración inicial de la sustancia;

 D_L : coeficiente de dispersión longitudinal en la dirección preponderante del flujo; y,

erfc: función error complementario, la cual puede calcularse como:

$$erfca = 1 - erfa$$

donde:

$$erfa \cong 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-a^2}}{a}$$
 , para valores altos de a ; y,

$$erfa \cong \frac{2a}{\sqrt{\pi}}$$
 , para valores pequeños de a .

La validez de la utilización de las ecuaciones para calcular la concentración de una sustancia que se encuentra sujeta a un fenómeno de dispersión en un determinado medio, queda supeditada a la condición de que la sustancia se encuentre bien distribuida en la sección transversal de dicho medio.

3.4. Fenómenos de Transporte en Aguas Superficiales.

A continuación se presentan algunas de las características de los fenómenos de transporte para los diferentes cuerpos de aguas superficiales.

3.4.1. Ríos.

3.4.1.1 Cálculo de la Velocidad en Ríos.

En los ríos el flujo se efectúa bajo los efectos de la gravedad, siendo posible en la mayoría de los casos tener acceso a los cursos de agua para realizar mediciones de la velocidad del fluido mediante el empleo de aparatos diseñados a tal fin.

Sin embargo, una vez conocidos la geometría del cauce y los mecanismos de control del mismo, es posible calcular la velocidad media del fluido mediante el empleo de ecuaciones matemáticas desarrolladas para el flujo en canales. Estas ecuaciones son las de Chezy y la de Manning:

✓ Ecuación de Chezy:

$$V = C\sqrt{RS} \tag{3.4.1.1.1}$$

donde:

C: constante de Chezy;

R: radio hidráulico; y

S: Pendiente de la línea de energía.

✓ Ecuación de Manning:

$$V = \frac{R^{\frac{2}{3}} S^{\frac{1}{2}}}{n}$$
 (3.4.1.1.2)

siendo:

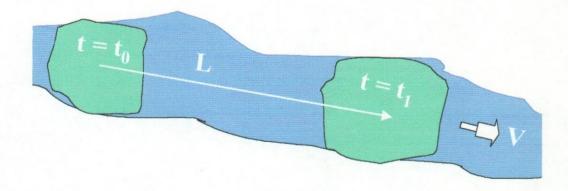
R: radio hidráulico;

S: pendiente de la línea de energía; y,

n: coeficiente de rugosidad de Manning.

Cuando una sustancia se introduce en el curso de un río, el centro de gravedad de la masa de la sustancia se mueve a la misma velocidad que la masa del fluido. La figura N° 3.4.1.1.1 representa esta situación.

Figura N° 3.4.1.1.1: Movimiento de una masa de una sustancia que se introduce en un río.



En consecuencia se puede asumir que la velocidad medio del contaminante es igual a la del río, y que por tanto el tiempo de viaje de la masa del contaminante entre dos puntos del curso de agua será:

$$\tau = V/l$$
 (3.4.1.1.3)

donde:

••••••••

V: velocidad del curso de agua (L/t); y,

l: distancia entre dos puntos (L).

En caso de que la velocidad del curso del río no sea constante a lo largo del trayecto, la expresión para encontrar el tiempo de viaje será:

$$\tau = \int \frac{dx}{V(x)}$$
 (3.4.1.1.4)

Por otra parte, en cada sección del curso del río se cumple la ecuación de continuidad:

$$Q = VA$$
 (3.4.1.1.5)

3.4.1.2 <u>Transporte de Fick en Ríos</u>.

En los ríos ocurren fenómenos de difusión debido a la turbulencia del flujo y de dispersión debido a la no uniformidad de la velocidad de fluido. Una manera de consolidar ambos hechos es identificar sus efectos con el fenómeno de mezclado. La ley de Fick nos permite expresar esta situación mediante la siguiente expresión:

$$C = \frac{m}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp\left[\frac{(x - Vt)^2 + y^2 + z^2}{4Dt}\right]$$
(3.4.1.1)

Siendo D el llamado coeficiente de mezcla, y asumiendo que el eje ${\it x}$ coincide con el eje del río.

Para encontrar la máxima concentración del contaminante para un instante determinado, se debe cumplir que:

$$\exp{-\left(\frac{(x-Vt)^2}{4Dt}\right)}=1$$
 (3.4.1.2)

Luego:

$$(x - Vt)^2 = 0 \Rightarrow x = Vt$$
(3.4.1.3)

Además:

000000000000000000

$$C_{m\acute{a}x} = \frac{M}{\sqrt{4\pi Dt}}$$
(3.4.1.4)

Por otra parte, se ha demostrado que, en virtud de que la distribución de la concentración del contaminante corresponde a una curva de Gauss, el valor del coeficiente de mezcla D se relaciona con la desviación estándar de la distribución.

En consecuencia, el valor del coeficiente de mezcla ${\cal D}$ puede calcularse mediante la siguiente expresión:

$$D = \sigma^2 / 2\tau \tag{3.4.1.5}$$

donde:

 σ = desviación estándar de la distribución; y,

 τ = tiempo de viaje.

3.4.2. Lagos.

3.4.2.1 Cálculo de la velocidad en Lagos.

Las componentes de la velocidad en los lagos se deben a dos efectos: la advección debida a los vientos, llamada corriente de empuje de vientos, y la corriente de retorno.

La advección debida a los vientos que generan flujos de transporte en diversas direcciones, es la causa de las corrientes superficiales en lagos debidas a los vientos. Dichos flujos de transporte en la mayoría de los casos responden a patrones complejos. En general, se puede afirmar que las corrientes generadas por los vientos alcanzan velocidades entre 2 y 3% del valor de las velocidades de los vientos. La corriente así generada sobre la superficie recibe el nombre de empuje de vientos. Además, al chocar esta corriente superficial con las riberas del lago se genera una corriente de fondo llamada corriente de retorno.

La figura N°3.4.2.1.1 representa esquemáticamente las corrientes de empuje de viento y de retorno.



Figura N° 3.4.2.1.1: Corrientes de Empuje de Viento y de Retorno en un lago.

3.4.2.2 Transporte de Fick en Lagos.

Al igual que en el caso del transporte físico en los ríos, el modelo correspondiente a la Ley de Fick aplicable a los lagos agrupará los fenómenos de Difusión y Dispersión en uno sólo llamado mezcla.

Asimismo, con la finalidad de representar tanto el transporte en la dirección horizontal como en la vertical, se asume la variación de la mezcla en ambas direcciones, es decir, medio anisotrópico.

Por otra parte, si al modelo de transporte físico se le incorpora el fenómeno de decaimiento, debido a la transformación química del contaminante o a procesos biológicos, la expresión que permitirá calcular la concentración en función del tiempo y la distancia para el caso de una fuente puntual instantánea será:

$$C = \frac{m}{4\pi t \sqrt{D_x D_y}} \exp \left[\frac{(x - V_x t)^2}{4D_x t} + \frac{(y - V_y t)^2}{4D_y t} + kt \right]$$
 (3.4.2.2.1)

3.5. Aguas Sub - Superficiales y Subterráneas.

El flujo bajo la superficie del suelo se realiza mediante tres procesos:

- ✓ Infiltración: el agua superficial pasa a través de los poros del suelo para convertirse en humedad del mismo;
- ✓ Flujo sub superficial o flujo no saturado: el agua almacenada en los poros del suelo alcanza un nivel lo suficientemente alto, sin llegar a la saturación, como para migrar hacia las zonas más profundas, alcanzando la zona saturada; y,
- ✓ Flujo de agua subterránea o flujo saturado: el agua alcanza el nivel saturado, moviéndose a través de los estratos de suelo o rocas.

Los estratos de suelo o roca que permiten el flujo de agua se denominan medios porosos, el flujo se considera no saturado cuando el medio poroso aún tiene algunos de sus vacíos ocupados por aire, y es saturado cuando los vacíos están llenos de fluido. A la zona no saturada se le denomina zona vadosa o zona de aireación.

El nivel freático es la superficie en la cual el agua se encuentra a presión atmosférica en un medio saturado, por debajo del nivel freático el agua se encuentra a presiones superiores a la atmosférica. A esta zona saturada por debajo del nivel freático se le denomina zona freática.

Por encima del nivel freático las fuerzas capilares pueden saturar el medio poroso a lo largo de una zona llamada franja capilar, por encima de la cual el medio poroso se encuentra usualmente no saturado excepto después de una lluvia cuando la infiltración desde la superficie del terreno puede producir temporalmente condiciones de saturación.

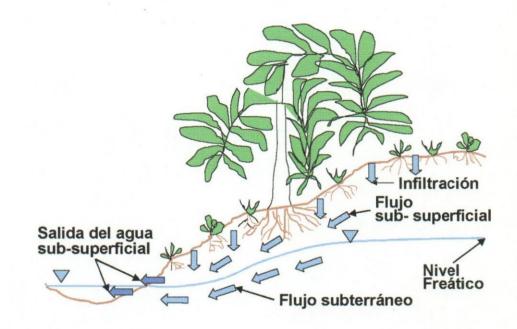
Las salidas de agua sub – superficial y subterránea ocurren cuando ésta emerge para convertirse en flujo superficial en una corriente o manantial.

Algunas veces se encuentran zonas localmente saturadas sobre estratos o lentes de material impermeables que constituyen los llamados conos de agua emperchada.

Otras veces el agua subterránea se halla en una formación recubierta de un estrato impermeable, formando así un acuífero confinado que recibe el nombre de artesiano. Los acuíferos confinados se encuentran a menudo a presión debido al peso de la sobrecarga que ejercen los estratos impermeables sobre ellos y a la cabeza o presión hidrostática. Si un pozo

llega a penetrar la capa confinante, el agua subirá hasta alcanzar el nivel piezométrico que es el equivalente artesiano del nivel freático. Si el nivel piezométrico se encuentra por encima del nivel del terreno, el pozo descargará naturalmente como un manantial.

Figura N° 3.5.1: Zonas y procesos del flujo del agua sub – superficial y subterráneo.



3.5.1. Cálculo de la velocidad en medios porosos o flujo no saturado.

Considérese una sección transversal a través de un suelo no saturado como la mostrada en la figura N° 3.5.1.1. Una porción de la sección transversal está ocupada por partículas sólidas y las restantes por vacíos.

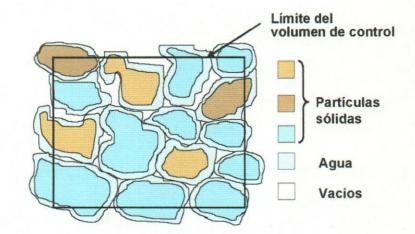


Figura N° 3.5.1.1: Medio poroso no saturado.

La porosidad se define como:

$$\eta = \frac{V_V}{V_Q} \tag{3.5.1.1}$$

donde:

 V_V : volumen de vacíos (${
m L}^{
m 3}$); y,

 V_a : volumen de agua (L³).

El valor de η varía entre 0,25 y 0,75 dependiendo de la textura del suelo.

Otra parte de los vacíos es ocupada por agua y el resto por aire. El volumen ocupado por agua se mide utilizando el contenido de humedad del suelo que se define como:

$$\theta = \frac{V_a}{V_T} \tag{3.5.1.2}$$

donde:

••••••

 V_T : volumen total (L³).

En consecuencia, $0 \le \theta \le \eta$. En el caso de un suelo saturado, la humedad del suelo es igual a la porosidad.

En un tubo circular con flujo permanente se cumple que el esfuerzo cortante en la pared del tubo es:

$$\tau_0 = \gamma RS \tag{3.5.1.3}$$

siendo:

 γ : peso específico del fluido (m/L³);

R: radio hidráulico (L); y

S: pendiente de la línea de energía.

Además, si el flujo es laminar, el esfuerzo cortante en la pared del tubo puede expresarse como:

$$\tau_0 = \frac{8\mu V}{D} \tag{3.5.1.4}$$

donde:

 μ : es la viscosidad dinámica del fluido;

V: es la velocidad; y,

D: es el diámetro de la tubería.

Igualando las dos ecuaciones anteriores y despejando la velocidad se tiene la ecuación de Hagen – Poiseulle para flujo laminar en un conducto circular que:

$$V = \frac{\gamma D^2 S}{32\,\mu} \tag{3.5.1.5}$$

En 1856, Darcy confirmó la aplicación de los principios de los flujos en capilares desarrollados por Hagen Poiseuillle, al flujo de agua en medios porosos. La Ley de Darcy para un medio poroso es:

$$V = kS \tag{3.5.1.6}$$

donde V es la velocidad del flujo, k es un coeficiente con unidades de velocidad y S es el gradiente hidráulico.

Sin embargo, en un medio poroso el área que atraviesa el fluido está ocupada por las partículas sólidas del suelo y por los vacíos entre ellas. Luego, la relación entre el caudal y área ($V=\mathcal{Q}_A$) derivada de la ecuación de continuidad no es igual a la velocidad real del fluido en los intersticios del suelo, pero define el flujo volumétrico q llamado campo volumétrico de Darcy:

$$q = K_p SA \tag{3.5.1.7}$$

donde:

 K_p : es la conductividad hidráulica del medio o permeabilidad (L/t).

Por lo anteriormente expuesto, el cálculo de la velocidad real del fluido debe contemplar el hecho de que éste se desplaza por los intersticios del suelo. En consecuencia, en medios porosos la velocidad real promedio del fluido es:

$$V_a = \frac{q}{A\eta} \tag{3.5.1.8}$$

Al producto del área por la porosidad que se encuentra en el denominador se le denomina área efectiva.

La Ley de Darcy es válida siempre y cuando el flujo sea laminar, es decir cuando el número de Reynolds es igual o menor a dos mil ($R_e \leq 2000$), condición suficiente para casi todos los flujos naturales que ocurren en medios porosos.

La conductividad hidráulica del medio o coeficiente de permeabilidad, K_p , depende tanto de las propiedades del fluido como del medio poroso y se puede expresar como:

$$K_p = k \frac{\gamma}{\mu} \tag{3.5.1.9}$$

donde:

 γ : es el peso específico del fluido (m/L³);

 μ : es la viscosidad dinámica del fluido (Ft/L²); y,

k: permeabilidad intrínseca del medio:

$$k = Cd^2 (3.5.1.10)$$

siendo:

C: factor que describe la forma, empaquetamiento,
 porosidad y otras características del medio; y,
 d: tamaño promedio de los poros (L²).

En ingeniería de petróleos la permeabilidad intrínseca se expresa en darcys (un darcy = $0.987 \times 10^{-8} \, \mathrm{cm^2}$). La conductividad hidráulica se expresa en unidades de velocidad; sin embargo, en diversos países y de acuerdo con diversas disciplinas puede expresarse en otras unidades. Por ejemplo, en Estados Unidos para fines hidrológicos se expresa en unidades *Meinzer* (un *Meinzer* = $0.0408 \, \mathrm{m^3/día^* \, m^2}$).

En la tabla N° 3.5.1.1 se incluyen algunos valores típicos de porosidad, permeabilidad intrínseca y conductividad hidráulica:

| Material | Porosidad η (%) | Coeficiente d | Permeabilidad intrínseca | |
|-------------------------------|----------------------|-------------------------------------|---|--------|
| | | m³/día*m² | Meinzer | Darcys |
| Arcilla | 40 - 70 | 10 ⁻⁹ – 10 ⁻⁵ | 2,45*10 ⁻⁸ - 2,45*10 ⁻⁴ | 0,0005 |
| Arena | 25 - 50 | 10 ⁻⁵ – 1 | 2,45*10 ⁻⁴ - 2,45 | 50 |
| Grava | 25 - 40 | $10^{-1} - 10^{5}$ | 2,45 -2.45*10 ⁶ | 5.000 |
| Grava arenosa | 15 - 30 | $10^{-2} - 10^4$ | 0,245 -2.45*10 ⁵ | 500 |
| Arenisca | 10 - 20 | $10^{-3} - 10^2$ | 2,45*10 ⁻² - 2,45*10 ³ | 5 |
| Calizas densas y esquistos | 5 | 0,041 | 1 | 0,05 |
| Cuarcita y granito | 1 | 0,01 | 0,0004 | 0,0005 |

Tabla N° 3.5.1.1: Valores de porosidad, porosidad intrínseca y conductividad hidráulica para diferentes materiales porosos (Fuente: Linsley, R.; Kohler, M.; y, Paulus, J.. Hidrología para Ingenieros. Mc Graw – Hill. Segunda Edición. 1975. Página 164).

3.5.2. Transporte de Fick en medios porosos.

El transporte que ocurre en los estratos sub — superficiales no tiene su origen en la turbulencia del flujo dadas las bajas velocidades en las cuales ocurre ($R_e \leq 2000$). En este caso el proceso de transporte se ve influenciado por el camino o trayectoria que debe seguir el fluido, el cual se encuentra pautado en función de los espacios libres que quedan entre las partículas sólidas del suelo. Es por ello que se habla de dispersión como uno de los fenómenos de transporte actuante en los suelos.

Además de la dispersión el otro fenómeno de transporte actuante en medios porosos es el de difusión molecular, el cual actúa de manera diversa a como lo hace en los otros medios, debido a la tortuosidad del camino y a la porosidad del material que atraviesa.

En todo caso, el fenómeno de transporte responde la Ley de Fick, en consecuencia:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial t^2}$$
 (3.5.2.1)

donde:

$$D = D_l + D_t (3.5.2.2)$$

siendo:

 D_1 : coeficiente de dispersión longitudinal corregido; y,

 D_t : coeficiente de dispersión transversal corregido.

Para calcular el valor de los coeficientes de dispersión corregidos, pueden emplearse las fórmulas generadas experimentalmente por Harleman (1963) para D_l , y por Jong (1958) y Safman (1959) para D_t :

$$D_l = 0.66 \mu v \left(V_a \frac{d}{v} \right)^{1,2}$$
 (3.5.2.3)

 D_l asumiendo que todas las partículas son esféricas ;y,

$$D_t = \beta \mu v \left(V_a \frac{d}{v} \right)^{3/4} \text{con } 0.08 \le \beta \le 0.12 \quad (3.5.2.4)$$

 D_l para suelos con partículas angulosas (arenas y guijarros) donde:

μ: viscosidad cinemática del fluido (Ft/L²);

υ: viscosidad dinámica del fluido (L²/t);

 V_a : velocidad media de paso; y,

d: diámetro medio de los granos.

Además, dada la variabilidad espacial de los estratos los valores de estos coeficientes se verán alterados. Por otra parte, las fuerzas actuantes para el movimiento vertical (gravitacionales) son diferentes a las que actúan en el sentido transversal (diferencias de los potenciales hidráulicos).

Es por ello que el transporte en suelos, en caso de simularse de conformidad a la realidad, se asimila al flujo anisotrópico, razón por la cual el valor del coeficiente ${\cal D}$ no resulta un escalar sino un tensor de segundo orden con nueve componentes.

