

Ecuación de advección-dispersión: un análisis en modelos de contaminación de sistemas fluviales a causa de la minería



Edwin Andrés Bolaños de la Cruz

Universidad del Cauca

Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y de la Educación

Programa de Matemáticas

Popayán

2022

Ecuación de advección-dispersión: un análisis en modelos de contaminación de sistemas fluviales a causa de la minería

Trabajo de Grado en modalidad de seminario para optar al título
de Matemático

Edwin Andrés Bolaños de la Cruz

Directora

Dra. Aida Patricia González Nieva

Universidad del Cauca

Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y de la Educación

Programa de Matemáticas

Popayán

2022

Nota de aceptación

Directora: _____
Dra. Aida Patricia González N.

Jurado: _____
Mg. Wilson Enrique Murillo C.

Jurado: _____
Mg. Juan David Samboní C.

Lugar y fecha de sustentación: Popayán, 20 de octubre de 2022.

Agradecimientos

Día a día doy gracias a Dios por permitirme llevar esta maravillosa vida llena de bendiciones y obstáculos de los que obtengo una mejor versión de mi, es por eso que a él agradezco en primer lugar este gran logro que me enorgullece. A mi directora, por su compromiso y apoyo, especialmente en los momentos donde sentía el agotamiento que no me permitía avanzar en el desarrollo de este trabajo. A mis jurados, por sus aportes para hacer de este trabajo uno mejor. Gracias por acompañarme en esta etapa final de mi carrera, fueron muy importantes para cumplir este sueño de ser Matemático. A mi madre Angélica, por respaldarme como siempre lo ha hecho en todas las etapas de este proceso. A mi esposa Johana, por haber sentido mis angustias y alegrías. Gracias a ustedes dos por ese amor tan bonito con el que me levantaban cuando estaba agobiado y con el que me acompañaban cuando disfrutaba de esta etapa. A mis amigos y compañeros, con quienes gozaba de su compañía preparando temas de estudio. A todos mis profesores que me formaron académicamente y que me brindaron su amistad dentro y fuera de la institución. ¡Gracias!

Índice general

1. Introducción	6
2. Contaminación real de un sistema fluvial	8
3. Preliminares	9
4. Marco teórico y antecedentes	13
4.1. Contaminación ambiental	13
4.2. Minería	13
4.3. Problemas de mezclas	14
4.4. Mecánica de fluidos ambiental	15
4.4.1. Transporte	15
4.4.2. Difusión	15
4.4.3. Primera ley de Fick	15
4.4.4. Ecuación de difusión	19
4.4.5. Coeficientes de difusión	22
4.4.6. Advección	22
4.4.7. Ecuación de advección-difusión	22
4.4.8. Difusión turbulenta	27
4.4.9. Ecuación de advección-difusión turbulenta	30
4.4.10. Dispersión longitudinal	34
4.4.11. Ecuación de advección-dispersión	36
4.4.12. Aplicación de la ecuación de advección-dispersión en sistemas fluviales	45
4.4.13. Condiciones para la aplicación del modelo	45
4.4.14. Caso ideal para la aplicación del modelo	46
4.4.15. Coeficientes de difusión turbulenta en ríos	46
4.4.16. Transformación	50
4.4.17. Reacciones de orden cero, de primer orden y segundo orden .	51
4.4.18. Incorporación de una reacción homogénea a la ecuación de advección-dispersión.	52

ÍNDICE GENERAL

4

5. Conclusiones

55

Índice de figuras

4.1. Esquema del movimiento molecular Browniano unidimensional de un grupo de partículas para ilustrar el modelo de difusión Fickiano.	16
4.2. Volumen de control diferencial para la deducción de la ecuación de difusión	19
4.3. Volumen de control diferencial para la deducción de la ecuación de advección difusión	23
4.4. Bocetos de Reynolds (1883) que muestran flujo laminar y turbulento	27
4.5. Medición esquemática de la velocidad fluctuante turbulenta	29
4.6. Esquema que muestra el proceso de dispersión longitudinal.	35
4.7. Comparación de la descomposición de Reynolds para flujo turbulento y flujo de corte	37

