



**UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN**

**“INTRODUCCION A LA INGENIERIA AMBIENTAL PARA  
LA INDUSTRIA DE PROCESOS”**

**DR. CLAUDIO ALFREDO ZAROR ZAROR**  
PROFESOR TITULAR  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA  
FACULTAD DE INGENIERÍA

**Concepción – Chile**

### 3.2.3) Modelos de Calidad de Agua

Es importante contar con herramientas de modelación que permitan predecir el efecto de las descargas de contaminantes sobre la calidad de las aguas receptoras.

Los contaminantes que se vierten en un cuerpo de agua se diluyen en el medio, a través de mecanismos convectivos y advectivos, reduciendo así su concentración. Mientras mayor sea el volumen dentro del cual se vierte el contaminante, menor será su concentración en éste una vez que se diluya. La capacidad de dilución de un río, lago, o mar, depende entre otros factores de las características de las corrientes acuáticas, de la velocidad y turbulencia de los cursos, de la morfología del cauce, etc.

Además de su simple dilución en el medio, los contaminantes vertidos pueden sufrir transformaciones físicas, químicas y biológicas complejas que tienen lugar en el agua:

- Algunos de estos compuestos pueden ser transferidos a los sedimentos o al aire por cambio de fase (por ejemplo, volatilización, precipitación, adsorción).
- Pueden sufrir cambios químicos, por ejemplo, por degradación biológica, o por fotooxidación o hidrólisis química.
- Algunos compuestos entran en la cadena alimenticia, pero no sufren degradación ni excreción y se pueden bioacumular en los diversos componentes biológicos. Tal es el caso de algunos metales y compuestos orgánicos recalcitrantes (ej.: DDT).

Existen modelos matemáticos para describir tales fenómenos con diferentes niveles de complejidad. Muchos de estos se encuentran disponibles en forma gratuita en los ficheros electrónicos de la Agencia de Protección Ambiental (EPA) norteamericana (ej.: QUAL2E).

En términos generales, la gran mayoría de los modelos utiliza balances de masa (dinámicos o en estado permanente) para establecer las relaciones matemáticas entre las diferentes variables. Normalmente, se requiere información acerca de las características físicas y químicas del cuerpo de agua y sus condiciones hidrodinámicas. En el caso de compuestos que se distribuyen en el aire, agua y sedimentos, se necesitan datos acerca de sus relaciones de equilibrio, solubilidades, presiones de vapor u otros.

En general, el balance de masa para una especie  $i$  considera los siguientes flujos:

$$\text{Entrada de } i - \text{Salida de } i - \text{Consumo de } i + \text{Generación de } i = \text{Acumulación de } i$$

La expresión para el consumo de  $i$  depende del fenómeno responsable de la desaparición del compuesto (degradación química o biológica, cambio de fase). Comúnmente, la velocidad de consumo de un compuesto,  $r_C$ , se aproxima a una cinética de primer orden:

$$r_C = -k[C]$$

donde  $[C]$  es la concentración de la especie en el medio y  $k$  es la constante cinética de primer orden. En el caso de aquellos contaminantes que se generan producto de la actividad en el medio acuático (por ejemplo, formación de bacterias), se utilizan expresiones de primer orden similares para describir su tasa de crecimiento (sin el signo negativo).

La Tabla 3.7 ilustra algunos valores de constantes cinéticas de primer orden para varios compuestos orgánicos de interés, debido a su alta toxicidad (a modo de referencia, se presentan los correspondientes valores para su descomposición en aire).

**TABLA 3.7: CONSTANTES CINÉTICAS PARA DEGRADACIÓN (1<sup>er</sup> ORDEN) DE COMPUESTOS ORGÁNICOS EN AGUA Y EN AIRE <sup>6</sup>**

COMPUESTOS ORGÁNICOS	$k$ Agua (día <sup>-1</sup> )	$k$ Aire (día <sup>-1</sup> )
Benceno	0,1-0,7	0,7
Benzopireno	2,5	0,1-0,7
Tetracloruro de carbono	0,002-2,3	$9 \cdot 10^{-5}$
Clordano	0,001	0,02
Cloroformo	0,02-2,3	0,01
DDT	0,001-0,01	-
Dicloroetano	0,1-0,7	0,02
Formaldehído	0,2-0,8	0,9
Heptacloro	0,7	0,02
Hexacloroetano	0,07-0,6	$9 \cdot 10^{-5}$
Bifenilos policlorados (PCB)	0,05-0,3	0,01
Dioxina (2,3,7,8 TCDD)	$9 \cdot 10^{-4} - 2 \cdot 10^{-3}$	-
Tricloroetano	0,1-4,9	$4 \cdot 10^{-4} - 9 \cdot 10^{-4}$
Tricloroetileno	0,008-0,7	0,2
Cloruro de vinilo	0,1-0,7	0,6

Los amplios rangos de variación en algunos casos reflejan diferentes condiciones ambientales de temperatura, luminosidad y biota existentes en el medio acuático.