Sin embargo, con la finalidad de simplificar los cálculos se asume el transporte como unidimensional, aceptando como coeficiente de dispersión el calculado mediante la expresión (3.5.2.2) y subsiguientes.

En tal sentido, la ecuación correspondiente a una fuente puntual instantánea es la siguiente:

$$C = \frac{m}{\eta \sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x - V_a t)^2}{4D t}\right)$$
 (3.5.2.6)

3.5.3. Retardo en medios porosos.

Las ecuaciones de transporte antes señaladas no toman en consideración que los granos de suelo atrapan parte del fluido que entra en contacto con ellos. Los procesos que ocurren son la adsorción o atracción molecular debida a la polarización generada por las fuerzas de Van der Walls, y la absorción.

En consecuencia, las expresiones de transporte pueden modificarse aplicando un coeficiente de retardo:

$$R = 1 + \frac{C_s}{C_a} \tag{3.5.3.1}$$

siendo:

....

000000000000

 C_s : concentración presente en el sólido; y

 C_a : concentración presente en el fluido.

donde:

$$C_s = \frac{m_s}{\eta V} \tag{3.5.3.2}$$

siendo:

 $m_{\scriptscriptstyle S}$: masa del contaminante presente en el sólido; y,

 ηV : volumen de poros.

El coeficiente de retardo calculado modificará la velocidad del fluido de la siguiente manera:

$$V_a = \frac{V_a}{R} \tag{3.5.3.3}$$

3.6. Atmósfera.

Comenzando desde la superficie de la tierra, la atmósfera puede dividirse en distintas zonas sobre la base del perfil de temperatura – altitud.

La primera zona conocida como troposfera se encuentra desde la superficie de la tierra hasta aproximadamente quince kilómetros de altitud; en ella la temperatura disminuye a medida que se asciende, ignorando la radiación localizada o las inversiones térmicas que pueden presentarse. Este efecto se debe al calentamiento de la superficie terrestre debido a la absorción de la radiación solar, tanto la visible como la ultravioleta. Es esta zona de la atmósfera se producen fenómenos de mezcla vertical de importancia, los cuales son responsables del transporte de sustancias desde la superficie de la tierra hasta el límite superior de la troposfera en pocos días e incluso horas, dependiendo de las condiciones meteorológicas. En esta zona se encuentran esencialmente el vapor de agua, las nubes y la precipitación; por tanto la remoción de sustancias por arrastre adquiere particular importancia.

Desde el límite superior de la troposfera y hasta aproximadamente los cincuenta kilómetros de altitud se encuentra la zona llamada estratosfera que se caracteriza por el incremento de la temperatura a medida que se asciende en dicha zona, debido fundamentalmente a la reacciones fotoquímicas en particular aquellas que involucran el ozono (O_3) y el oxígeno (O_2) , siendo el ozono el mayor responsable por este incremento de temperatura. La estabilidad en la concentración de ozono en esta zona es de vital importancia para la vida en la tierra, debido a su capacidad de absorber la radiación ultravioleta del sol disminuyendo su incidencia sobre la superficie de la tierra.

Sin embargo, la presencia de sustancias con períodos de vida media grandes, tales como los clorofluorocarbonos y los óxidos de nitrógeno, capaces de formar compuestos más estables que el ozono, y con capacidad para absorber el espectro de radiación de mayor longitud de onda del que absorbe esta especie molecular, permiten el paso de la radiación ultravioleta del sol responsable de ciertos tipos de cáncer de piel y cataratas en los ojos, daños a las plantas y cultivos, y cambios meteorológicos, entre otros.

A partir del límite superior de la estratosfera y hasta aproximadamente los ochenta y cinco kilómetros de altitud se encuentra la zona denominada mesosfera, cuyo perfil de temperatura característico refleja una disminución de este parámetro a medida que se incrementa la altitud. Esto se debe fundamentalmente a la caída en la concentración del ozono es esta zona y en consecuencia a una disminución de la actividad química en la zona.

Por último, nuevamente ocurre un incremento en la zona conocida como termosfera o ionosfera, debido a la presencia de especies moleculares, en particular del oxígeno (O_2) y del nitrógeno (N_2) , las cuales son capaces de absorber radiación solar.

Termosfera
o lonosfera
Mesopausa
Mesosfera

Estratopausa

* 15km

Tropopausa

* 20km

Temperatura
Presión

Figura N° 3.6.1.: Capas de la atmósfera para latitudes medias, y perfiles de presión y temperatura

110km

Los principales procesos de transporte y transformación de contaminantes de interés para el hombre ocurren en la zona conocida como troposfera.

3.6.1. Características de la atmósfera.

Muchas de las características físicas de la atmósfera en la zona conocida como troposfera, tales como el viento, la temperatura, la nubosidad, la humedad y la precipitación son fácilmente detectables. Sucede lo mismo con ciertas condiciones químicas tales como el humo de ciertas chimeneas o la niebla química conocida como "smog"

Sin embargo, existen otras tantas que no resultan tan evidentes, pero que son responsables del comportamiento de los fenómenos de transporte que se realizan en este medio. A continuación se señalan algunas de estas características.

3.6.1.1 Estabilidad atmosférica.

El perfil vertical del gradiente de temperatura en la atmósfera puede afectar la mezcla vertical de los químicos en el aire. En el caso de un fluido incompresible como el agua, la estabilidad se alcanza con una temperatura constante; sin embargo, en el caso de fluidos compresibles como el aire la estabilidad se alcanza para un gradiente de temperatura igual a la tasa de cambio adiabática. La tasa de cambio adiabática es la modificación de la temperatura del aire debida a la compresión y expansión asociada con un

cambio de elevación, asumiendo que el proceso es adiabático, es decir, no existe intercambio de calor entre la masa de aire y sus alrededores.

La tasa de cambio adiabática seca, es la modificación de la temperatura debida a los mismos factores mencionados con anterioridad en una atmósfera sin presencia de humedad. Esta modificación es de aproximadamente 9,8 °C por cada 1000 m de altitud.

La tasa de cambio adiabática húmeda corresponde a la modificación de la temperatura que se produce en una atmósfera que contiene agua en estado líquido en forma de nubes o niebla. Su valor se encuentra comprendido entre los 3,6 y los 5,5°C por cada 1000 m de altitud.

Cuando la tasa de cambio adiabática disminuye, el volumen de aire que inicialmente se encontraba en equilibrio térmico con sus alrededores resultará con una temperatura mayor que el medio circundante. En consecuencia, el aire que rodea a esta masa de temperatura superior empujará ese volumen en dirección ascendente. Por otra parte, esa masa de aire tendrá una densidad menor que la del medio circundante por lo que, con el fin de recuperar su "peso" inicial, ascenderá contribuyendo a la boyantez generada por el empuje de las masas frías a su alrededor. El resultado de este proceso de transporte vertical es la generación de remolinos, situación que se mantendrá hasta tanto se alcance la estabilidad energética de las masas de aire.

En caso de que la tasa de cambio adiabática aumente, el movimiento que producido resultará en sentido inverso, es decir la masa de aire será empujada hacia abajo por un medio circundante de mayor temperatura, al tiempo que descenderá por tener una densidad mayor que la de las masas

que la rodean. Por otra parte, este volumen de aire tiende a enfriar sus alrededores generando diferencias de temperatura entre estas masas y las circundantes, lo cual induce a una amplificación de las fuerzas de boyantez produciendo una inestabilidad atmosférica.

La altura de mezcla se define como la altitud que debe alcanzar un volumen de aire para lograr la estabilidad atmosférica.

3.6.1.2 Circulación Atmosférica.

0000000000000

La circulación atmosférica es responsable del transporte de contaminantes y de la generación del clima. Ella puede actuar desde una escala local hasta una escala global.

Uno de los fenómenos responsables de la circulación a gran escala, o circulación global de aire, es la diferencia de temperatura existente entre las masas de aire ecuatoriales y las polares. Una parte del fenómeno tiene su origen en la cantidad de radiación solar absorbida por esas masas de aire, o como parte del proceso de irradiación o reflexión de esa energía desde la superficie terrestre.

Las masas de aire calientes provenientes del ecuador se dirigen hacia los polos, desplazándose sobre las masas más frías que se encuentran en su camino; a su vez, las masas de aire frío provenientes de las latitudes superiores se desplazan por debajo de las capas calientes en dirección del ecuador. Este movimiento permite la disminución del gradiente térmico entre los polos y el ecuador, pero

resulta un coadyuvante en el transporte partículas y contaminantes generados en una zona hacia la otra.

Además, el movimiento de rotación de la tierra genera fuerzas que actúan sobre los fluidos. La fuerza es la llamada Fuerza de Coriolis, la cual es responsable de la deflexión de la trayectoria de los fluidos hacia la derecha en el hemisferio norte y hacia la izquierda en el hemisferio sur. Esta fuerza es particularmente importante en la evaluación del transporte a escala global.

Para calcular la aceleración de Coriolis se emplea la ecuación siguiente:

$$a = 2wvsen\phi \tag{3.6.1.2.1}$$

donde:

000000

w: aceleración angular de la tierra (1/t2):

$$w = \frac{2\pi}{24horas}$$
 (3.6.1.2.2)

v: velocidad relativa del fluido con respecto a la tierra (L/t); y, ϕ : latitud del lugar.

La acción conjunta de la aceleración de Coriolis con el fenómeno del gradiente de temperatura, genera tres zonas de circulación atmosférica en cada uno de los hemisferios:

- ✓ La primera comprendida entre el ecuador y los 30° de latitud norte, o los 30° de latitud sur;
- ✓ La segunda desde los 30° hasta los 60° de latitud norte, o los 30° y los 60° de latitud sur; y,
- ✓ La última desde los 60° de latitud norte hasta el polo norte, o los 60° de latitud sur y el polo sur.

Por otra parte, dependiendo del origen de las masas de aire, éstas tendrán un contenido de humedad y temperatura. En general, las masa provenientes de los continentes contienen menor humedad y poseen temperaturas extremas, muy frías o muy calientes, con relación de las provenientes de los océanos, mares o grandes cuerpos de agua.

3.6.1.3 Frentes.

Los frentes se generan cuando masas de aire con diferentes temperaturas se encuentran. Un frente frío se genera cuando una masa de aire frío de desplaza hacia zonas de masas de caliente. Un frente caliente se genera cuando una masa de aire caliente de desplaza hacia zonas de masas de frío.

Un frente ocluso se genera cuando tanto las masas de aire caliente se desplazan hacia las zonas de masas de aire frío, y las de aire frío se desplazan hacia zonas de masas de caliente.

3.6.1.4 Zonas Ciclónicas y Zonas Anticilónicas.

En función de los centros de presión predominantes en una zonas, éstas se pueden clasificar en ciclónicas y anticiclónicas. Las zonas ciclónicas son aquellas con un centro de baja presión. Se caracterizan por un flujo ascendente con formación de nubes. Estas zonas facilitan la dispersión de contaminantes.

Las zonas anticiclónicas son aquellas con centros de alta presión caracterizadas por un flujo descendente con posibilidad del establecimiento de inversiones térmicas. Estas zonas dificultan la dispersión de contaminantes.

3.6.2. Transporte Atmosférico a escalas local, urbana y global.

El transporte atmosférico posee características particulares dependiendo de la escala en la cual se efectúa el análisis. A continuación se presenta un resumen de las características fundamentales que gobiernan los fenómenos de transporte atmosférico en las escalas local, urbana y global y de los enfoques que se emplean en cada caso.

3.6.2.1 Escala local.

La mayoría de los casos estudiados a escala local se relacionan con el transporte de emisiones provenientes de chimeneas.

La manera de abordar los fenómenos de transporte para emisiones de una chimenea resulta similar a la empleada para el análisis de plumas subterráneas, es decir el mecanismo que se produce es el resultado de la difusión turbulenta y de la dispersión mecánica.

Los modelos de pluma Gaussiana en estado estable o para flujo permanente, presentan una diferencia en su formato de presentación con relación a los de aguas subterráneas. Sin embargo, es posible su transformación para hacerlos equivalentes. Este modelo permite la simulación de superficies límites como las generadas por el suelo y las inversiones térmicas, así como la inclusión del decaimiento en la concentración de las sustancias.

Además, existe un modelo clásico que se utiliza ampliamente para las emisiones de chimeneas, es decir para fuentes puntuales continuas. Este modelo de difusión turbulenta desarrollado por Pasquill (1974) y Gifford (1976), se aplica a flujo permanente cercano a la superficie del suelo.

El modelo de Pasquill y Giffort considera que el volumen de control estudiado carece de nuevas fuentes y de sumideros del contaminante estudiado, así como que el mismo se mantiene sin sufrir transformaciones durante el proceso de transporte. Por ello, es recomendable emplearlo para simular el transporte de sustancias cuyas concentraciones permanecen relativamente estables en la atmósfera en el corto plazo, tales como el monóxido de carbono (CO) y el dióxido de azufre (SO_2) , y de partículas de dimensiones tales que puedan permanecer en suspensión en la atmósfera y cuyos patrones de

dispersión puedan ser similares a la de los gases. En caso de que se emplee para sustancias que sufren decaimiento o para partículas que puedan depositarse en el tiempo analizado, sus resultados pueden arrojar diferencias significativas con relación a las concentraciones reales.

Otra de sus limitaciones es que asume que la capa de mezcla es infinita, por lo cual no puede emplearse para determinar el transporte cuando se presenta el fenómeno de inversión térmica.

El modelo de Pasquill - Gifford asume la siguiente expresión:

$$C = \frac{Qe^{\left(\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)}}{V2\pi\sigma_y\sigma_z} - \left[\exp\left(\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right)\right]$$
(3.6.2.2.1)

donde:

Q: caudal de la emisión (L³/t);

V: velocidad del viento en la dirección x (L/t);

 σ_y :desviación estándar de la concentración en la dirección y;

 σ_z : desviación estándar de la concentración en la dirección z; y,

H: altura de la chimenea (L).

Las gráficas contenidas en la figura N° (3.6.2.2.1) representan las desviaciones normales σ_y en la dirección del viento y σ_z en la dirección

vertical, como funciones de la distancia en la dirección del viento, mientras que el cuadro correspondiente a la tabla N° (3.6.2.2.1) incluye la clave para las categorías de estabilidad empleadas en las gráficas anteriores.

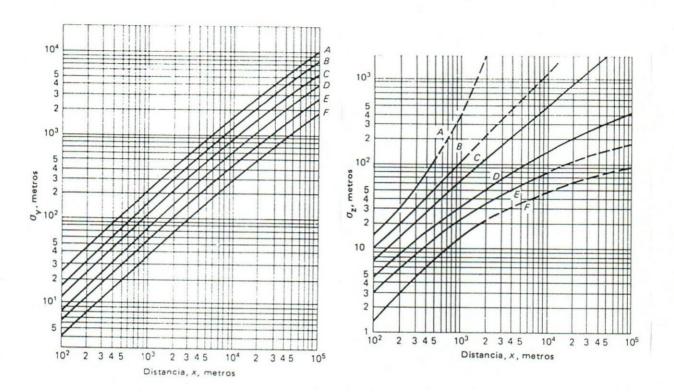


Figura N° 3.6.2.2.1: desviaciones normales σ_y en la dirección del viento y σ_z en la dirección vertical, como funciones de la distancia en la dirección del viento. (Fuente: Wark, K. Y Warner, C..Contaminación del Aire Origen y Control. Limusa Noriega Editores. 1997. Página 156 y 157).

| viento superficial a 10m (m/s) | Día Radiación solar entrante | | | Noche Cubierta de nubes | |
|--------------------------------|---------------------------------|-----|------|-------------------------|---|
| | | | | | |
| | <2 | Α | A -B | В | E |
| 2-3 | A-B | В | С | E | F |
| 3 – 5 | В | B-C | С | D | Е |
| 5-6 | С | C-D | D | D | D |
| >6 | С | D | D | D | D |

Tabla N° 3.6.2.2.1: Clave para las categorías de estabilidad. (Fuente: Wark, K. Y Warner, C..Contaminación del Aire Origen y Control. Limusa Noriega Editores. 1997. Página 156 y 157).

Tal y como se desprende de las figura (3.6.2.2.1) los valores de la desviación estándar de la concentración dependen de diferentes variables entre las que se encuentra la estabilidad atmosférica.

Además, las emisiones que se generan en un proceso cualquiera y que se descargan a través de una chimenea, se encuentran a una temperatura mayor que la del medio que las acoge. Es por ello que la pluma tiende a elevarse. A este efecto se le suma el momentum generado por la velocidad ascendente del fluido en la chimenea.

En consecuencia, para calcular la altura que alcanza la pluma de la emisión debido a la conjunción de ambos efectos, se emplea la siguiente fórmula:

$$\Delta H = \frac{1.6F_b^{1/3}x^{2/3}}{V}$$
 (3.6.2.2.2)

siendo:

V: velocidad del viento en la dirección x (L/t); y,

 F_b : fuerza de boyantez (L⁴/t³):

$$F_b = g \frac{d^2 V_s}{4} \frac{(T_s - T_a)}{T_s}$$
 (3.6.2.2.3)

donde:

g: aceleración de gravedad (L/t²);

V_s: velocidad de salida de la emisión (L/t);

d: diámetro de la chimenea (L2);

 T_s : temperatura de salida de la emisión en °K; y,

 T_a : temperatura del aire circundante en ° K.

Por lo que la altura de la pluma a la salida de la chimenea será la suma del valor de ΔH y la altura de dicha chimenea, es decir:

$$H_t = H + \Delta H \tag{3.6.2.2.4}$$

Por otra parte, para calcular la altura máxima alcanzada por al pluma, se determinará el punto en el cual la fuerza de boyantez de la pluma se iguala a la fuerza de descenso de la misma, evaluándose en ese punto el valor de ΔH .

La longitud de boyantez se define como el radio de curvatura de la trayectoria de la pluma a la salida de la chimenea. Este valor puede calcularse como:

$$l_b = \frac{F_b}{V^3} \tag{3.6.2.2.5}$$

Para los casos de neutralidad atmosférica es importante conocer la altura que alcanzará la pluma (z), que se obtiene mediante la siguiente fórmula:

$$z = 1,32l_b \left(\frac{x}{l_b}\right)^{2/3}$$
 (3.6.2.2.6)

donde, z y x se miden hasta el eje de la pluma.