Capítulo 1

Introducción

Después de que el mundo entero atravesara por una situación inesperada como una pandemia que se originó finales del año 2019 debido al virus del COVID-19, aumentó la popularidad de los modelos matemáticos por su importancia a la hora de analizar, predecir y tomar decisiones en una problemática real. Al mismo tiempo, han existido desde décadas atrás diferentes modelaciones matemáticas dedicadas a brindar soluciones a temas delicados como la contaminación de nuestro medio ambiente debido a los residuos que proceden de las diferentes actividades humanas.

Encontrar una problemática en general, no es complicado; pero una vez detectada, estudiar los fenómenos que se encuentran presentes en el problema se convierte en una tarea excesivamente compleja. Tener en cuenta todos los detalles es prácticamente imposible. Por tanto un modelo matemático restringe el campo de estudio apropiadamente, teniendo en cuenta las variables más representativas del fenómeno de tal forma que el problema sea tratable y que a la vez brinde resultados verídicos. La complejidad de un modelo será función de algunos factores, como ejemplo, la cantidad y tipo de los parámetros o variables. En general, a medida que más parámetros son incluidos en el modelo, este será más complejo. Además, algunos parámetros son más complicados de predecir que otros [14].

En particular, analizar la contaminación del agua podría reducirse a estudiar la concentración de sustancias o componentes nocivos en un determinado espacio y tiempo, lo cual depende de diversos principios. No podemos considerar que, en un lote de agua, la mezcla de esta con otras sustancias (contaminantes) sea siempre homogénea, es decir, la concentración de un contaminante puede variar dependiendo el lugar de donde sea extraído y el momento en el que se haga, lo anterior podría deberse a alguna corriente que haya en el fluido, la profundidad entre otros.

Un análisis de lo anterior se hace teniendo presente cómo la sustancia se desplaza de un punto a otro sobre el agua (advección) y por otro lado, cómo esta se

propaga tranquilamente con un movimiento aleatorio del agua (difusión) o también por diferencias de velocidades que se pueden presentar en el fluido (dispersión). Estos fenómenos son modelados de manera independiente, pero para un estudio como el que estamos tratando requiere de un modelo que combina estos procesos. En particular la ecuación de advección-dispersión unidimensional dada por la expresión

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_L \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right)$$

donde \bar{u}_x es la velocidad de flujo promediada por área y D_L es un coeficiente de dispersión longitudinal; es la ecuación que mejor modela el fenómeno a tratar.

Este trabajo está enfocado a deducir y analizar el papel de la ecuación de advección-dispersión en modelos matemáticos dedicados al estudio de la contaminación en sistemas fluviales producto de la minería, en cuyos procesos, la descarga de sustancias tóxicas afecta tanto al ser humano por la contaminación creada en los ríos que abastecen diferentes localidades, como también al resto de los seres vivos, que no solo consumen el agua, sino que además habitan en ella.

Capítulo 2

Contaminación real de un sistema fluvial

La empresa Aurul, propiedad de la compañía Esmeralda Exploration y el gobierno Rumano, dedicada a la minería aurífera a cielo abierto, aparentemente fue responsable del desastre ambiental ocurrido el 30 de enero del año 2000 en la localidad de Bahía Mare, Rumania. Se estima un derrame de $100000m^3$ de aguas residuales, en gran medida contaminadas con cianuro y saturadas de metales provenientes de una instalación para el procesamiento de oro, sobre los afluentes Lapus y Somes del río Tisza.