<sup>6</sup> Adaptado de Masters G.M., "Introduction to environmental engineering and science", 2<sup>a</sup> ed., Prentice-Hall International Editions, London, 1998

Para el caso de un río de morfología sencilla, es común utilizar un modelo simple donde se supone un flujo pistón. En el caso de una descarga puntual y continua, la solución en estado estacionario permite obtener el perfil axial de concentración, aguas abajo de la descarga:

$$[C] = [C]_0 e^{-kx/v}$$

Donde:

- [C] = concentración de contaminante disuelto en el río, x (m) aguas abajo de la descarga (mg/l)  
 [C]<sub>0</sub> = concentración de contaminante disuelto en el río, en el punto de descarga, considerando que el vertido se mezcla instantáneamente con el río (mg/l)  
 k = constante cinética de 1<sup>er</sup> orden para el consumo de contaminante (día<sup>-1</sup>)  
 x = distancia desde el punto de descarga, en dirección aguas abajo (m)  
 v = velocidad media del río (m/s)

En el caso de las descargas de material orgánico biodegradable, interesa predecir su efecto sobre la concentración de oxígeno disuelto. Uno de los primeros modelos para predecir tal efecto en los cuerpos fluviales fue presentado por Streeter y Phelps en 1925. Dicho modelo considera el río como un reactor de flujo pistón, y establece un balance para el oxígeno disuelto y el material biodegradable, bajo condiciones de estado estacionario. En el caso del balance de oxígeno, se incluye la entrada de oxígeno por transferencia desde el aire, también expresada por un modelo de primer orden. En versiones posteriores, se toma en cuenta, además, el aporte de oxígeno por vía fotosintética. La solución analítica del modelo de Streeter y Phelps para una descarga puntual y continua, permite estimar la concentración de oxígeno disuelto a lo largo de un río:

$$[O_2] = [O_2]_{SAT} - \frac{k_D [C]_0}{k_A - k_D} \left( e^{-(k_D x/v)} - e^{-(k_A x/v)} \right) - ([O_2]_{SAT} - [O_2]_0) e^{-(k_A x/v)}$$

donde:

- [O<sub>2</sub>] = concentración de oxígeno disuelto en el río a x (m) aguas abajo de la descarga (mg/l),  
 [O<sub>2</sub>]<sub>0</sub> = concentración de oxígeno disuelto en el río, inmediatamente aguas arriba de la descarga (mg/l)  
 [O<sub>2</sub>]<sub>SAT</sub> = concentración de saturación de oxígeno disuelto en el río, a la temperatura media del agua (mg/l)  
 [C]<sub>0</sub> = concentración de material orgánico disuelto en el río, en el punto de descarga, considerando que el vertido se mezcla instantáneamente con el río. Está expresada como Demanda Biológica de Oxígeno, DBO<sub>5</sub> (mg/l) (este concepto se explica en detalle en la sección 6.2.2)  
 k<sub>A</sub> = constante cinética de primer orden para la transferencia de oxígeno desde el aire (aireación) (día<sup>-1</sup>)  
 k<sub>D</sub> = constante cinética de primer orden para el consumo de oxígeno por

acción metabólica ( $\text{día}^{-1}$ )

Como resultado de los fenómenos de consumo biológico de oxígeno y reposición física de éste, se presenta un perfil axial típico de concentración de oxígeno disuelto aguas debajo de una descarga de material orgánico biodegradable (ver la Figura siguiente):

- Inicialmente, la alta demanda biológica de oxígeno impuesta por la descarga de material orgánico tiende a reducir la concentración de oxígeno disuelto en el río. Si dicho efecto es mayor que la velocidad de aireación del río, la concentración de oxígeno disuelto disminuirá sostenidamente.
- La ecuación de Streeter y Phelps demuestra que la concentración de material orgánico disuelto disminuye gradualmente a medida que nos alejamos del punto de descarga, lo que implica también una reducción de la velocidad de consumo de oxígeno.
- Cuando la velocidad de consumo de oxígeno alcanza el mismo nivel que la velocidad de aireación del río, la concentración de oxígeno disuelto llega a su valor mínimo, y comenzará a aumentar gradualmente a partir de dicho punto crítico.
- Aguas abajo del punto crítico, la velocidad de consumo de oxígeno es menor que la velocidad de aireación y, eventualmente, la concentración de oxígeno disuelto en el río alcanzará su valor de saturación.