En los casos en los cuales se presenta una estratificación estable de la atmósfera, la máxima altura de la pluma se alcanzará para:

$$x = 1,55Sl_b (3.6.2.2.7)$$

siendo:

$$S = \frac{V}{(l_b N)}$$
 (3.6.2.2.8)

donde:

$$N = \left(\frac{-g}{\rho} \frac{d\rho}{dz}\right)^{1/2}$$
 (3.6.2.2.9)

Y la altura total alcanzada es:

$$z = 2,27 l_b S^{2/3}$$
 (3.6.2.2.10)

3.6.2.2 Escala urbana.

En la escala urbana es imposible asumir fuentes aisladas. El resultado de las concentraciones es la sumatoria de los efectos producidos por la totalidad de las fuentes y sumideros existentes.

Una manera de afrontar el problema es delimitando el volumen de control (tarea difícil), y asumir una mezcla completa de los contaminantes. En consecuencia, la concentración final será la masa total del contaminante de todas las fuentes dentro del volumen de control, menos todos los sumideros incluyendo las reacciones químicas que puedan ocurrir dentro de dicho volumen.

Para definir los cambios en la concentración se asume la velocidad del viento a través de los contornos del volumen de control, multiplicada por el área que atraviesa (caudal de arrastre).

Otra manera de afrontar el problema es mediante la generación de modelos empíricos que puedan representar las fuentes, los sumideros y las características particulares de la zona urbana como lo son, entre otras, la ubicación de edificaciones y la dirección predominante de los vientos. Por tanto, se requiere de información básica abundante y confiable. Desde luego que sólo pueden ser empleados en la zona urbana para la cual fueron diseñados o en otra con características similares, siempre y cuando la ubicación de las fuentes y la de los sumideros así como la del resto de las características para las cuales fueron elaborados no se alteren significativamente.

3.6.2.3 Modelos de Transporte a escala global.

Existe una variedad de modelos empíricos y matemáticos empleados para describir las relaciones entre las concentraciones de los contaminantes del aire durante el transporte.

A continuación se describen las características de algunos de los modelos de simulación existentes.

3.6.2.3.1. Regresión lineal.

Este es el modelo de simulación más sencillo. El mismo se basa en asumir que las concentraciones de un determinado contaminante decrecen proporcionalmente a medida que decrecen las concentraciones de sus precursores.

Este modelo ofrece resultados razonables para contaminantes no reactivos tales como el CO, siempre que se conozcan la localización de la fuente, la distribución de las emisiones y que éstas no cambien en el tiempo. Sin embargo para contaminantes secundarios como el ozono, los cuales se forman mediante reacciones químicas que involucran a los contaminantes primarios, la complejidad de la química involucrada hace que el enfoque de este método resulte demasiado "grueso" o simplista.

Ejemplo: modelo para las concentraciones de ${\it CO}$.

3.6.2.3.2. Modelos empíricos simples.

Los modelos empíricos simples se basan en las correlaciones observadas entre las concentraciones de los contaminantes y ciertas variables relevantes que pueden ser medidas. Estas variables son

generalmente de naturaleza meteorológica, dado que ellas juegan un papel muy importante en la determinación de la concentración de los contaminantes.

Estos modelos son útiles para la predicción a corto plazo de la concentración de un determinado contaminante para una cierta localidad, pero requieren para su elaboración registros históricos adecuados. Además, una vez desarrollado el modelo sólo dará información sobre la localidad para la que fue elaborado. Por otra parte, no pueden emplearse cuando las fuentes de contaminantes cambian de lugar (móviles), o si la mezcla de contaminantes presentes cambia. No obstante, este enfoque puede ser utilizado para estimar series históricas de valores corregidos para diferentes condiciones meteorológicas o para ajustarlas a condiciones meteorológicas similares.

Ejemplo: modelo realizado para la localidad de San Bernardino, California. Zeldin y Thomas (1975).

3.6.2.3.3. Modelos matemáticos simples.

El próximo paso en sofisticación son los modelos matemáticos simples, los cuales no se basan sobre las mediciones de aire, sino que son desarrollados *a – priori*.

3.6.2.3.3.1. Modelo de pluma Gaussiano.

El modelo determina la distribución de concentración de contaminantes vientos debajo de la fuente. La aplicación más generalizada de este modelo se realiza para fuentes puntuales (chimeneas), pero también se aplica ocasionalmente para fuentes lineales (vías) o para áreas (ciudades).

El modelo asume que la distribución de concentraciones vientos debajo de la fuente se ajusta a una curva de Gauss, de esta manera la concentración de un contaminante puede ser determinada para un determinado punto vientos debajo de la fuente, donde se conocen el alto de la fuente, la velocidad del viento y la estabilidad atmosférica.

Inicialmente este tipo de modelo fue empleado para la simulación de contaminantes no reactivos como el CO. Sin embargo, éste ha sido modificado incluyendo reacciones químicas de primer orden. En el caso de presencia de varias fuentes, la resultante de la concentración en un punto determinando se encuentra sumando los efectos de cada una de las fuentes sobre ese punto.

La principal desventaja en la aplicación del modelo Gaussiano es la dificultad para incorporar las reacciones correspondientes a los contaminantes secundarios, en los cuales la simple suma de las fuentes no resulta suficiente para explicar su comportamiento.

A pesar de sus limitaciones el modelo Gaussiano continúa siendo uno de los más utilizados dada su simplicidad.

3.6.2.3.3.2. Modelo de caja.

Un segundo tipo de modelo matemático simple es el llamado de caja. La masa de aire sobre la región estudiada es tratada como una caja dentro de la cual los contaminantes son emitidos y se transforman mediante las reacciones químicas correspondientes, el transporte de entrada y salida de contaminantes de la caja así como los procesos meteorológicos de dilución son debidamente tomados en cuenta.

Los modelos de caja pueden ser sencillos o complejos, dependiendo del grado de detalle de la información sobre emisiones o meteorológica que se emplee. A medida que la complejidad aumenta, también lo hacen los costos asociados a su utilización, y el grado de exactitud o aproximación de los resultados obtenidos.

3.6.2.3.3.3. <u>Enfoque EKMA</u>.

Una de las variantes del modelo de caja es el llamado EKMA (Empirical Kinetic Modeling Approach, Dodge, 1977, Dodge y Dimitriades, 1983).

El enfoque del EKMA se basa en la generación de isopletas para el O_3 , utilizando a tal fin el paquete gráfico de elaboración de isopletas de ozono llamado OZIPP. Estas isopletas son gráficos tridimensionales sobre los cuales se encuentran las concentraciones medias generadas por mezclas de hidrocarburos exceptuando el metano (HCNM) y NO_x . El Carbon Bond Mechanism (CBM) o Mecanismo de Enlace del Carbono, ha sido empleado recientemente en el EKMA, así como otros mecanismos químicos los cuales han sido insertados dentro del modelo.

El modelo requiere que se asuman ciertos escenarios, como por ejemplo la no entrada de nuevos contaminantes a la caja, lo cual hace que sus resultados se encuentren limitados por las mismas presunciones que se ha efectuado para su aplicación.

3.6.2.3.4. Modelos de simulación complejos.

Los modelos de simulación complejos incorporan a un modelo matemáticos consideraciones realistas sobre meteorología, química, contaminantes, emisiones y fuentes en la cuenca o área estudiada. Los dos mayores modelos de simulación compleja son los Eulerianos y los Lagrangianos.

3.6.2.3.4.1. Modelos Eulerianos.

En los modelos Eulerianos las concentraciones de los contaminantes se calculan para un área geográfica y un tiempo determinados. En práctica el área es una superficie de 1km² o más. Las concentraciones iniciales de los contaminantes se predicen o calculan, así como las nuevas emisiones, el transporte de entrada y salida, la dilución, y por último las reacciones químicas involucradas. El procedimiento conlleva a calcular todos estos factores para un número definido de diferentes localidades con el área especificada anteriormente, las cuales se encuentran contiguas al área a ser estudiada. Además se debe cumplir que cada una de las diferentes localidades se analiza para el mismo período de tiempo.

Una de las ventajas del modelo Euleriano es que provee resolución geográfica, además que permite estudiar los efectos combinados de fuentes móviles con fijas. Por otra parte, puede realizarse un análisis de los posibles efectos sobre las poblaciones al incorporarse datos estadísticos sobre la materia, que permitan simular el crecimiento del número y tipo de fuentes así como de las áreas urbanizadas.

La mayor desventaja de la aplicación de este modelo son los altos costos asociados a su utilización debido a la gran cantidad de información necesaria y al procesamiento que la misma requiere.

3.6.2.3.4.2. Modelos Lagrangianos.

El modelo considera una columna de aire y sigue su trayectoria tomando en consideración las condiciones meteorológicas existentes, esta "parcela" de aire contiene ciertas concentraciones de contaminantes, las cuales sufren variaciones debido a las nuevas emisiones que se incorporan a su paso sobre las fuentes que las producen. Asimismo, dichas concentraciones se ven modificadas por el efecto de la dilución y las reacciones químicas que ocurren en el seno de la columna de aire.

Este tipo de modelo es útil para examinar los impactos de nuevas fuentes de contaminantes, al tiempo que resulta menos costosa su aplicación que la de los modelos Eulerianos.

3.6.2.4 Uso y validación de los modelos de simulación.

El uso de los modelos de simulación requiere disponer de datos de entrada, incluyendo los meteorológicos (velocidades de viento, perfiles de temperatura, estabilidad atmosférica, etc.) sobre toda la región del estudio, datos sobre las emisiones especificando las temporales y su distribución espacial. Además, deben seleccionarse las condiciones de borde adecuadas.

Las incertidumbres en los resultados en la aplicación de los modelos dependen del grado de aproximación a la realidad que existe

sobre las presunciones asumidas sobre la meteorología, la química, las emisiones o los sub – modelos para las emisiones.

Bajo este contexto, la validación de un modelo requiere la comparación de los resultados obtenidos mediante la utilización del mismo, con las concentraciones de contaminantes observadas en el área de estudio. Las incertidumbres y aproximaciones de los modelos impiden que se logre un resultado que concuerde en todas las concentraciones para todos los contaminantes.

4. Fenómenos de Transformación.

Los procesos de transformación en el ambiente son aquellos mediante los cuales una sustancia modifica su condición y por tanto la concentración en su estado inicial. Estos procesos dependen de la sustancia específica a que hacen referencia y del medio en el cual esa se encuentra.

Estas modificaciones son el resultado de reacciones químicas con otras sustancias o compuestos presentes en el medio circundante, alteraciones físicas o procesos biológicos.

A continuación se señalan algunos de los procesos de transformación más relevantes que ocurren en el ambiente.

4.1. Química Ambiental Básica.

Por definición, las reacciones químicas implican la formación o ruptura de enlaces químicos entre los átomos, existen diferentes maneras mediante las cuales los enlaces químicos logran que los átomos permanezcan unidos. Por ejemplo, en los enlaces covalentes los átomos comparten electrones, mientras que en los iónicos, los enlaces se logran gracias a las fuerzas generadas por las cargas eléctricas opuestas en átomos adyacentes. También la llamada fuerza de Van der Waals genera atracción entre ciertas moléculas facilitando los enlaces. Cabe señalar que un enlace químico puede tener características de varios tipos de enlaces.

A continuación se desarrollan de manera resumida algunos aspectos relacionados con la ocurrencia de reacciones químicas, los cuales permitirán determinar los cambios en la concentración inicial de una sustancia y su variación en el tiempo.

4.1.1. Cinética de una reacción.

La cinética describe la tasa a la cual ocurre una reacción química y, en consecuencia, mide la variación de la concentración de las especies o sustancias involucradas en dicha reacción por unidad de tiempo.

Supóngase por ejemplo la siguiente reacción química elemental:

$$A + B \to C \tag{4.1.1}$$

Si se desea medir la velocidad con la cual ocurre la reacción anterior, se debe medir cómo en función del tiempo, a temperatura y volumen constantes, disminuyen las cantidades de reactantes o aumentan las de los productos. En consecuencia, se debe medir la disminución de la concentración de los reactantes o el aumento de concentración de los productos en función del tiempo transcurrido. Expresando matemáticamente lo anterior, se tiene:

$$v = \frac{\Delta C_P}{\Delta t} = -\frac{\Delta C_R}{\Delta t} \tag{4.1.2}$$

donde:

v: velocidad de la reacción (L/t);

R: reactantes;

P: productos;

$$\Delta C = C_f - C_0$$
; y.

$$\Delta t = t_f - t_0$$

siendo f el estado final y θ el estado inicial.

Nótese el signo negativo en el término de la velocidad de los reactantes, ésto se debe a que la concentración final es menor que la inicial, por tanto el signo indica que la velocidad siempre es positiva ya sea tratándose de reactantes o productos.

En el caso que la diferencia de tiempo entre el estado inicial y el final sea infinitesimal, la variación de la velocidad se considerará instantánea, por tanto los Δ de la ecuación (4.1.2) se transforman en diferenciales, si se expresa la ecuación (4.1.2) en forma de diferenciales para cada una de las especies involucradas en la ecuación (4.1.1), se tiene:

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = \frac{d[C]}{dt}$$
(4.1.3)

En el caso de la ecuación (4.1.1) las tasas en que se transforman los reactantes A y B resultan iguales a la tasa de formación de C. Ésto se debe a que los coeficientes estequiométricos de la ecuación son iguales a uno.

Sin embargo, no siempre ocurre así. Por ejemplo, tomemos la siguiente reacción química:

$$A + B \to 2C \tag{4.1.4}$$

En este caso, el coeficiente estequiométrico del producto C indica que la velocidad de formación del mismo es el doble de la velocidad de transformación de A o de B, o lo que es lo mismo, que la mitad de la velocidad de formación de C, es igual a la velocidad de transformación de A o de B, es decir:

$$v = -\frac{d[A]}{dt} = -\frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{2} \frac{d[C]}{dt}$$
 (4.1.5)

Generalizando lo anterior, para una reacción elemental de la forma:

$$aA + bB \rightarrow cC + dD$$
 (4.1.6)

Se tiene que:

$$v = -\frac{1}{a} \frac{d[A]}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{d[B]}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d[C]}{dt} = \frac{1}{d} \frac{d[D]}{dt}$$
(4.1.7)

Hasta ahora se ha visto que la velocidad de una reacción depende de la concentración de las sustancias o especies involucradas. Esta dependencia puede expresarse como:

$$v = k[A]^a[B]^b \tag{4.1.8}$$

donde k es la constante de velocidad específica de la reacción o constante de velocidad.

A la ecuación (4.1.8) se le conoce como la Ley de Velocidad, y en ella los exponentes a y b pueden ser números enteros o fraccionarios, la reacción descrita por la ecuación (4.1.8) se dice que es de orden a con respecto a la especie A, de orden b para la especie B, y de orden total de reacción a, siendo a0 a1.

El valor de la constante de velocidad específica k depende en alto grado de la temperatura, así como también de la presión y de la presencia de catalizadores. En el caso de diferencia entre la temperatura de referencia para k, y la temperatura en la cual se realiza la reacción, puede determinarse el valor de la constante mediante la ecuación de Arrhenius:

$$k = Ae^{-E_{act}/RT} (4.1.9)$$

donde:

A: factor de frecuencia (en las misma unidades de k);

Eact: energía de activación;

R: constante universal de los gases (0,082 l atm / mol °K; 8,31 Joules / mol °K; o, 1,99 cal / mol °K); y,

T: temperatura en °K.

Para determinar el valor de k para una temperatura diferente de la conocida, se toman logaritmos naturales a ambos lados de la ecuación (4.1.9), de manera que:

$$\ln k = \ln A - \frac{E_{act}}{RT} \tag{4.1.10}$$

Dado que la energía de activación E_{act} puede considerarse constante para rangos pequeños de temperatura, y que de igual manera el factor de frecuencia A puede también considerarse constante bajo esta condición, es posible emplear la ecuación anterior para evaluar k_1 correspondiente a una temperatura T_1 , y también para evaluar k_2 correspondiente a una temperatura T_2 , y luego efectuarse una sustracción miembro a miembro, con lo cual se obtiene:

$$\ln k_1 - \ln k_2 = \frac{E_{act}}{R} \left[\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right]$$
 (4.1.11)

La ecuación (4.1.11) permite calcular el valor de la constante de velocidad específica k de una reacción para una temperatura dada, conocido el valor de dicha constante a una temperatura diferente a la deseada y la energía de activación.

Cabe señalar que hasta el momento se han señalado casos de reacciones elementales donde los órdenes con relación a las especies involucradas y a la reacción total concuerdan con los coeficientes estequiométricos de la reacción. Sin embargo, existen reacciones en las cuales la determinación experimental de la velocidad indica órdenes diferentes a los expresados por los coeficientes estequiométricos de la reacción total. Por tanto es conveniente confirmar el orden experimental de la reacción antes de iniciar los cálculos correspondientes.

4.1.1.1. Reacciones de primer orden.

000000000

Considérese como ejemplo una reacción elemental de primer orden de la forma:

$$A \to B + C \tag{4.1.1.1}$$

Al expresar la velocidad de la reacción en función de la concentración del componente A tenemos:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A] \tag{4.1.1.2}$$

Reordenando la expresión tenemos:

$$\frac{d[A]}{[A]} = -k dt \tag{4.1.1.3}$$

Integrando la expresión anterior:

$$\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]} = -k \int_0^t dt$$

$$\ln\frac{\left[A\right]}{\left[A\right]_0} = -kt$$
(4.1.1.4)

Aplicando función exponencial a ambos lados de la igualdad, se tiene:

$$[A] = [A]_0 e^{(-kt)}$$
 (4.1.1.5)

La expresión (4.1.1.5) representa la ecuación de decaimiento para una reacción de primer orden como la indicada en la expresión (4.1.1.1).

4.1.1.2. Reacciones de segundo orden.

Considérese como ejemplo una reacción elemental de segundo orden de la forma:

$$2A \rightarrow B + C \tag{4.1.2.1}$$

Al expresar la velocidad de la reacción en función de la concentración del componente $\cal A$ tenemos:

$$\frac{1}{2}\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^2 \tag{4.1.2.2}$$

Reordenando la expresión tenemos:

$$-\frac{d[A]}{[A]^2} = 2k \ dt \tag{4.1.2.3}$$

Integrando la expresión anterior:

$$-\int_{[A]_0}^{[A]} \frac{d[A]}{[A]^2} = 2k \int_0^t dt$$

$$\frac{1}{[A]} - \frac{1}{[A]_0} = 2kt \tag{4.1.2.4}$$

Despejando la concentración [A]:

$$[A] = \frac{[A]_0}{2k[A]_0 t + [A]_0}$$
(4.1.2.5)

La ecuación (4.1.2.5) expresa el decaimiento en la concentración de la sustancia A, cuando dicha sustancia se descompone o transforma siguiendo una reacción química de la forma señalada por la reacción (4.1.2.1).

En el caso de que la reacción de segundo orden tome la forma:

$$A + B \rightarrow C \tag{4.1.2.6}$$

Al expresar la velocidad de la reacción en función de la concentración del componente $\cal A$ se tiene:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A][B] \tag{4.1.2.7}$$

Realizando un balance de masas para el instante t, en el cual la concentración de los reactantes es $\begin{bmatrix} A \end{bmatrix}$ y $\begin{bmatrix} B \end{bmatrix}$, respectivamente, se tiene:

$$[B] = [B]_0 - ([A]_0 - [A])$$
(4.1.2.8)

Sustituyendo (4.1.2.3) en (4.1.2.2) y reordenando la expresión se tiene:

$$\frac{d[A]}{[A]([B]_0 - [A]_0 + [A])} = -k dt$$
(4.1.2.9)

Integrando la expresión anterior mediante el método de fracciones parciales:

$$-\frac{1}{[B]_0 - [A]_0} \left[\ln \left[\frac{[B]}{[A]} \right] - \ln \left[\frac{[B]_0}{[A]_0} \right] \right] = -kt$$
(4.1.2.10)

Despejando la concentración [A]:

$$[A] = \frac{[A]_0 [B]_0}{[B]} e^{-kt([B]_0 - [A]_0)}$$
(4.1.2.11)

La expresión (4.1.2.11) representa la ecuación correspondiente al decaimiento de la concentración de la sustancia A, cuando dicha sustancia se descompone o transforma siguiendo una reacción química de la forma señalada por la reacción (4.1.2.6).

4.1.1.3. Vida media.

La vida media es el tiempo necesario para que la concentración de la sustancia o compuesto decaiga hasta la mitad de la inicial.

Para una reacción de primer orden como la señalada en la expresión (4.1.1.1) tenemos:

$$0.5[A]_0 = [A]_0 e^{\left(-kt_{\frac{1}{2}}\right)}$$
(4.1.3.1)

Al aplicar logaritmos neperianos a ambos lados de la igualdad, y despejar el valor del tiempo, se tiene:

$$t_{\frac{1}{2}} = -\ln \frac{2}{k} = \frac{0.693}{k}$$
 (4.1.3.2)

Para el caso de reacciones de segundo orden que involucran un solo reactante (ecuación (4.1.2.1)), puede determinarse que la vida media correspondiente es:

$$t_{1/2} = \frac{1}{k[A]_0} \tag{4.1.3.3}$$

Nótese que para el caso de una reacción de primer orden la vida media resulta independiente de la concentración inicial del reactante, mientras que para una reacción de segundo orden con un solo reactante, la vida media es inversamente proporcional a la concentración inicial del mismo.

En cuanto a la vida media correspondiente a una reacción de segundo orden con dos reactantes (ecuación (4.1.2.6)), la ecuación resulta compleja y dependerá tanto de la concentración inicial de el reactante analizado, como de las concentraciones inicial y final del otro.

4.1.1.4. Vida natural o tiempo de vida.

Se entiende por vida natural, también conocido como tiempo de vida, el tiempo en que tarda en decaer la concentración de la sustancia o componente hasta alcanzar una concentración igual a el de la concentración inicial, cuando la reacción química correspondiente a tal decaimiento es de primer orden.

En ese caso, al sustituir en la expresión (4.1.1.5) se tiene que el tiempo de vida natural o tiempo de vida para una reacción de primer orden es:

$$t = \frac{1}{k} \tag{4.1.1.4.4}$$

4.1.2. Equilibrio químico.

Siempre que se habla de equilibrio químico se habla de reacciones que pueden ser reversibles, dichas reacciones químicas se encuentran sujetas al principio de Le Châtelier, el cual establece que cuando un sistema se encuentra en equilibrio, un cambio en cualquiera de las condiciones o factores que en él intervienen, producirá un desplazamiento del equilibrio en una dirección tal que se oponga al efecto de este cambio y buscando restablecer las condiciones iniciales.

Para hablar de equilibrio es necesario recordar la ecuación de energía de un sistema:

$$G = H - TS \tag{4.4.1}$$

donde:

G: energía libre o de Gibbs;

H: entalpía;

S: entropía; y,

T: temperatura en °K.

Por otra parte, dado que tanto la energía libre de Gibbs, como la entalpía y la entropía, por ser funciones de estado responden a Ley de Hess. Esta condición permite conocer los ΔG de una reacción dada, conocidos los ΔG de formación de los reactantes y de los productos.

Por tanto, la ecuación (4.4.1) permite relacionar los ΔG con los ΔH y los ΔS de cualquier reacción, pues si T es constante:

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S \tag{4.4.2}$$

La ecuación (4.4.2) permite definir hacia que lado la reacción resulta espontánea.

Por ejemplo, si la misma se efectúa a presión y temperatura constantes, para $\Delta G < 0$ la reacción procederá espontáneamente hacia la derecha. A medida que la reacción avance, el valor de ΔG disminuirá hasta alcanzar el valor cero, y por tanto se encontrará en equilibrio.

Para $\Delta G > 0$ procederá hacia la izquierda, es decir, la reacción espontánea se lleva a cabo de los productos hacia los reactantes.

Otra manera de expresar la ecuación (4.4.2) es la siguiente:

$$\Delta G = \Delta G^{\circ} + RT \ln K \tag{4.4.3}$$

donde:

 ΔG^{o} : es la energía libre estándar (25°C y 1 atm);

R: constante universal de los gases (0,082 l atm / mol °K; 8,31 Joules / mol °K; o, 1,99 cal / mol °K);

T: temperatura en °K; y,

K: constante de equilibrio de la reacción química.

La constante de equilibrio K de una reacción química reversible como la señalada en la expresión (4.1.6), se calcula, conocidas las concentraciones de las especies presentes en la reacción, de la siguiente manera:

$$K = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b}$$
(4.4.4)

Otra manera de calcular el valor de la constante de equilibrio es igualar la ecuación (4.4.5) a cero, $\Delta G=0$, es decir evaluar la mencionada ecuación para la situación de equilibrio, por lo que al despejar el valor de K se tiene:

$$K = e^{-\Delta G^{\circ}/RT} \tag{4.4.5}$$

La expresión (4.4.5) permite, por medio del valor de K, calcular las concentraciones de los productos, conocidas las especies reactantes o viceversa, en virtud de que para la situación de equilibrio de una reacción química la misma sólo depende de la estequiometría de la reacción y no del mecanismo por el cual ocurre. Ésto se conoce como la Ley de Acción de Masas.

4.1.3. Soluciones de líquidos en líquidos.

La miscibilidad es la capacidad de disolver un líquido en otro; existen ciertos grados de miscibilidad como completamente miscible (alcohol y agua), parcialmente miscible (alcohol y éter), e in - miscibles (benceno y agua).

La solubilidad de líquidos en líquidos viene determinada por la naturaleza de las fuerzas existentes entre las moléculas de las sustancias involucradas.

En general, la combinación de dos líquidos altamente polares puede resultar total o altamente miscible. Otro punto a considerar son los posibles enlaces de hidrógeno, los cuales generan enlaces inter - moleculares muy fuertes. Por ejemplo, el benzoato de metilo, C_6H_5COOCH_3 , es miscible en agua debido a las fuerzas inter - moleculares que se generan por los puentes de hidrógeno.

Lo anteriormente expuesto explica la razón por la cual las sustancias orgánicas, grasas, aceites, alquitranes, goma laca, etc., no son prácticamente miscibles en agua, mientras que son altamente miscibles en compuestos orgánicos como el tetracloruro de carbono, Cl_4C , el éter etílico, $^{(C_2H_5)_2O}$, el sulfuro de carbono, CS_2 , el benceno, C_6H_6 , o la gasolina. Esto se debe a que en la medida que las cadenas formadas por los átomos de carbono se hacen más largas, los grupos oxidrilo $^{(OH^-)}$ se vuelven menos frecuentes, por tanto se presenta una menor afinidad con moléculas similares a las del agua, mientras que aumenta la afinidad con otros compuestos orgánicos.

Ésta último explica porque los azúcares son miscibles en agua, mientras que no lo son en compuestos orgánicos. En el caso de la glucosa, por ejemplo, seis grupos OH^- se encuentran sobre seis átomos de carbono, lo cual aumenta la afinidad de esta molécula con el agua.

Sin embargo, existen excepciones a los casos mencionados con anterioridad, como lo es el comportamiento de la mezcla de ciertos solventes. Un ejemplo de ello son las combinaciones de la nitrocelulosa o algodón de pólvora con el agua y éter: por separado la nitrocelulosa no es miscible en ninguno de los dos solventes, pero cuando estos dos se mezclan sí resulta soluble. Otro caso es el del acetato de celulosa, compuesto de constitución química similar a la nitrocelulosa, el cual es miscible en ambos solventes por separado.

4.1.4. Partición.

La Ley de Partición, también conocida como de distribución, también conocido como de reparto, señala que la relación entre las concentraciones de soluto en dos líquidos inmiscibles es una constante, independiente de la cantidad de soluto añadido, e igual a al relación entre sus respectivas solubilidades:

$$K_{p} = \frac{S_{I}}{S_{II}} = \frac{C_{I}}{C_{II}}$$
 (4.1.4.1)

donde:

K_p: constante de partición;

 S_I, S_{II} : solubilidad del soluto en los solventes I y II; y

 C_I, C_{II} : concentración del soluto en los solventes I y II;

La relación representada por la expresión (4.1.4.1) es cierta siempre y cuando las soluciones sean diluidas (concentraciones bajas). Además, es solamente válida cuando se refiere a la misma especie molecular en ambos solventes, ya que el soluto puede encontrarse parcialmente en ambas soluciones como moléculas sencillas, al estar en parte disociado o asociado al reaccionar con el solvente.

La Ley de Partición es usada en algunos tratamientos para la eliminación, mediante flujos a contracorriente, de sustancias disueltas en fluidos. Este procedimiento permite la disminución de la concentración del soluto en uno de los solventes, mediante la disolución en otro diferente que resulta inmiscible con el primero. Considérese como ejemplo la eliminación de fenoles en agua mediante la utilización en contracorriente de un solvente orgánico como el tetracloruro de carbono.

4.1.5. <u>Coloides</u>.

En ocasiones ciertas sustancias se encuentran suspendidas en los fluidos sin encontrarse en solución. Por ejemplo el caso de una partícula de suelo que se encuentra en un fluido como el agua, la cual ocasionalmente se sedimentará por efecto de la fuerza gravitacional, a menos que la turbulencia generada por la velocidad del fluido no la mantenga suspendida.

Esta partícula puede ser mucho más grande que la mayoría de las moléculas y se encuentra conformada por cientos, tal vez miles o millones, de átomos o moléculas que conforman dicho suelo. En contraste con esta partícula tenemos a las moléculas que se encuentran en solución.

Sin embargo, entre estos dos extremos se encuentran un sinnúmero de posibilidades en las cuales, a pesar de que el tamaño de la partícula es superior a la de una molécula, su peso no alcanza el nivel para que pueda producirse espontáneamente la sedimentación. A todo este espectro de suspensiones es a lo que se llama coloides. Los coloides representan la separación entre las soluciones y las mezclas heterogéneas. Algunos ejemplos de coloides se presentan en la tabla Nº 4.1.5.1.

| Fase del Coloide | Sustancia dispersante | Sustancia en dispersión | Tipo de coloide | Ejemplo |
|---------------------|-----------------------|-------------------------|-----------------|-------------------|
| Gas | Gas | Gas | - | No existe |
| Gas | Gas | Líquido | Aerosol | Niebla |
| Gas | Gas | Sólido | Aerosol | Smog |
| Líquido | Líquido | Gas | Espuma | Espuma de afeitar |
| Líquido | Líquido | Líquido | Emulsión | Leche |
| Líquido | Líquido | Sólido . | Sol | Pintura |
| Sólido | Sólido | Gas | Espuma sólida | Marshmallows |
| Sólido | Sólido | Líquido | Emulsión sólida | Mantequilla |
| Sólido | Sólido | Sólido | Sol sólido | Vidrio rubí |

Tabla Nº 4.1.5.1: Tipos de coloides. (Fuente: Brown, T., LeMay, E. and Bursten, B., Chemistry The Central Science. Prentice Hall, Seventh Edition. 1997, página 479).

El tamaño de las partículas en suspensión es la propiedad usada para clasificar una mezcla como un coloide, entendiéndose como tal a las partículas suspendidas con diámetros entre 10 y 2000 Å. Estas partículas pueden encontrarse conformadas por grupos de átomos, iones, moléculas o incluso por una macromolécula como en el caso de la sangre, donde una sola molécula de hemoglobina tiene dimensiones aproximadas de 65 Å x55 Å x50 Å.

Los coloides se clasifican en tres clases generales que dependen del tamaño de las partículas: dispersiones coloidales, soluciones de macromoléculas y coloides de asociación. Las dispersiones coloidales consisten en suspensiones en un medio de sustancias insolubles en forma de partículas conteniendo muchas moléculas individuales, como el caso del aceite en el agua. Las soluciones de macromoléculas, son verdaderas soluciones de macromoléculas que quedan dentro del intervalo coloidal, como el caso mencionado de la sangre. Finalmente, los coloides de asociación consisten en soluciones de sustancias de relativamente bajo peso molecular, las cuales, para una concentración particular según el caso, se asocian formando agregados de tamaño coloidal, como el caso de las soluciones jabonosas.

Quizás el grupo de coloides de mayor importancia es aquel que tiene como sustancia dispersante el agua. Dentro de este grupo se identifican dos categorías: los coloides hidrofílicos, los cuales tienen una alta afinidad con el agua; y, los hidrofóbicos, los cuales tienen una baja o ninguna afinidad con el agua.

Dadas las dimensiones de las partículas que definen a los coloides, su proceso de remoción no resulta viable por medio de la filtración. Es por ello que se requiere de un proceso de coagulación, el cual genera partículas de mayor tamaño y por consiguiente de mayor peso, llamadas flóculos, las cuales pueden ser removidas mediante sedimentación o filtración.

En general estas sustancias coagulantes son electrolitos que anulan las cargas superficiales de las partículas formando núcleos de atracción para las partículas en suspensión. Este proceso resulta particularmente eficiente para el caso de coloides hidrófobos, dado que con relativas bajas concentraciones de electrolitos se logra la formación de flóculos.

Cabe destacar que en el caso de coloides hidrofílicos la capa de medio dispersante que rodea a la fase dispersa impide la neutralización de cargas que permite la formación del flóculo, razón por la cual se deben emplear simultáneamente sustancias que tengan alta afinidad con el medio dispersante a fin de eliminar la capa superficial que rodea a la fase dispersa, o utilizar altas concentraciones de electrolitos a fin de crear un efecto salino que provoca la solvatación de los iones separando el agua absorbida por las partículas dispersas, permitiendo la neutralización de cargas necesaria para la formación del flóculo.

En consecuencia, la cantidad de electrolito requerido para precipitar un sol hidrofóbico depende de la naturaleza de éste y de la del electrolito añadido. Para un sol hidrofóbico específico, el poder precipitante es función en primer lugar de la valencia de los iones de signo opuesto al del coloide. La tabla Nº 4.1.5.2 presenta algunos resultados de la precipitación de soles positivos y negativos con varios electrolitos. La concentración que aparece reflejada en la tabla se refiere a la cantidad mínima de electrolito

requerido para producir la precipitación en dos horas. Nótese como las concentraciones de electrolito necesario desciende rápidamente con el aumento de la valencia del catión o anión.

| Sol de hidróxido | férrico (positivo) | Sol de Sulfuro Arsenioso (negativo) | |
|---|------------------------------------|-------------------------------------|------------------------------------|
| Electrolito | Concentración (milimoles/litro) | Electrolito | Concentración (milimoles/litro) |
| NaCl | 9,30 | NaCl | 51,00 |
| KCI | 9,00 | KCI | 50,00 |
| KI | 16,20 | KHNO ₃ | 50,00 |
| BaCl ₂ | 9,60 | HCI | 31,00 |
| K ₂ SO ₄ | 0,20 | MgCl ₂ | 0,72 |
| MgSO ₄ | 0,22 | CaCl ₂ | 0,65 |
| K ₂ C ₂ O ₄ | 0,24 | BaCl ₂ | 0,69 |
| K ₂ Cr ₂ O ₇ | 0,19 | ZnCl ₂ | 0,69 |
| K ₃ Fe(CN) ₆ | 0,096 | AICI ₃ | 0,093 |

Tabla Nº 4.1.5.2: precipitación de soles positivos y negativos con varios electrolitos (Fuente: Maron, S. Y Prutton C., Fundamentos de Fisicoquímica. Editorial Limusa, Decimocuarta reimpresión. 1984. Página 867).

Sin embargo, en el caso de coloides hidrofílicos la capa de medio dispersante que rodea a la fase dispersa impide la neutralización de cargas que permite la formación del flóculo, razón por la cual se pueden emplear simultáneamente sustancias que tengan alta afinidad con el medio dispersante, tales como los alcoholes o las acetonas, a fin de eliminar la capa superficial que rodea a la fase dispersa, de esta manera al agregar una pequeña cantidad de electrolito produce la coagulación.

Otra manera de lograr la coagulación consiste en utilizar altas concentraciones de electrolitos a fin de crear el "efecto salino" que provoca la solvatación de los iones separando el agua absorbida por las partículas

dispersas, permitiendo la neutralización de cargas necesaria para la formación del flóculo. El "efecto salino" se debe, aparentemente, a la tendencia de los iones a solvatarse causando la remoción del agua adsorbida de las partículas dispersas. El poder salino de varios iones está dado por la serie liótropa o de Hofmeister, en la que los iones se encuentran ordenados por eficiencia decreciente en la coagulación. La tabla Nº 4.1.5.3 presentas las secuencias para aniones y cationes, ordenados en función de la eficiencia mencionada.

Aniones

Citrato⁻³> Tartrato⁻²> SO₄⁻²> PO₄⁻³> Acetato⁻> CI⁻> NO₃⁻> I⁻> CNS⁻

Cationes

Mg⁺²> Ca⁺²> Sr⁺²> Ba⁺²> Li⁺> Na⁺> K⁺> Cs⁺

Tabla Nº 4.1.5.3: Serie liótropa de Hofmeister (Fuente: Maron, S. Y Prutton C., Fundamentos de Fisicoquímica. Editorial Limusa, Decimocuarta reimpresión. 1984. Página 867).

También se pueden retirar mediante la ultrafiltración; en este proceso se emplean membranas semipermeables que permiten el paso de iones y electrolitos, pero que retienen los coloides, o medios filtrantes tales como la porcelana porosa o el vidrio fino sintetizado. En todo caso, el proceso procede muy lentamente de una forma natural, por lo que se acelera con ayuda de la presión o la succión.