El punto de máximo impacto,  $x^*$ , donde se constata la concentración de oxígeno disuelto mínima en el río,  $[O_2]_{MIN}$ , debido a la descarga de material orgánico, se puede estimar en base a:

$$x^* = \frac{v}{k_A - k_D} \ln \left\{ \frac{k_A}{k_D} \left[ 1 - \frac{([O_2]_{SAT} - [O_2]_0)(k_A - k_D)}{k_D [C]_0} \right] \right\}$$

La concentración mínima de oxígeno disuelto debido a la descarga se obtiene reemplazando el valor de  $x^*$  en la ecuación de Streeter-Phelps

A pesar de ser un modelo muy simplificado, permite obtener resultados que pueden ser utilizados como una primera aproximación en la predicción del impacto causado por una descarga de material orgánico.

La constante cinética de primer orden para la degradación biológica del material orgánico disuelto,  $k_D$ , está dentro del rango 0,1 - 0,7 ( $\text{día}^{-1}$ ), dependiendo del tipo de material orgánico, de las características de la biota bacteriana y de la temperatura del agua.

Por su parte, la constante de aireación,  $k_A$ , depende de las características del sistema hídrico y de la temperatura. Esta constante es mayor en aquellos ríos que presentan una alta velocidad y gran turbulencia superficial. Algunos valores típicos obtenidos de literatura se presentan en la Tabla 3.8:

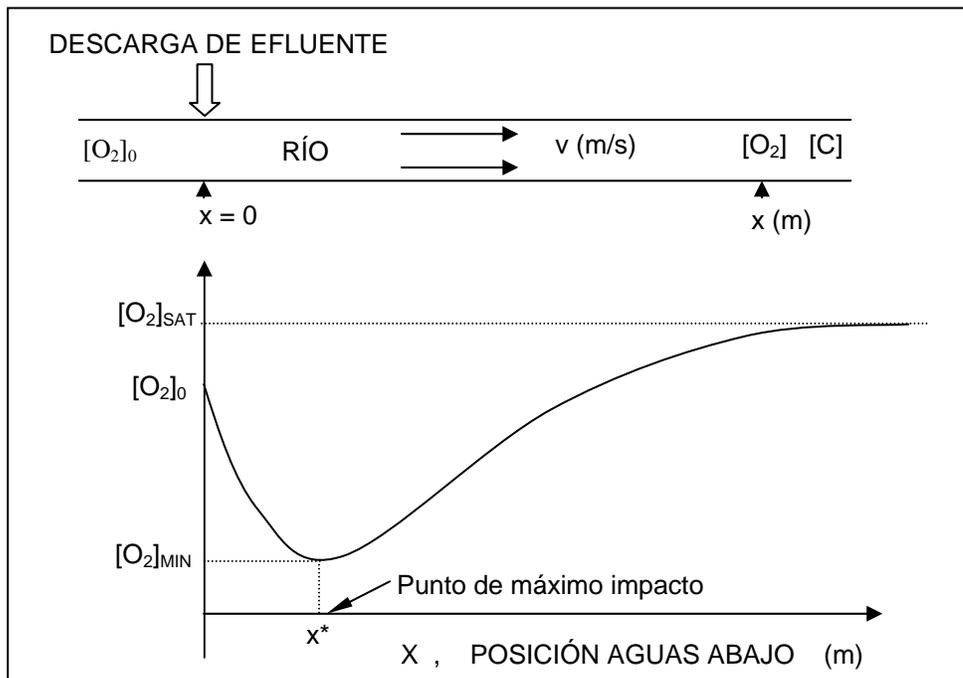
**TABLA 3.8: CONSTANTES DE AIREACIÓN (1<sup>er</sup> ORDEN) PARA DISTINTOS CUERPOS DE AGUA.**

TIPO DE CUERPO DE AGUA	CONSTANTE DE AIREACION, DE 1 <sup>er</sup> ORDEN, $k_A$ (día <sup>-1</sup> )
Lagunas	0,1-0,2
Lagos de mayor tamaño	0,2-0,3
Ríos de baja velocidad	0,3-0,5
Ríos con velocidad normal	0,5-0,7
Ríos rápidos y con caídas de agua	0,7-1,5

Existen varios modelos para predecir la constante de aireación,  $k_A$ . Se puede utilizar la fórmula de O'Connor y Dobbins :

$$k_A = \frac{3,9v^{1/2}}{p^{3/2}}$$

donde  $p$  es la profundidad media del río en (m),  $v$  es la velocidad media en (m/s) y  $k_A$  se expresa en (día<sup>-1</sup>) a 20°C.



**FIGURA 3.11: EFECTO DE UNA DESCARGA DE MATERIAL ORGÁNICO BIODEGRADABLE, SOBRE EL OXÍGENO DISUELTO EN UN RÍO.**