En el caso que se desee separar los iones de las partículas coloidales pueden emplearse membranas semipermeables, las cuales permitirán el paso de los mismos al tiempo que retendrán las partículas coloidales. Este

proceso es el que se emplea en la diálisis, proceso mediante el cual se purifica un sol, permitiendo al electrolito difundirse a través de una membrana porosa que es permeable para las moléculas de soluto pero no permite el paso a las partículas coloidales. Dado que el proceso es lento, pudiendo durar días y hasta semanas, se puede aplicar una diferencia de potencial a través de la membrana para acelerar la separación, en cuyo caso se habla de electrodiálisis.

4.1.6. Soluciones de gases en líquidos.

La solubilidad de un gas en un líquido depende de la naturaleza del gas y de la del líquido, así como de la temperatura y de la presión en la que se encuentre la solución.

En general, la solubilidad de un gas disminuye al aumentar la temperatura, a excepción de los gases nobles en los cuales aumenta entre los 15°C y los 30°C proporcionalmente al incremento de la presión.

La Ley de Raoult relaciona la presión de vapor de una solución, con la fracción molar del solvente y la presión de vapor del solvente puro. La expresión correspondiente para la citada Ley es:

$$P_A = x_A P_A^{\circ} {(4.1.6.1)}$$

donde:

 $P_{\mathcal{A}}$: presión de vapor de la solución;

 x_A : fracción molar del solvente A; y,

 P_A° :presión de vapor del solvente A puro.

Mediante la ecuación (4.1.6.1) se puede calcular la concentración de un solvente, y en consecuencia del soluto, conocidas las presiones de la solución y la del solvente puro.

La Ley de Henry describe la relación entre la presión parcial de una sustancia en la fase gaseosa con la fracción molar en la fase líquida, y viene dada por la siguiente expresión general:

$$C_g = kP_g \tag{4.1.6.2}$$

donde:

 C_g : solubilidad del gas en la solución expresada como molaridad;

 P_{g} : presión parcial del gas sobre la solución; y,

k : constante de la Ley de Henry.

En consecuencia, la Ley de Henry permite calcular la concentración de un gas en la fase líquida, conocida la presión parcial sobre la solución, suponiendo que el gas no se ioniza, disocia o reacciona con el líquido. Uno de los ejemplos es la re - aireación de los cuerpos de agua, proceso mediante el cual se incorpora aire a un lago, embalse u otro, permitiendo el aumento de la cantidad de oxígeno disuelto en el agua.

Adicionalmente, otra forma de presentar los datos de equilibrio para gases y líquidos es mediante la Ley de Partición, la cual puede expresarse de la siguiente manera:

$$K_A = \frac{y_A}{x_A}$$
 (4.1.6.3)

donde:

 K_A : coeficiente de partición de la sustancia A;

 y_A : fracción molar de la sustancia A en el gas; y,

 x_A : fracción molar de la sustancia A en el líquido.

4.1.6.1 Re - aireación.

En los casos en los que la concentración de oxígeno es menor a la de saturación, se establece un flujo neto de oxígeno entre la atmósfera y el fluido. Este flujo es proporcional a la diferencia de concentración de oxígeno disuelto y a la concentración de saturación.

La expresión empleada para calcular la tasa o velocidad de re – aireación es:

$$r_r = \frac{K_r A(C_s - C)}{V} = \frac{K_r (C_s - C)}{H} = K_2 (C_s - C)$$
 (4.1.6.1.1)

donde:

 r_r : ganancia de oxígeno por unidad de tiempo y de volumen de agua (m/TL³);

 K_r : velocidad del flujo de re- aireación (L/t);

 A: superficie de contacto entre la atmósfera y el volumen de control (L²);

V: volumen de control (L^3);

 C_s : concentración de saturación del oxígeno (m/L³);

C: concentración del oxígeno disuelto (m/L3);

H: profundidad del volumen de control (L); y,

 K_2 : velocidad de re – aireación superficial (1/t).

Para la determinación de la velocidad de re – aireación superficial, K_2 , se han propuesto diversas fórmulas empíricas y semi – empíricas, la mayoría de éstas se desarrollaron para ríos y cauces fluyentes, sin embargo, con frecuencia se emplean para el cálculo en lagos y zonas costeras.

Una de las fórmulas más empleadas para la determinación de la velocidad de re – aireación superficial, K_2 , es la O'Connors y Dobbins (1958), la cual se presenta a continuación:

$$K_2 = \frac{(D_o U)^{\frac{1}{2}}}{H^{\frac{3}{2}}}$$
 (4.1.6.1.2)

donde:

 D_o : coeficiente de difusión molecular del oxígeno en agua

$$(D_o = 1.76 \times 10^{-4} \, m^2 / dia = 20^{\circ}\text{C});$$

Corrección por temperatura:

$$D_o = 1.76 \times 10^{-4} \times 1.037^{(T-20^{\circ}C)}$$
;

U: velocidad del flujo (L/t); y,

H: profundidad del volumen de control (L;).

El volumen de control debe extenderse hasta el fondo del cuerpo de agua, razón por la cual es conveniente que dicho volumen de control sea lo suficientemente pequeño para garantizar que la concentración de oxígeno disuelto es aproximadamente uniforme.

Los valores obtenidos mediante al fórmula anterior resultan inferiores a los reales, sobre todo en los casos en los cuales existen corrientes transversales donde la diferencia puede ser hasta de dos tercios del valor real.

También existe la posibilidad de calcular el valor del coeficiente de re-aireación superficial mediante una aproximación basada en la disipación de la energía, que tiene la siguiente forma:

$$K_2 = \frac{C_e \Delta h}{t_f}$$
 (4.1.6.1.3)

donde:

 Δh : variación de la altura de la superficie del agua;

t_f: tiempo de viaje;

 C_e : coeficiente de escape, el cual asume los siguientes valores:

 $C_e = 0,177 m^{-1} {\rm a}$ 20°C para cursos con caudales superiores a 7 m³/seg; y,

$$C_e = 0.09 m^{-1}$$
a 20°C para el resto;

Corrección por temperatura: $C_e = C_e 1,022^{(T-20^{\circ}C)}$.

4.1.6.2 Difusión molecular en la interfase líquido - gas.

Algunos compuestos, como los orgánicos volátiles (COV), están sujetos a la volatilización; los principios físicos que gobiernan este proceso son similares a los que rigen el fenómeno de re- aireación superficial, con la diferencia de que en este caso el flujo de oxígeno sigue la dirección inversa

Entonces la rata de volatilización puede expresarse como:

$$r_{v} = -K_{v}C \tag{4.1.6.2.1}$$

donde:

 r_v : velocidad de volatilización por unidad de tiempo y de volumen (m/tL³):

 K_v : constante de volatilización (1/t); y,

C: concentración del compuesto (m/L³).

Con la finalidad de determinar el valor de la constante de volatilización K_{v} , se propone que para compuestos altamente volátiles, es decir, para compuestos con un valor de la constante de la Ley de Henry superior a 0,001 $(k>0,001^{at}\times m^{3}/mol)$, la constante de volatilización se relacionan con la constante de re-aireación según la siguiente expresión:

$$K_y = \frac{d_o}{d_c} \approx K_2 \frac{D_o}{D_c}$$
 (4.1.6.2.2)

donde:

do: diámetro molecular del oxígeno (L);

d_c: diámetro molecular del compuesto (L);

 D_o : coeficiente de difusión del oxígeno en el agua (L²/t); y

 D_c : coeficiente de difusión del contaminante en el agua (L^2/t) .

4.2. Fotosíntesis y respiración.

Los niveles de oxígeno disuelto en el entorno pueden verse afectados por el crecimiento de algas o hierbas que se alimentan a base de amoníaco y nitratos. En este contexto, los compuestos nitrogenados constituyen nutrientes. Durante las horas de luz solar estos seres vivos son fuentes generadoras de oxígeno debido a los procesos de fotosíntesis, al tiempo que representan un sumidero de este gas a todas las horas del día como consecuencia de la respiración.

Mientras la cantidad de nutrientes se mantenga moderada, el balance entre el oxígeno generado por la fotosíntesis y el consumido por la respiración genera poco impacto. Sin embargo, en caso que se produzca una disponibilidad de nutrientes superior a la usual, el balance se alterará generando momentos durante las horas diurnas en las que los niveles de oxígeno disuelto podrían alcanzar los de saturación, mientras que durante la noche podrían alcanzar niveles muy bajos. Este es el proceso que conlleva a la eutrofización de los cuerpos de agua.

En otro orden de ideas, este mismo concepto se está empleando internacionalmente como base a lo que se llama bosques captadores de carbono en el mecanismo de Implementación Conjunta (Joint Implementation), dentro del marco de las negociaciones del Convenio Marco sobre Cambio Climático (1992).

El efecto invernadero producido por algunos gases, entre los que se encuentra el dióxido de carbono, es responsable de que la vida en la tierra sea posible, debido al efecto amortiguador que tienen con relación a los diferenciales de temperatura que se podrían alcanzar en diferentes partes del planeta y a diferentes horas del día o de la noche.

Sin embargo, el aumento en las concentraciones de estos gases a partir del surgimiento de la era industrial, está produciendo cambios acelerados en

los niveles de las temperaturas que podrían afectar el equilibrio presente en el planeta.

Es por ello que entre las medidas que se han discutido en los diversos foros internacionales sobre la materia se han incluido los efectos de los bosques. Este gas es tomado por las plantas en el proceso de fotosíntesis para ser transformado en biomasa; sus efectos son realmente importantes para el período de mayor crecimiento de las especies, es decir hasta que alcanzan su madurez. A partir de ese momento la biomasa ganada por efecto de la fijación del dióxido de carbono resulta marginal, dado el balance que se establece entre la cantidad fijada durante las horas de luz por la fotosíntesis y la generada por la respiración durante todo el día.

4.3. Crecimiento y Mortalidad bacteriana.

Las comunidades bacterianas o de virus no permanecen estables en cuanto a su número; en el caso que se prevea el crecimiento o la desaparición paulatina tanto de unas como de los otros, debida por ejemplo al aumento en el primer caso o la disminución de nutrientes en el segundo, se deberá tomar en consideración esta situación para el cálculo de su concentración final.

Pruebas efectuadas a diferentes comunidades bacterianas y a virus, indican que su velocidad de crecimiento o de desaparición sigue, aproximadamente, un proceso de cinética de primer orden como el descrito en el punto 4.4.1 para reacciones químicas. En consecuencia, la velocidad para la desaparición de las bacterias y los virus puede expresarse como:

$$v = {}^{+}_{-} KC_{B} {(4.3.1)}$$

donde:

v: velocidad de desaparición (colonias/L3t);

K: constante del proceso (depende de la bacteria, virus, y de las condiciones del medio); y,

 C_B : concentración de las bacterias o virus (colonias/L³)

El signo + ó - se asignará dependiendo de si se trata de crecimiento o desaparición de las colonias, respectivamente.

Al igual que en los casos de las reacciones químicas primer orden, la ecuación que relaciona la concentración de bacterias o virus con el tiempo es:

$$C = C_0 e^{\left(\frac{t}{L}kt\right)} \tag{4.3.1}$$

siendo C la concentración final en el tiempo t y C_0 la concentración inicial.

En ocasiones la tasa de mortalidad se expresa en función del t_{90} , es decir, el tiempo necesario para que ocurra el 90% de las pérdidas, o lo que es lo mismo, que el 10% de las colonias permanezca. Sustituyendo en la expresión (4.3.1) se tiene:

$$0.1C_0 = C_0 e^{(-kt_{90})} (4.3.2)$$

Despejando de esta expresión el valor de t_{90} , tenemos:

$$t_{90} = \frac{-\ln 0.1}{K_B} = \frac{2.3}{K_B}$$
 (4.3.3)

4.4. Deposición o Sedimentación.

El proceso de deposición o sedimentación se produce por efecto del predominio de la fuerza de gravedad que se ejerce sobre las partículas que se encuentran suspendidas en un fluido, se encuentre éste en estado gaseoso o líquido.

Para calcular la velocidad de deposición de una partícula, es necesario considerar la acción de tres fuerzas sobre ella: la fuerza de arrastre; la fuerza de flotación, también llamada boyantez, y la fuerza gravitacional.

Suponiendo que la Ley de Stokes es válida (número de Reynolds menores a 105), y que la partícula asemeja a una esfera, la expresión para la fuerza de arrastre es:

$$F_A = 3\pi D\mu U \tag{4.4.1}$$

siendo:

 F_{A} : fuerza de arrastre;

D: diámetro de la partícula (L);

μ. viscosidad del fluido (m/Lt); y,

U: velocidad del fluido(L/t).

Para el caso de la fuerza de flotación, la misma equivale al peso del volumen de fluido desplazado, es decir:

$$F_F = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{D}{2}\right)^3 \gamma \tag{4.4.2}$$

donde:

0000000

y. peso específico del fluido.

Mientras que para la fuerza gravitacional o peso de la partícula, la expresión es:

$$W = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{D}{2}\right)^3 \gamma_S \tag{4.4.3}$$

donde:

 $\boldsymbol{\gamma}_{\scriptscriptstyle S}$: peso específico de la partícula.

Igualando las suma de las fuerzas de arrastre y flotación con la del peso de la partícula, y despejando la velocidad de la expresión resultante, se tiene:

$$U = \frac{D^2}{18\mu} (\gamma_s - \gamma) \tag{4.4.4}$$

La ecuación (4.4.4) es la expresión que permite determinar la velocidad terminal de asentamiento de una partícula.

Para los casos de deposición seca en la atmósfera, cuando el modelo empleado es el Gaussiano y el diámetro de las partículas se encuentra entre 10 y 100 μ m, los resultados pueden considerarse aceptables. Para los casos de partículas con diámetros inferiores a 1 μ m y densidades menores de $1\frac{g}{cm^3}$, se asume que no existe deposición seca.

4.5. Adsorción.

Mediante el proceso de adsorción una masa sólida o líquida es capaz de fijar o capturar una sustancia que entre en contacto con su superficie. Ésto ocurre debido a que las fuerzas moleculares en la superficie del sólido se encuentran en un estado de instauración sin balancear. La sustancia adsorbida se denomina fase adsorbida, mientras que aquélla que adsorbe se lama adsorbente. La diferencia entre adsorción y absorción estriba en que en la primera la acumulación de la sustancia se realiza en la superficie, mientras que en la segunda penetra y se distribuye en el cuerpo. En los casos en que existan dudas sobre si la sustancia se acumula en la superficie o penetra en el cuerpo se habla se sorción.

Este fenómeno tiene importancia tanto en fluidos gaseosos como en líquidos. Sin embargo cobra particular importancia en el caso de sustancias que atraviesan suelos, y por tanto en los procesos que conducen a la contaminación de las aguas subterráneas, debido a la alta concentración de sólidos que se encuentran en ellas.

También se emplea como un medio para retirar una cierta sustancia o contaminante de un flujo.

4.5.1. Adsorción de gases en sólidos.

Todos lo sólidos adsorben en un cierto grado los gases, sin embargo, el fenómeno, en general, no adquiere dimensiones considerables. Es por ello que, en el caso de que se desee retirar una sustancia de un flujo gaseoso mediante adsorción, se utilizarán adsorbentes que posean superficies considerables con relación a sus volúmenes, como el gel de sílice o los negros de humo. Dado que la superficie total del absorbente no puede determinarse con facilidad, se acostumbra usar la masa como medida de la superficie disponible.

Las fuerzas que activan la adsorción son de naturaleza diversa. En general se reconocen dos tipos, una física debida a las fuerzas de Van der Waals, y otra química o activada. La primera se caracteriza por el hecho de que el calor de adsorción (calor desprendido durante el proceso) es relativamente bajo (≤10.000 cal), además de que el proceso resulta reversible y se establece rápidamente. Por otra parte, la química o activada

se caracteriza por que el calor de adsorción generado es mayor (entre 20.000 y 100.000 cal), lo cual genera una unión más estable entre la fase adsorbida y el adsorbente. Los dos tipos de adsorción señalados pueden producirse encadenados, uno tras otro, o de manera simultánea.

Además, es posible modificar el grado de adsorción alterando la temperatura y la presión del gas. En el caso de la temperatura, cualquier aumento produce una disminución de la adsorción, mientras que para la presión la dependencia se produce en forma contraria que para la temperatura, es decir, sus aumentos generan un aumento del fenómeno.

4.5.2. Adsorción de solutos en sólidos.

Las superficies sólidas pueden adsorber también sustancias disueltas. Por ejemplo, es posible extraer amoníaco de una solución de hidróxido amónico mediante la utilización de carbón activado.

Por regla general, el carbón activado es mucho más efectivo adsorbiendo no electrolitos que electrolitos de una solución, dependiendo además del peso molecular de la sustancia que se pretenda adsorber. Por otra parte, los sólidos inorgánicos tienden a adsorber electrolitos con mayor facilidad que los no electrolitos; esta tendencia de los adsorbentes para atraer ciertas sustancias de preferencia a otras, conduce en ocasiones al fenómeno de adsorción negativa, es decir, la concentración del soluto aumenta en la solución. La explicación sugerida a tal fenómeno es que el

solvente se adsorbe de preferencia al soluto, elevando la concentración de éste último.

Al igual que en los casos de gases en sólidos, el aumento de la temperatura disminuye la adsorción de solutos en sólidos.

Pruebas efectuadas a diferentes comunidades bacterianas y a virus, indican que su velocidad de desaparición sigue, aproximadamente, un proceso de cinética de primer orden como el descrito en el punto.

4.6. Estratificación.

La estratificación es un fenómeno que se produce cuando la tasa de variación de la temperatura en un determinado medio se altera, produciendo un quiebre en la línea que representa la variación de dicho parámetro en función de la profundidad o la altitud. El lugar donde aparece el quiebre corresponderá al nivel que actuará como barrera natural a los fenómenos de transporte en dicho medio.

También se genera debido a la diferencia de densidades entre fluidos que se encuentran, produciendo una separación entre el fluido más denso que se ubicará por debajo del fluido menos denso. Nuevamente el área de contacto entre ambos fluidos constituirá una barrera natural a los fenómenos de transporte entre ambas regiones.

4.6.1. Estratificación en lagos.

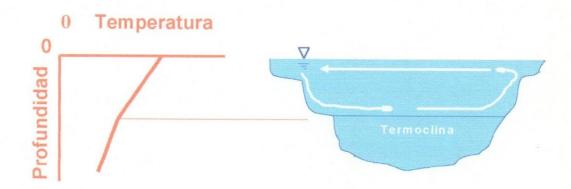
Tal y como ya se indicó, éste fenómeno que se genera debido a la modificación de la tasa de variación de la temperatura a una determinada profundidad del cuerpo de agua. El punto en el cual se produce la modificación de la tasa de variación de la temperatura se llama termoclina.

Las figuras 4.6.1.1 y 4.6.1.2 representan lagos sin y con estratificación, respectivamente.

Figura N° 4.6.1.1:Lago sin Estratificación



Figura N° 4.6.1.2:Lago Estratificado



4.6.2. Estratificación en estuarios.

Los estuarios son cuerpos de aguas más complejos que los ríos y los lagos. Su complejidad se debe al hecho que son lugares en los cuales se encuentran los flujos de agua fresca provenientes de ríos o lagos con las masas y flujos de los mares y océanos. Las diferencias de salinidad, y por ende de densidad, generan estratificación, mientras que los movimientos de ambos cuerpos de aguas (ríos o lagos y mares u océanos) generan mezcla y dispersión.

En todo momento el flujo de entrada de agua fresca es igual al del río o lago. Sin embargo, el curso que sigue cambia dependiendo de la profundidad y de los flujos de marea.

Cuando en un estuario se desarrolla una clara condición de estratificación se habla de creación de una Cuña Salina, la cual se podrá mover por debajo del agua fresca hacia aguas arriba, es decir en dirección contraria a la del flujo proveniente del río o lago.



Figura N° 4.6.2.1: Presencia de una cuña salina como resultado de la estratificación en un estuario.

4.6.3. Estratificación en la atmósfera.

El fenómeno de estratificación en la atmósfera recibe el nombre de inversión térmica, y tiene origen en las diferencias en el calentamiento de la superficie de la tierra y de la capa de aire sobre ella debido a la radiación solar que recibe durante las horas diurnas, con relación a enfriamiento que sufre la atmósfera en las horas nocturnas.

Estas diferencias de temperatura pueden generar capas estables que "atrapan" los contaminantes y no permiten la mezcla con el medio fuera de la capa.

4.7. Eutroficación.

La eutroficación consiste en un proceso natural que puede iniciarse con un enriquecimiento de oxígeno, el cual provoca un aumento del crecimiento de las plantas acuáticas, que genera a su vez la disminución progresiva del oxígeno en el cuerpo de agua que provoca la muerte de las plantas acuáticas, lo cual a su vez incrementa la demanda de oxígeno de los sedimentos, pudiendo llegar a generar zonas pantanosas debido al aumento de los individuos muertos, hasta alcanzar, en un caso extremo, la desecación completa o parcial del cuerpo de agua.

Este proceso puede acelerarse por el aporte de nutrientes por parte del hombre. La relación de este proceso con el aporte de nutrientes es compleja. En lagos y embalses el fósforo suele ser el nutriente limitante. Un criterio que puede ser empleado para determinar cuándo la concentración de nutrientes comienza a ser un problema debido a la eutroficación, es establecer el límite para la concentración de fósforo y nitrógeno en 0,01 mg/l y 0,3 mg/l, respectivamente.

En lagos y embalses estratificados la primera señal de eutroficación es la disminución progresiva del oxígeno disuelto (OD) en la zona más profunda (hypolimnion), la cual no recibe aireación directa alguna.

Las predicciones de las concentraciones de OD en lagos y embalses estratificados se pueden llevar a cabo mediante modelos numéricos uni y/o bi dimensionales que simulen los ciclos de nitrógeno y del fósforo, así como los efectos de la temperatura.

4.8. Demanda Bioquímica de Oxígeno.

La demanda bioquímica de oxígeno (DBO) es la cantidad de oxígeno necesaria para la actividad bacteriana y la oxidación de la materia orgánica en un cuerpo de agua. En primer lugar se oxida la DBO carbonosa, y después de ocho a doce días comienza la oxidación de la DBO nitrogenada. La oxidación de la materia orgánica carbonosa como de la nitrogenada, son procesos de primer orden, por tanto, la velocidad de oxidación es

proporcional a la DBO presente. Es por ello que se puede expresar la tasa de consumo de oxígeno debido a la degradación de la materia orgánica como:

$$r_{C} = -K_{C} \times DBO_{C}$$

$$y$$

$$r_{N} = -K_{N} \times DBO_{N}$$
(4.8.1)

siendo:

 r_C : velocidad de reducción de la DBO carbonosa;

 r_N : velocidad de reducción de la DBO nitrogenada;

 K_C : constante de reacción de la DBO carbonosa;

 K_N : constante de reacción de la DBO nitrogenada;

 DBO_C : DBO carbonosa; y,

 DBO_N : DBO nitrogenada.

Para calcular la velocidad total de pérdida de oxígeno debido a la presencia de materia orgánica en el fluido, se suman las velocidades de pérdida de oxígeno debido a la DBO carbonosa y a la nitrogenada. En consecuencia:

$$r_O = r_C + r_N (4.8.2)$$

4.9. Demanda de oxígeno de los sedimentos.

Parte de los sólidos que se sedimentan en el fondo de los cuerpos de agua son de origen orgánico, una vez allí continúan o inician sus procesos de descomposición; éstos procesos pueden ser aeróbicos o anaerobios. En el caso de los procesos aeróbicos constituyen un sumidero para el oxígeno presente en el fluido.

En consecuencia, se deberá calcular la rata de pérdida de oxígeno debido a la demanda de los sedimentos según la siguiente fórmula:

$$r_S = -\frac{k_s}{H} \tag{4.9.1}$$

siendo:

 k_{s} : tasa de consumo de oxígeno de los sedimentos (m/L²t); y,

H: altura del volumen de control (L).

El valor de k_S se ve influenciado por la cantidad de materia orgánica presente en los sedimentos, la temperatura, la cantidad de oxígeno disuelto en la interfase fluido — sedimentos, el crecimiento de las comunidades biológicas y la velocidad de la corriente.

Tomando en consideración los factores de los cuales depende la tasa de consumo de oxígeno de los sedimentos, k_S puede asumir los siguientes valores:

- ✓ En zonas próximas al vertido de aguas residuales municipales: 2
 10 gr/m²seg;
- ✓ Aguas abajo de zonas con vertidos de aguas residuales municipales: 1 – 2 gr/m²seg;
- ✓ Fango natural de estuarios: 1 2 gr/m²seg;
- √ Fondos arenosos: 0,2 1 gr/m²seg; y
- √ Fondos minerales: 0,05 0,1 gr/m²seg.

También puede calcularse el valor de k_S a partir de las velocidades de deposición de los sólidos, asumiendo que la velocidad de deposición es igual a la de descomposición:

$$k_s = ar_o R_d \tag{4.9.2}$$

siendo:

a: relación estequiométrica entre el oxígeno y los sedimentos ($a \approx 1,07$);

r_o: contenido orgánico oxidable:

 $0.5 \le r_o \le 0.6$ para efluentes secundarios; y, $r_o \approx 0.8$ para efluentes primarios.

 R_d : velocidad de sedimentación de los sólidos (m/L 2 t).

4.10. Degradación química por efecto de la luz.

Existen ciertas reacciones químicas que requieren de la energía suministrada por la luz como catalizador. El cálculo de la energía suministrada se realiza mediante la siguiente fórmula:

$$E = h \times \upsilon \tag{4.10.1}$$

siendo:

h: constante de Plank (6,6 x 10⁻³⁴ Joules seg); y,

 υ : la frecuencia de la luz (t⁻¹):

$$\upsilon = \frac{3 \times 10^{-8} \, m/seg}{\lambda} \tag{4.10.2}$$

donde:

 λ : es la longitud de la luz (L).

Sin embargo, la energía de la cual dispondrá una determinada reacción química para llevarse a cabo dependerá de la intensidad de la luz. En los casos de sustancias presentes en la atmósfera, la intensidad de la luz podrá medirse directamente. Ésta dependerá, entre otras cosas, de la nubosidad y de las partículas suspendidas en la atmósfera

En el caso de un cuerpo de agua, se deberá calcular aquella que logre penetrar dicho cuerpo. Esta intensidad dependerá a su vez de ciertos factores como la profundidad (absorbancia) y la presencia de sustancias o de sólidos en suspensión en el fluido.

Para calcular la intensidad de la luz a una profundidad dada en un cuerpo de agua, se emplea la siguiente fórmula:

$$I = I_0 \times e^{-\eta z} {(4.10.3)}$$

siendo:

 I_0 : sobre la superficie del fluido (watts/L²);

η: coeficiente de extinción (disco Secchi) (L-1); y,

z: profundidad en el fluido (L).

4.11. Impacto.

Resulta difícil calcular cuánto contaminante es arrastrado cuando un cuerpo en movimiento atraviesa un cierto volumen de aire, o cuánto contaminante arrastrará el cuerpo al salir de dicho volumen. Una aproximación consiste en utilizar la velocidad de $1\frac{cm}{seg}$ calculada para la deposición sobre la cobertura vegetal.

En consecuencia, sustituyendo en la expresión de densidad de flujo:

$$J = C \times 1 \frac{cm}{seg} \tag{4.11.1}$$

Siendo C la concentración y $J(m/L^2t)$ la densidad de flujo, siendo ésta última la cantidad de masa de contaminante "arrastrada" por un cuerpo, por unidad de área de dicho cuerpo, en el intervalo de tiempo analizado.

4.12. Deposición Húmeda.

Para encontrar la concentración de contaminante que puede ser arrastrada por las gotas de agua, se emplea la Ley de Henry:

$$C_a = \frac{C_g}{K} \tag{4.12.1}$$

siendo:

 C_a : concentración en el agua;

 $C_{m{g}}$: concentración en el gas; y,

K: constante de la Ley de Henry.

Para calcular la concentración remanente en la atmósfera, se emplea la fórmula de decaimiento, es decir:

$$C = C_0 e^{-\lambda t} \tag{4.12.2}$$

Donde λ es el coeficiente de decaimiento.

5. Tipos de fuentes.

En todos los casos de las deducciones realizadas en el punto 3 se ha considerado como fuente tipo la puntual instantánea ubicada dentro de un sistema de ejes cartesianos. Sin embargo, no todos los tipos de fuentes de sustancias son del tipo desarrollado hasta el momento, y en ocasiones un cambio de sistema de referencia simplifica las expresiones, y por ende los cálculos.

A continuación se relacionan los tres tipos básicos de fuentes, las puntuales (en coordenadas esféricas), las lineales y las planas, señalándose las expresiones tanto para los casos de inmisiones instantáneas como continuas.

5.1. Fuente puntual.

5.1.1. Fuente Puntual Instantánea.

Una fuente puntual instantánea puede representar el derrame accidental de una sustancia en el momento en que se efectúa su carga o su transporte en unidades móviles, o bien el escape instantáneo a través de una válvula de alivio de presiones en un sistema de seguridad dentro de una unidad de un proceso.

A continuación se presenta una simplificación de la fórmula hallada en el punto 3 para difusión molecular, deducida a partir de un cambio de coordenadas.

5.1.1.1. <u>Fuente Puntual Instantánea sometida a Difusión</u> Molecular.

Las expresiones encontradas en el punto 3 sólo contemplan las modificaciones de la concentración de una manera unidimensional, pues evalúan dicha modificación en la dirección x. Este hecho hace que las ecuaciones hasta ahora señaladas no permitan analizar la realidad tridimensional del fenómeno. Es por eso que el primer paso dentro de este punto debe dedicarse a encontrar una expresión que represente la realidad tridimensional.

En consecuencia, la ecuación diferencial gobernante para una fuente puntual en un flujo uniforme con turbulencia homogénea y anisotrópica, asumiendo que la sustancia sufre un decaimiento correspondiente a una reacción de primer orden cuya constante cinética es k, se expresa así:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = -\left(D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) - kC \qquad (5.1.1.1.1)$$

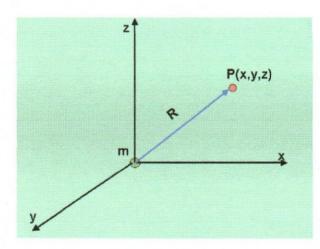
Al integrar esta expresión, asumiendo que la fuente se encuentra en el origen de coordenadas, se tiene:

$$C = \frac{m}{(4\pi t)^{3/2} (D_x D_y D_z)^{1/2}} \exp\left[\frac{x^2}{4D_x t} + \frac{y^2}{4D_y t} + \frac{z^2}{4D_z t} + kt\right]$$
(5.1.1.1.2)

En el caso de que la fuente se encuentre ubicada en un punto de coordenadas (x_I, y_I, z_I) , entonces la ecuación (5.1.1.1.2) toma la forma:

$$C = \frac{m}{(4\pi t)^{3/2} (D_x D_y D_z)^{1/2}} \exp \left[\frac{(x - x_1)^2}{4D_x t} + \frac{(y - y_1)^2}{4D_y t} + \frac{(z - z_1)^2}{4D_z t} + kt \right]$$
(5.1.1.3)

Otra manera de enfrentar el fenómeno de transporte de una sustancia es asociando la fuente puntual del contaminante a un sistema polar esférico. La ventaja de este enfoque radica en el hecho de que la distribución de la concentración resulta uniforme y constante para todo punto que se encuentre a igual distancia de la fuente.



La figura Nº 5.1.1.1.1 representa una fuente puntual ubicada en el origen de coordenadas, sometida únicamente a difusión molecular.

Figura Nº 5.1.1.1.1: Fuente Puntual.

Transformado las coordenadas, la ecuación (3.2.1.2) asume la forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D_m}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial C}{\partial R} \right) \tag{5.1.1.4}$$

Asimismo, la ecuación de conservación de la masa puede expresarse en coordenadas esféricas como:

$$m = \int C4\pi R^2 dR$$
 (5.1.1.5)

Luego de efectuar los cambios necesarios de variables, y de integrar por partes, se obtiene:

$$C = \frac{m}{8(\pi D_m t)^{3/2}} e^{-\left(\frac{R^2}{4D_m t}\right)}$$
 (5.1.1.1.6)

donde:

 $R = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, siendo x, y y z, las coordenadas del punto en el cual se desea conocer la concentración.

La ecuación (5.1.1.1.6) representa la expresión que permite calcular la concentración de una sustancia en un punto P de coordenadas (x, y, z), cuando la fuente es puntual y descarga una masa m de manera instantánea en el origen de coordenadas, debida exclusivamente a la difusión molecular.

De igual manera se puede encontrar la expresión genérica para determinar la concentración cuando la fuente puntual instantánea se encuentra en un punto S de coordenadas (x_1, y_1, z_1) . En ese caso, basta sustituir el término R de la ecuación (5.1.1.1.6) por la expresión

 $\sqrt{(x-x_1)^2+(y-y_1)^2+(z-z_1)^2}$, la cual representa la distancia existente entre la fuente y el punto en el cual se desea conocer la concentración.

Como se puede apreciar al comparar las expresiones (3.2.1.6) y (5.1.1.1.6), la segunda resulta mucho más simple emplear ya que no requiere conocer el área atravesada por el flujo de la sustancia, sólo se requiere conocer la ubicación de la fuente y la del punto en el cual se desea obtener la concentración.

5.1.2. Fuente Puntual Continua

5.1.2.1 <u>Fuente Puntual Continua en Flujo Uniforme con</u> turbulencia Homogénea y Anisotrópica.

Las fuentes puntuales continuas representan un vasto espectro de las formas en que una sustancia entra en el ambiente. Algunos de los ejemplos representativos se tienen en la descarga de una población o la de una industria en un cuerpo de agua, o la pluma generada por la chimenea.

La solución aproximada para una fuente puntual continua puede determinarse sumando el efecto que producen infinitas fuentes puntuales instantáneas que ocurren a iguales intervalos infinitesimales de tiempo. La figura Nº 5.1.1.2.1 representa esas inyecciones instantáneas de masa

dm que ocurren a intervalos de tiempo dt, durante un tiempo total igual a t^{l} .

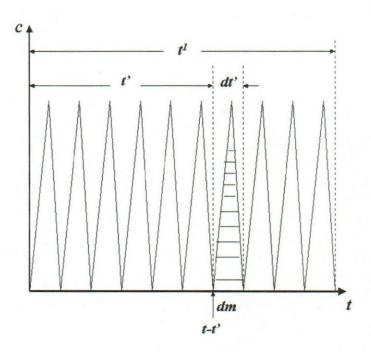


Figura Nº 5.1.1.2.1: Secuencia de fuentes instantáneas formando una fuente continua. (Fuente: Harleman, D., Transport Proceses in Environmental Engineering, Massachussets Institute of Technology. 1990. Página 2-53).

Como se infiere de la figura Nº 5.1.1.2.1, el tiempo se mide desde el momento cuando inician la serie de inyecciones instantáneas, siendo la duración total de los eventos t^{I} . También se representa la inyección de masa dm que ocurre en el intervalo de tiempo entre t ' y t ' + dt '.

Considerando una fuente puntual continua ubicada en el origen de coordenadas, en un flujo uniforme con turbulencia homogénea y anisotrópica, cuya sustancia tenga un decaimiento de primer orden de su concentración, correspondiente a una constante cinética k, se tiene que la ecuación diferencial gobernante es:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = -\left(D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) - kC \qquad (5.1.2.1.1)$$

En consecuencia la expresión diferencial para la concentración de la sustancia es:

$$dC = \frac{dm}{\left[4\pi(t-t')\right]^{3/2} \left(D_x D_y D_z\right)^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{4(t-t')} \left(\frac{\left(x - U(t-t')\right)^2}{D_x} + \frac{y^2}{D_y} + \frac{z^2}{D_z}\right) - k(t-t')\right]$$
(5.1.2.1.2)

donde D_i es el coeficiente de difusión en la dirección correspondiente.

Por otra parte se tiene que:

$$q = \frac{dm}{dt} \tag{5.1.2.1.3}$$

siendo q la masa de sustancia por unidad de tiempo que entra en el medio.

Despejando de la ecuación (5.1.2.1.3) dm en función del diferencial de t', y sustituyendo en la expresión (5.1.2.1.2), se puede determinar la concentración de la sustancia en un punto de coordenadas x, y y z, después de transcurrido un tiempo t, para el caso de una inyección continua de la sustancia en el medio, la cual se efectúa solamente con una duración t_I , siendo $t > t_I$. Esto se logra integrando la expresión (5.2.1.1.2) entre t = 0 y $t = t_I$.

La expresión correspondiente a la integral es:

$$C = \int_{0}^{t_{1}} \frac{q}{\left[4\pi(t-t')\right]^{3/2} \left(D_{x}D_{y}D_{z}\right)^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{4(t-t')} \left(\frac{\left(x-U(t-t')\right)^{2}}{D_{x}} + \frac{y^{2}}{D_{y}} + \frac{z^{2}}{D_{z}}\right) - k(t-t')\right] dt'}$$
(5.1.2.1.4)

La expresión (5.1.2.1.4) puede simplificarse efectuando las siguientes sustituciones:

$$a = \frac{x^2}{4D_x} \left[1 + \frac{D_x y^2}{D_y x^2} + \frac{D_x z^2}{D_z x^2} \right]$$

$$b = \frac{U^2}{4D_x} \left(1 + \frac{4D_x k}{U^2} \right)$$

$$\varsigma = (t - t')^{-1/2}$$
(5.1.2.1.5)

Luego de integrar la expresión resultante, se tiene:

$$C = \frac{qe^{\left(\frac{xU}{2D_x}\right)}}{\left(4\pi\right)^{3/2}\left(D_xD_yD_z\right)^{1/2}} \begin{bmatrix} e^{2\sqrt{ab}}\left[erf\left(\sqrt{\frac{a}{t-t_1}}\right) + \left(\sqrt{b(t-t_1)}\right) - erf\left[\left(\sqrt{\frac{a}{t}}\right) + \sqrt{bt}\right]\right] \\ + e^{-2\sqrt{ab}}\left[erf\left(\sqrt{\frac{a}{t-t_1}}\right) - \left(\sqrt{b(t-t_1)}\right) - erf\left[\left(\sqrt{\frac{a}{t}}\right) - \sqrt{bt}\right]\right] \end{bmatrix}$$
(5.1.2.1.6)

La ecuación (5.1.2.1.6) es válida para $t \ge t_1$.

Para el caso que t_I =t, es decir, que el tiempo transcurrido sea el mismo de la duración de la inyección, la expresión (5.1.2.1.6) toma la forma:

$$C = \frac{qe^{\left(\frac{xU}{2D_x}\right)}}{4\pi^{\frac{3}{2}}\left(D_xD_yD_z\right)^{\frac{1}{2}}}\left[e^{2\sqrt{ab}}\left[erfc\left(\sqrt{\frac{a}{t}}\right) + \left(\sqrt{bt}\right)\right] + e^{-2\sqrt{ab}}\left[erfc\left(\sqrt{\frac{a}{t}}\right) - \left(\sqrt{bt}\right)\right]\right]$$
(5.1.2.1.7)

La mayoría de los casos en los que se encuentra involucrada una fuente continua requieren que se estudie el caso para el cual $t \to \infty$, dado que es en ese tiempo en el cual la concentración de la sustancia se estabiliza y alcanza su mayor valor, por lo cual su concentración se vuelve permanente y estable. Al evaluar la ecuación (5.1.2.1.6) para $t \to \infty$, tenemos:

$$\overline{c} = \frac{qe^{\left(\frac{xU}{2D_x}\right)}}{8\pi \left(D_x D_z x^2 + D_x D_y y^2 + D_x D_z z^2\right)^{1/2}} \exp\left[\left(\frac{x^2}{D_x} + \frac{y^2}{D_y} + \frac{z^2}{D_z}\right)\left(\frac{U^2}{4D_x} + k\right)\right]^{1/2}$$
(5.1.2.1.8)

Por otra parte, en general, se posee conocimiento sobre la caracterización de la fuente, tal como la concentración de la sustancia y el caudal con el cual entra en el medio, en consecuencia, resulta útil expresar q en función de esos parámetros. A tal efecto, se emplea la siguiente expresión:

$$q = \overline{c}_i Q \tag{5.1.2.1.9}$$

donde \overline{c}_i es la concentración promedio de la sustancia en la fuente, y Q el caudal de dicha fuente.

Cabe señalar que la ecuación (5.1.2.1.8) posee una serie de limitantes que deben ser consideradas en el momento de su aplicación, a saber:

- Al sustituir la expresión (5.1.2.1.9) en la ecuación (5.1.2.1.8), y posteriormente, evaluando la ecuación resultante para x=y=z=0, se determina que $\overline{c}/\overline{c}_i > 1$. Lo mismo sucede para puntos muy cercanos a la fuente. Razón por la cual, se establece como limitante para la aplicación de la expresión (5.1.2.1.8) valores pequeños de x, y y z;
- ✓ Por otra parte, para el caso de una fuente puntual continua ubicada sobre el límite o frontera de un cuerpo semi infinito (fondo de un cauce o canal, o justo bajo su superficie, por ejemplo), se encuentra que la concentración es el doble que la obtenida se obtiene al emplear la expresión (5.1.2.1.8). Para evitar esta disparidad, Sutton (1953) consideró el efecto de la cercanía de una superficie límite sobre una fuente elevada, una chimenea, usando el método de las imágenes que será presentado más adelante; y,
- \checkmark Además, la ecuación (5.1.2.1.8) establece que el pico de la concentración (y=z=0), en ausencia de decaimiento de la

sustancia (k=0), decrece a la razón de x^{-1} . Sin embargo, observaciones realizadas por Sutton (1953) sobre emisiones atmosféricas indican que el decrecimiento es más rápido, en el orden de $x^{-1,75}$.

A pesar de las limitantes antes señaladas, se considera que la ecuación (5.1.2.1.8) es una buena aproximación para el cálculo de la concentración permanente y estable para el caso de la fuente puntual continua que nos ocupa.

5.1.2.2 Solución Aproximada para Fuente Puntual Continua en Flujo Uniforme con turbulencia Homogénea y Anisotrópica, para la condición de concentración permanente y estable.

Una descarga continua de una fuente puntual en un flujo uniforme genera la forma de una pluma alargada. El transporte en la dirección del fluido se encuentra dominada por la advección, siendo despreciable el efecto de la difusión longitudinal. Por otra parte, el ensanchamiento que sufre la pluma al alejarse de la fuente se debe a la difusión transversal. Es por todo lo anteriormente expuesto que la ecuación de transporte gobernante (5.1.2.1.1) puede simplificarse asumiendo la siguiente forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = -\left(D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) - kC \qquad (5.1.2.2.1)$$

Si, adicionalmente, se asume la solución para la cual la concentración ha alcanzado la permanencia y estabilidad $(t \to \infty)$, el primer término diferencial correspondiente a la variación con respecto al tiempo tiende a cero $\left(\frac{\partial C}{\partial t} \to 0\right)$. Luego, la ecuación (5.1.2.2.1) puede expresarse como:

$$U\frac{\partial C}{\partial x} = -\left(D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) - kC$$
 (5.1.2.2.2)

Además, las sustituciones señaladas en las expresiones (5.1.2.1.5) pueden simplificarse de la siguiente manera:

$$a = \frac{x^2}{4D_x} [1 + a_1]$$

$$b = \frac{U^2}{4D_x} (1 + b_1)$$

$$\varsigma = (t - t')^{-1/2}$$
(5.1.2.2.3)

donde:

$$a_{I} = \frac{D_{x}y^{2}}{D_{y}x^{2}} + \frac{D_{x}z^{2}}{D_{z}x^{2}}; y,$$

$$b_{I} = \frac{4D_{x}k}{U^{2}}$$

Pero, en virtud que, como ya se indicó, la difusión en sentido longitudinal del flujo puede considerarse despreciable, los términos a_1 y b_1

pueden alcanzar valores muy inferiores a la unidad ($a_1 << 1$ y $b_1 << 1$), razón por la cual pueden determinarse los valores aproximados de \sqrt{a} y de \sqrt{b} por medias de la expansión binomial mediante las siguientes expresiones:

$$\sqrt{a} \approx \frac{x}{2\sqrt{D_x}} \left(1 + \frac{a_1}{2}\right)$$

$$\sqrt{b} \approx \frac{U}{2\sqrt{D_x}} \left(1 + \frac{b_1}{2}\right)$$
(5.1.2.2.4)

La aproximación para el momento en el cual la concentración es permanente y estable se consigue sustituyendo las expresiones (5.1.2.2.4) en la (5.1.2.1.7), y evaluando la ecuación resultante para $t \to \infty$. El resultado de estas operaciones es:

$$\overline{c} \cong \frac{q}{4\pi (D_y D_z)^{1/2}} \exp \left[\left(\frac{y^2}{D_y} + \frac{z^2}{D_z} \right) \frac{U}{4x} + \frac{kx}{U} \right]$$
(5.1.2.2.5)

5.1.2.3 Solución para Fuente Puntual Continua en Flujo Uniforme con turbulencia Homogénea e Isotrópica, para la condición de concentración permanente y estable.

Para encontrar la solución para este caso, asumiendo que no existe decaimiento de la sustancia, tomamos la expresión (5.1.2.2.2) re – escribiéndola para las nuevas condiciones:

$$dC = \frac{dm}{\left[4\pi(t-t')D\right]^{3/2}} \exp\left(\frac{\left(x-U(t-t')\right)^{2}+y^{2}+z^{2}}{4D(t-t')}\right) \quad (5.1.2.3.1)$$

Sabiendo que dm = qdt' por la ecuación (5.1.2.1.3), y a fin de calcular la concentración en un punto cualquiera a un tiempo t desde que se inició la entrada de la sustancia en el medio, se integra la expresión anterior:

$$dC = \frac{q}{8[\pi D]^{3/2}} e^{-\left(\frac{Ux}{2D}\right)} \int_{0}^{t} \exp\left(-\left(\frac{(x - U(t - t'))^{2} + y^{2} + z^{2}}{4D(t - t')}\right) \frac{dt'}{(t - t')^{3/2}}\right)$$
(5.1.2.3.2)

Con la finalidad de simplificar la expresión, pueden efectuarse los siguientes cambios de variables:

$$R^{2} = x^{2} + y^{2} + z^{2}$$

$$S = R \left(\sqrt{4D(t - t')} \right)$$
(5.1.2.3.3)

Al sustituir estos cambios en la expresión (5.1.1.4.2) se tiene:

$$C = \frac{4\sqrt{D}}{R} \int_{\frac{R}{\sqrt{4Dt}}}^{\infty} \exp\left[-\left(\varsigma^2 + \left(\frac{UR}{2D}\right)^2 \frac{1}{4\varsigma^2}\right) d\varsigma \right]$$
 (5.1.2.3.4)

Al integrar esta expresión y evaluarla para la condición en la cual la concentración se vuelve permanente y estable $(t \to \infty)$, se obtiene la siguiente ecuación:

$$C = \frac{q}{4\pi DR} \exp{-\left(\frac{U}{2D}(R - x)\right)}$$
 (5.1.2.3.5)

Todas las ecuaciones para fuentes puntuales halladas ofrecen resultados erróneos para los casos de fuentes ubicadas en medios con superficies limitantes, debido a que no consideran esta condición de borde. En el punto 6 se resolverá este caso mediante el método de las imágenes.

5.2. Fuente Lineal.

5.2.1. Fuente Lineal Instantánea.

La deducción para una fuente lineal se inicia asumiendo que puede descomponerse en la suma de los efectos de infinitas fuentes puntuales. Tómese por ejemplo una fuente lineal infinita ubicada sobre el eje z, tal y como se muestra en la figura N° 5.2.1.

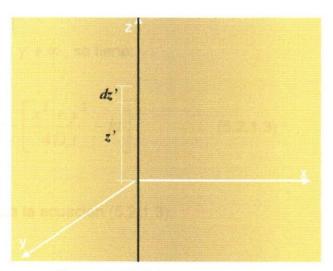


Figura N° 5.2.1: Fuente lineal

En el caso concreto que la fuente lineal tenga dimensión finita, puede sustituirse el valor de m' como la masa total entre la longitud total, es decir, la masa unitaria, llamada también masa por unidad de longitud.

Al evaluar la ecuación (5.2.1.4) para una sustancia conservativa, es decir para k=0, se concluye que la concentración de la sustancia decrece proporcionalmente a razón de t^{-1} . Sin embargo, observaciones de campo señalan que la disminución real se encuentra entre t^{-2} y t^{-3} , lo cual induce a pensar también que, posiblemente, el coeficiente de difusión D_r no es constante en todas las direcciones.

Esta divergencia condujo a diversos investigadores a realizar trabajos que pudieran dar respuesta al problema de una fuente lineal instantánea.

Todos los trabajos que se señalarán a continuación se realizaron expresando las ecuaciones en un sistema de coordenadas cilíndricas. Cada uno de los modelos empíricos generados por estos investigadores se desarrollaron asumiendo expresiones que pudieran representar la dependencia entre el tamaño y la edad de la mancha creada por la sustancia al difundirse en el medio.

Estas expresiones correspondientes a D_r se asumieron como funciones arbitrarias de r y t, y tomando como base la ecuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial t} \left[r D_{(r,t)} \frac{\partial C}{\partial r} \right] - kC$$
 (5.2.1.5)

siendo:

$$D_{(r,t)} = ar^m f(t)$$
 (Okubo, 1962)

donde:

a: constante dimensional.

La tabla N° 5.2.1.1 presenta los resultados de los modelos desarrollados por un grupo de investigadores para la difusión de una fuente lineal instantánea, asumiendo variaciones espaciales (r) y temporales (t) del coeficiente de difusión radial D_r , y una sustancia conservativa (k=0).

Al analizar los resultados obtenidos mediante la Ley de Fick y en las investigaciones por Joseph y Sedner y Ozmidov, se concluye que para cada uno de esos modelos el coeficiente D_r resulta independiente del tiempo, mientras que para los resultados de Pritchar y Harleman resulta independiente del espacio o posición del punto. A diferencia de los anteriores, el trabajo de investigación realizado por Okubo establece variaciones de D_r dependientes del tiempo y el espacio.

Por otra parte, se puede apreciar que la solución obtenida mediante la Ley de Fick, y los resultados de Pritchard y Harleman responden a una modelo Gaussiano, mientras que los demás no siguen dicho modelo.

Tabla N° 5.2.1.1: Soluciones analíticas para una fuente lineal instantánea, asumiendo variaciones espaciales y temporales del coeficiente de difusión radial D_r , y sustancia conservativa (k=0). (Fuente: Harleman, D., Transport Proceses in Environmental Engineering. Massachusetts Institute of Technology, Department of Civil Engineering. 1990. Página 2-38).

| Autor | Parámetros | | $D_{(r,t)}$ | Concentración | Distribución | Variación |
|--|------------|-------|---------------|---|--------------|---------------------|
| | m | f(t) | $\sim (r,t)$ | | Gaussiana | con respecto a t |
| Solución aplicando la Ley de Fick | 0 | 1 | a_0 | $C = \frac{m' \exp{-\left(\frac{r^2}{4a_0t}\right)}}{4\pi a_0t}$ | si | t ⁻¹ |
| Joseph y Sender (1958) | 1 | 1 | a_1r | $C = \frac{m' \exp{-\left(\frac{r}{a_1 t}\right)}}{2\pi a_1^2 t^2}$ | no | t ⁻² |
| Ozmidov (1968) | 4/3 | 1 | $a_2 r^{4/3}$ | $C = \frac{m' \exp{-\left(\frac{9r^{2/3}}{4a_2t}\right)}}{0,53\pi a_2^3 t^3}$ | no | t ⁻³ |
| Pritchard (1960) | 0 | t | a_3t^2 | $C = \frac{m' \exp{-\left(\frac{r^2}{2a_3t^2}\right)}}{2\pi a_3t^2}$ | Si | t^{-2} |
| Okubo (1962) | 2/3 | t | | $C = \frac{9m' \exp{-\left(\frac{9r^{\frac{4}{3}}}{8a_4t^2}\right)}}{8\pi^{\frac{3}{2}}a_4^{\frac{3}{2}}t^3}$ | no | t^{-3} |
| Harleman (1990) | 0 | t^2 | a_5t^3 | $C = \frac{3m' \exp{-\left(\frac{3r^2}{4a_5t^3}\right)}}{4\pi a_5t^3}$ | Si | t^{-3} |

5.2.2. Fuente Lineal Continua

5.2.2.1. <u>Fuente Lineal Continua en Flujo Uniforme con turbulencia</u> <u>Homogénea y Anisotrópica.</u>

Una fuente lineal continua puede ser la salida de un grupo de difusores en una descarga sub – acuática, un aliviadero descargando, o un grupo de chimeneas alineadas.

La ecuación diferencial gobernante para el caso de una fuente lineal ubicada sobre el eje z, y con un decaimiento que responden a una reacción de primer orden con una constante cinética k:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - kC$$
 (5.2.2.1.1)

La solución aproximada para una fuente lineal continua con una duración t_I , puede determinarse, como se hizo para el caso de la fuente puntual continua, sumando el efecto que producen infinitas fuentes lineales instantáneas que ocurren a iguales intervalos infinitesimales de tiempo.

En consecuencia la expresión diferencial para la concentración de la sustancia es:

$$dC = \frac{dm'}{4\pi(t-t')(D_xD_y)^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{4(t-t')} \left(\frac{(x-U(t-t'))^2}{D_x} + \frac{y^2}{D_y}\right) - k(t-t')\right]$$
(5.2.2.1.2)

donde D_i es el coeficiente de difusión en la dirección correspondiente.

Por otra parte tenemos que:

$$q' = \frac{dm'}{dt'} {(5.2.2.1.3)}$$

siendo q' la masa de sustancia por unidad de tiempo que entra en el medio por unidad de longitud.

Despejando de la ecuación (5.2.2.1.3) dm' en función del diferencial de t', y sustituyendo en la expresión (5.2.2.1.2), se puede determinar la concentración de la sustancia en un punto cualquiera del espacio, después de transcurrido un tiempo t, para el caso de una inyección continua de la sustancia en el medio, la cual se efectúa solamente con una duración t_l , siendo $t > t_l$. Esto se logra integrando la expresión (5.2.1.2.2) entre t = 0 y $t = t_l$.

La expresión correspondiente a dicha integral es:

$$C = \int_{0}^{t_{1}} \frac{q'}{4\pi(t-t')(D_{x}D_{y})^{\frac{1}{2}}} \exp\left[-\frac{1}{4(t-t')} \left(\frac{(x-U(t-t'))^{2}}{D_{x}} + \frac{y^{2}}{D_{y}}\right) - k(t-t')\right] dt'$$
(5.2.2.1.4)

La solución de esta integral es:

$$C = \frac{q'e^{\left(\frac{xu}{2D_x}\right)}}{4\pi\left(D_xD_y\right)^{1/2}}W\left(\alpha, \frac{\beta}{B}\right)$$
(5.2.2.1.5)

donde Wes:

$$W\left(\alpha, \frac{\beta}{B}\right) \approx \left(\frac{\pi B}{2\beta}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\left(\frac{\beta}{B}\right)} erfc\left(\frac{\frac{\beta}{B} - 2\alpha}{2\sqrt{\alpha}}\right)$$

siendo:

$$\alpha = \frac{x^2}{4D_x t} \left(1 + \frac{y^2 D_x}{x^2 D_y} \right)$$

$$\beta = x \left[\left(1 + \frac{y^2 D_x}{x^2 D_y} \right) \left(1 + \frac{4D_x k}{U^2} \right) \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$B = \frac{2D_x}{U}$$
(5.2.2.1.6)

La expresión indicada para W ofrece valores con un margen de error del 10% para $\frac{\beta}{B}$ = 1, disminuyendo el margen de error hasta 1% para $\frac{\beta}{B}$ = 10.

5.2.2.2. Solución Aproximada para Fuente Lineal Continua en Flujo Uniforme con turbulencia Homogénea y Anisotrópica, para la condición de concentración permanente y estable.

Tal como se indicó para la solución aproximada para una fuente puntual continua en las mismas condiciones del caso presente, se considera que la difusión de la velocidad del flujo resulta despreciable dado que el transporte en dicha dirección se encuentra dominado por el fenómeno advectivo, por tanto la ecuación diferencial (5.2.2.2.1) se transforma en:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - kC$$
 (5.2.2.2.1)

Si adicionalmente se asume la solución para la cual la concentración ha alcanzado la permanencia y estabilidad $(t \to \infty)$, el primer término diferencial correspondiente a la variación con

respecto al tiempo tiende a cero $\left(\frac{\partial C}{\partial t} \to 0\right)$. Luego, la ecuación (5.2.1.3.1) puede expresarse como:

$$U\frac{\partial C}{\partial x} = D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - kC$$
 (5.2.2.2.2)

Por otra parte, en virtud que, como ya se indicó, la difusión en sentido longitudinal del flujo puede considerarse despreciable, los términos dentro de las expresiones (5.2.2.1.6) que contienen el coeficiente D_x multiplicando pueden alcanzar valores muy inferiores a

la unidad (
$$\frac{y^2 D_x}{x^2 D_y}$$
 << 1 y $\frac{4 D_x k}{U^2}$ << 1).

Asimismo, dado que $(t \to \infty)$, al sustituir en la expresión (5.2.2.1.6) correspondiente a α , se tiene que $\alpha \to 0$.

En consecuencia, la solución aproximada para una fuente lineal continua ubicada sobre el eje z, en flujo uniforme, con turbulencia homogénea y anisotrópica, para la condición de concentración permanente y estable, cuando la sustancia tiene un decaimiento correspondiente a una reacción de primer orden con constante cinética k, es:

$$\overline{c} \cong \frac{q'}{(4\pi D_y x U)^{1/2}} \exp{-\left(\frac{y^2 U}{4x D_y} + \frac{xk}{U}\right)}$$
 (5.2.2.2.3)

Todas las ecuaciones para fuentes lineales halladas ofrecen resultados erróneos para los casos de fuentes lineales ubicadas en medios con superficies limitantes, debido a que no consideran esta condición de borde. Estos casos podrán resolverse empleando el método de las imágenes que se explica en el punto 6.

5.3. Fuente Plana.

5.3.1. Fuente Plana instantánea.

La deducción para una fuente plana se inicia asumiendo que puede descomponerse en la suma de los efectos de infinitas fuentes lineales. Tomemos por ejemplo una fuente plana infinita ubicada sobre el plano yz, tal y como se muestra en la figura N° 5.3.1.

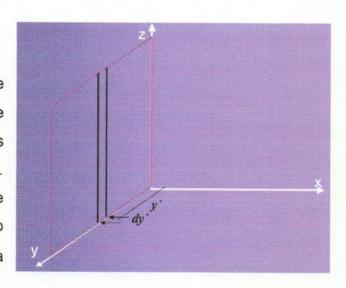


Figura N° 5.3.1: Fuente Plana

La masa infinitesimal instantánea dm', correspondiente a una fuente lineal paralela al eje z, puede expresarse de la siguiente manera:

$$dm' = m'' dy$$
 (5.3.1.1)

donde:

m": masa por unidad de área de la fuente.

En consecuencia, sustituyendo en la expresión (5.2.1.3), se tiene:

$$dC = \frac{m''dy'}{4\pi D_x t} \exp\left[\frac{x^2 + (y - y)^2}{4D_x t} + kt\right]$$
 (5.3.1.2)

donde $D_{\mathbf{x}}$ es el coeficiente de difusión en la dirección perpendicular a la fuente.

Al integrar la expresión anterior entre $-\infty$ y $+\infty$, se tiene:

$$C = \frac{m'}{4\pi D_x t} \exp{-\left(\frac{x^2}{4D_x t} + kt\right)}$$
 (5.3.1.4)

En la realidad es difícil encontrar un ejemplo correspondiente a una fuente plana de área infinita. Sin embargo, en los casos de descargas o emisiones que puedan asimilarse a fuentes planas, puede sustituirse el valor de m " como la masa total entre área de la fuente.

5.3.2. Fuente Plana Continua.

Una fuente plana continua puede estar representada por la descarga de un canal o, a mayor escala, por una zona industrial o ciudad sobre las que se asume que las emisiones tienen una distribución uniforme. La ecuación diferencial gobernante para el caso de una fuente plana ubicada sobre el plano yz, con un decaimiento que responde a una reacción de primer orden con una constante cinética k está representada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC$$
 (5.3.2.1)

La solución aproximada para una fuente plana continua con una duración t_I , puede determinarse, como se hizo para los casos de las fuentes puntual y lineal continuas, sumando el efecto que producen infinitas fuentes planas instantáneas que ocurren a iguales intervalos infinitesimales de tiempo.

En consecuencia la expresión diferencial para la concentración de la sustancia es:

$$dC = \frac{dm''}{\left(4\pi D_x(t-t')\right)^{\frac{1}{2}}} \exp\left[\left(\frac{\left(x-U(t-t')\right)^2}{4D_x(t-t')}\right) + k(t-t')\right]$$
(5.3.2.2)

Por otra parte tenemos que:

$$q'' = \frac{dm''}{dt'}$$
 (5.3.2.3)

siendo q " la masa de sustancia por unidad de área que entra en el medio en un tiempo infinitesimal dt.

Despejando de la ecuación (5.3.2.3) dm" en función del diferencial de t', y sustituyendo en la expresión (5.3.2.2), se puede determinar la concentración de la sustancia en un punto cualquiera del espacio, después de transcurrido un tiempo t, para el caso de una inyección continua de la sustancia en el medio, la cual se efectúa solamente con una duración t_I , siendo $t > t_I$, se logra integrando la expresión (5.3.2.2) entre t = 0 y $t = t_I$.

La expresión correspondiente a la integral es:

$$C = \int_{0}^{t_{1}} \frac{q''}{\left(4\pi D_{x}(t-t')\right)^{1/2}} \exp\left[\left(\frac{\left(x-U(t-t')\right)^{2}}{4D_{x}(t-t')}\right) + k(t-t')\right] dt'$$
(5.3.2.4)

La expresión (5.3.2.4) puede simplificarse efectuando las siguientes sustituciones:

$$a = \left(U^2 + 4kD_x\right)^{1/2}$$

$$b = \frac{ax}{4D_x}$$

$$\varsigma = a\left(\frac{t - t'}{4D_x}\right)^{-1/2}$$
(5.3.2.5)

Integrando la expresión resultante después de las sustituciones antes señaladas, se tiene:

$$C = \frac{q''e^{\left(\frac{xU}{2D_x}\right)}}{2a} \begin{cases} \left[erf\left(\frac{x+at}{(4D_xt)^{\frac{1}{2}}}\right) - erf\left(\frac{x+a(t-t_1)}{(4D_x(t-t_1))^{\frac{1}{2}}}\right) \right] \exp\left(\frac{xa}{2D_x}\right) \\ - \left[erf\left(\frac{x-at}{(4D_xt)^{\frac{1}{2}}}\right) - erf\left(\frac{x-a(t-t_1)}{(4D_x(t-t_1))^{\frac{1}{2}}}\right) \right] \exp\left(\frac{xa}{2D_x}\right) \end{cases}$$
(5.3.2.6)

Expresión válida para $t \ge t_1$.

En el caso de una inyección continua , es decir, para $t=t_1$, la ecuación (5.3.2.6) se convierte en:

$$C = \frac{q''e^{\left(\frac{xU}{2D_x}\right)}}{2a} \left\{ \left[erf\left(\frac{x+at}{\left(4D_xt\right)^{\frac{1}{2}}}\right) \mp 1 \right] \exp\left(\frac{xa}{2D_x}\right) - \left[erf\left(\frac{x-at}{\left(4D_xt\right)^{\frac{1}{2}}}\right) \mp 1 \right] \exp\left(\frac{xa}{2D_x}\right) \right\}$$
(5.3.2.7)

El signo menos se empleará para valores positivos de x, y el más para los negativos.

Tal y como ya se indicó la solución para la concentración permanente y estable se alcanza cuando $t \to \infty$. Evaluando la ecuación (5.3.2.7) para esta condición se tiene:

$$\overline{c} = \frac{q''}{a} \exp\left(\frac{x}{2D} \left(U \mp a\right)\right)$$
 (5.3.2.8)

Otra manera de expresar esta ecuación consiste en realizar una modificación de la variable sustituida a de la siguiente manera:

$$\left(1 + \frac{4D_x k}{U^2}\right)^{1/2} = a/U$$
(5.3.2.9)

que sustituido en la ecuación (5.3.2.8) se tiene:

$$\overline{c} = \frac{q''}{a} \exp\left(\frac{x}{2D} \left(1 \mp \frac{a}{U}\right)\right)$$
 (5.3.2.10)

Este cambio permite encontrar una solución aproximada para el caso de la concentración permanente y estable, pues como ya se asumió para las fuentes puntuales y lineales continuas, en este caso podemos afirmar que para $\frac{4D_xk}{U^2}\langle\langle 1 |$ la difusión en la dirección de la velocidad resulta insignificante predominando, en consecuencia, el fenómeno advectivo.

Adicionalmente, al evaluar la ecuación (5.3.2.10) para x = 0, se obtiene el valor de la concentración inicial de la fuente, es decir:

$$\overline{c}_0 = q''/U \tag{5.3.2.11}$$

Sin embargo, al sustituir valores positivos de x se observa que el resultado con respecto a la ecuación es diferente al que obtenemos al sustituir valores negativos.

Suponga por ejemplo la sustitución para valores positivos (x > 0), el resultado será:

$$\overline{c} \cong \overline{c}_0 \exp{-\left(\frac{xk}{U}\right)}$$
 (5.3.2.12)

La ecuación (5.3.2.12) responde a una ecuación gobernante de la forma:

$$U\frac{d\overline{c}}{dx} = -k\overline{c} \tag{5.3.2.13}$$

Esta ecuación indica que el fenómeno predominante en los puntos ubicados aguas abajo de la fuente (x > 0), es de tipo advectivo.

En el caso de que la sustitución se haga para un valor negativo (x < 0), la ecuación resultante es:

$$\overline{c} \cong \overline{c}_0 \exp\left(\frac{xU}{D_x}\right) \tag{5.3.2.14}$$

Que responde a una ecuación gobernante de la forma:

$$U\frac{d\overline{c}}{dx} = D_x \frac{d^2 \overline{c}}{dx^2}$$
 (5.3.2.13)

Esta ecuación indica que para x < 0 el fenómeno predominante es consecuencia de la advección y la difusión.

6. Planos Límites.

Múltiples son los casos en los cuales es necesario simular la presencia de uno o más planos límites como condición de borde.

Si se analiza el comportamiento de una chimenea descargando a la atmósfera. Inicialmente la pluma de la descarga se amplía, sin embargo, a cierta distancia del pie de la chimenea que dependerá de las condiciones de velocidad del viento y estabilidad de la atmósfera, la pluma tocará el nivel del suelo. A partir de este momento, la pluma no podrá ampliarse más en dicho sentido debido a la presencia de un plano límite que puede considerarse, de manera general, como "impermeable" a la sustancia. En consecuencia, no se producirá un fenómeno de transporte a través del suelo, o al menos no en las mismas condiciones que el que se lleva a cabo en la atmósfera.

En el caso expuesto, al realizarse los cálculos de la concentración con la ecuación correspondiente a una fuente puntual continua, se asume que en efecto se produce un fenómeno de transporte similar (igual coeficiente de difusión y velocidad) al de la atmósfera, lo cual no se ajusta a la realidad.

También podría ocurrir que además de la superficie del suelo exista una inversión térmica de la atmósfera que se constituya en otro plano límite, pero esta vez en la atmósfera, sobre la chimenea. Nuevamente, al analizar el comportamiento de la pluma se concluye que la misma queda atrapada en una especie de canal de ancho infinito, limitado en la parte inferior por el suelo y en la superior por la inversión térmica. Este tipo de situaciones no pueden ser resueltas directamente con las fórmulas halladas en el punto 5, pues conducirían a concentraciones inferiores a las que realmente ocurren.

En estos casos se recurre a un artificio matemático que permite simular la condición de borde originada por la presencia de planos límite. Este procedimiento consiste en generar fuentes virtuales o imágenes que compensen las diferencias generadas por la utilización de las fórmulas deducidas para medios infinitos.

6.1. Fuente con un plano límite.

La figura N° 6.1.1 representa una fuente puntual instantánea F ubicada en el punto de coordenadas (0,0,H), que descarga en un medio donde el plano xy es un plano límite que no permite el transporte de la sustancia descargada por la fuente.

La figura contiene la forma que adquiere la pluma a medida que se aleja de la fuente. Como puede apreciarse, parte de la pluma atraviesa el plano límite, lo cual implica que se estaría efectuado transporte a través de un medio que no lo permite.

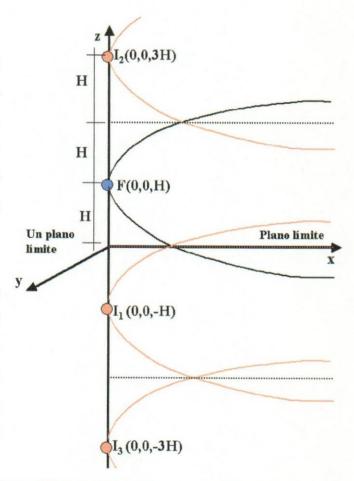


Figura N° 6.1.1: Fuente puntual instantánea en un medio con un plano límite.

Para compensar este volumen de la pluma "perdido" a través del plano xy, se genera una fuente o imagen, I_I , cuya pluma produce el volumen correspondiente sobre el plano límite, pero que, sin embargo, posee parte de su volumen por debajo del plano límite. Nuevamente, para compensar este volumen "perdido" por la pluma de I_I , se genera la fuente o imagen I_2 , la cual a su vez "pierde" parte de su pluma al superponerse con la generada por la fuente original.

En suma, cada imagen que se genera tendrá parte de su volumen detrás de un plano límite, razón por la cual requerirá de otra imagen adicional para compensarlo. Este proceso de colocar nuevas fuentes se repite hasta que la concentración aportada por la nueva imagen resulte insignificante frente al valor de la concentración total calculada.

La concentración total se obtiene mediante la sumatoria de las concentraciones generadas por la fuente inicial y sus imágenes, es decir:

$$C = \sum_{i=0}^{i} C_i \tag{6.1.1}$$

para i=0 correspondiente a la fuente original e i el número de fuentes generadas.

Resolviendo el ejemplo mostrado por la figura N°6.1.1, se tiene que la ecuación correspondiente a una fuente puntual instantánea es la (5.1.1.1.6):

$$C = \frac{m}{8(\pi D_m t)^{3/2}} e^{-\left(\frac{R^2}{4D_m t}\right)}$$
 (6.1.2)

donde:

$$R = \sqrt{(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2 + (z - z_1)^2}$$

Sustituyendo en R el valor de las coordenadas de cada una de las fuentes se tiene:

✓ Para la fuente original:
$$R = \sqrt{(x)^2 + (y)^2 + (z - H)^2}$$
;

✓ Para la imagen
$$I_1(0,0,-H)$$
: $R = \sqrt{(x)^2 + (y)^2 + (z+H)^2}$;

✓ Para la imagen
$$I_2(0,0,3H)$$
: $R = \sqrt{(x)^2 + (y)^2 + (z - 3H)^2}$; y,

✓ Para la imagen
$$I_3(0,0,3H)$$
: $R = \sqrt{(x)^2 + (y)^2 + (z+3H)^2}$

Introduciendo cada uno de los radios hallados en la ecuación de la concentración, y posteriormente efectuando la sumatoria correspondiente se tiene:

$$C = \frac{m}{8(\pi D_m t)^{3/2}} \left[\exp{-\left(\frac{\sqrt{(x)^2 + (y)^2 + (z - H)^2}}{4D_m t}\right)} + \exp{-\left(\frac{\sqrt{(x)^2 + (y)^2 + (z + H)^2}}{4D_m t}\right)} + \exp{-\left(\frac{\sqrt{(x)^2 + (y)^2 + (z - 3H)^2}}{4D_m t}\right)} + \exp{-\left(\frac{\sqrt{(x)^2 + (y)^2 + (z + 3H)^2}}{4D_m t}\right)} \right]$$

(6.1.3)

Este procedimiento puede emplearse para casos con más de un plano límite. También puede usarse para fuentes lineales y planas, sólo basta utilizar la fórmula correspondiente.

Bibliografía.

Bolinaga I., Juan José: Mecánica Elemental de los Fluidos. Fundación Polar – Universidad Católica Andrés Bello, Caracas, 1985.

Brown, T; LeMay, E, and Bursten, B.: Chemestry The Central Science. Seventh Edition, Prentice Hall, New Jersey, 1997.

Chow, V. T.; Maidment, D., y Mays L.: Hidrología Aplicada. Mc Graw Hill, Santa Fe de Bogotá, 1994.

Dobbins, R.: Atmospheric Motion and Polution. John Wiley and Sons, Inc., New York, 1979.

Fetter, C.W.: Aplied Hydrogeology. Third Edition, Prentice Hall, New Jersey, 1994.

Finlayson, **B. and Pitts**, **J.:** Atmospheric Chemistry: Fundamentals and Experimental Technicques. John Wiley and Sons, Inc., New York, 1986.

Harleman, D.: Transport Processes in Environmental Engineering. A series of notes to accompany lectures in Water Quality Control, Massachusetts Institute of Technology, 1990.

Hemond, H., and Fechner, E.: Chemical Fate and Transport in the Environment. Academic Press, San Diego, 1994.

Linsley, R.; Kohler, M. y Paulus, J.: Hidrología para Ingenieros. Segunda edición. Mc Graw Hill, Santa Fe de Bogotá, 1975.

Maidment, D.: Handbook of Hydrology. Mc Graw Hill, New York ,1993.

Maron, S., y Prutton, C.: Fundamentos de Fisicoquímica. Decimocuarta reimpresión. Editorial Limusa, México, 1984.

Metcalf and Eddy, Inc.: Ingeniería de Aguas Residuales, Volumen 2, Tratamiento, vertido y reutilización. Tercera Edición. Mc Graw Hill, España, 1991.

Streeter, V, y Wylie, B.: Mecánica de los Fluidos. Octava Edición. Mc Graw Hill, México, 1987.

Thibodeux, L.: Environmental Chemodynamics. John Wiley and Sons, Inc., New York, 1996.

Vennard, J, y Street , R.: Elementos de Mecánica de los Fluidos, Versión SI. Segunda Impresión. Compañía Editorial Continental, S.A. (CECSA), México, 1983.

Wark, K., y Warner, C.: Contaminación del Aire Origen y control. Limusa Noriega Editores, México, 1997.