Dicha responsabilidad esta basada en la alerta de parte de las autoridades del medio ambiente Rumano a la gerencia de la mina de Bahía Mare sobre el potencial riesgos asociados con la represa después de que ex empleados de la empresa revelaran que, durante la construcción del depósito de relaves, se habían cometido graves errores. Las paredes de la cuenca estaban hechas de tierra, que contenían altas cantidades de arena en lugar de materiales rocosos que la hacían inestable [8].

Por su parte, el Ministerio de Medio Ambiente Hungaro, afirmó el 14 de febrero que: “Además del daño ecológico, la contaminación por cianuro en el río Tisza significó también una importante amenaza para la salud humana, porque en la parte alta del Tisza la concentración de cianuro era 100 veces más que el valor límite para el agua potable” [8]. Es de saber que el cianuro además de ser tóxico, también es letal hasta en dosis pequeñas para humanos y otras especies.

Aunque no existen catástrofes de tal magnitud en otros países, es cierto que hay registros de minería en diferentes ubicaciones de estos, promoviendo el uso de sustancias nocivas en estas actividades, que perjudican al ser humano y otras especies. Por tratarse de componentes mortales en pequeñas cantidades, resalta la necesidad de analizar y tratar de predecir el comportamiento de estas mezclas generadas en los ríos, especialmente en los que abastecen a las poblaciones.

Capítulo 3

Preliminares

Polinomios de Taylor

Sea f una función con derivadas de orden k en un intervalo que contiene al punto a en su interior, con $k = 1, 2, 3, \dots, N$. Para cada $0 = 1, 2, 3, \dots, N$ el polinomio

$$P_n(x) := f(a) + f^{(1)}(a)(x-a) + f^{(2)}(a)\frac{(x-a)^2}{2!} + f^{(3)}(a)\frac{(x-a)^3}{3!} + \dots + f^{(n)}(a)\frac{(x-a)^n}{n!}$$

se llama polinomio de Taylor de f de orden n alrededor de a .

Para el caso $n = 1$, tenemos

$$P_1(x) = L(x) = f(a) + f'(a)(x-a),$$

que es una aproximación $f(x) \approx L(x)$ llamada aproximación lineal de f en el punto a . Cuando $(x-a)$ es pequeño,

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a)$$

es aproximadamente correcto [2].

Ecuaciones diferenciales Una ecuación diferencial es una ecuación que relaciona las derivadas de una función escalar que depende de una o más variables. Una ecuación diferencial es llamada **ordinaria** si la función depende solo de una variable. Por otro lado, se llama ecuación diferencial **parcial**, si la función depende de dos o más variables.

Ahora, una **solución** de una ecuación diferencial es una función que al reemplazar a la función incógnita, en cada caso con las derivaciones (ordinarias o parciales) correspondientes, verifica la ecuación.

Fluido Un fluido es un cuerpo que tiene la capacidad de fluir, careciendo de toda rigidez y elasticidad. Debido a estas características, cede inmediatamente ante cualquier fuerza que altere su forma, adoptando la forma del recipiente que lo contiene.

Flujo laminar y turbulento

El flujo se refiere al movimiento de un fluido. En el estudio de dicho movimiento se involucran las leyes del movimiento de la física, las propiedades del fluido y propiedades del medio ambiente o conducto por el cual fluyen.

Flujo laminar es aquel en el que el movimiento de las partículas tiene solamente el sentido y la dirección del movimiento principal del fluido. Se puede presentar en un conducto cerrado trabajando a presión (tubería) y también en un canal abierto.

Flujo turbulento es aquel en el que las partículas del fluido tienen desplazamiento en sentidos diferentes al del movimiento principal del fluido. se puede presentar en el mismo tipo de conductos al régimen laminar. El movimiento errático de las partículas en este tipo de flujo provoca colisiones entre ellas generando cambios en la cantidad de movimientos, que se manifiestan como una pérdida de energía.

La clasificación de flujos en laminar o turbulento se determina mediante el número de Reynolds

$$Re = \frac{uL}{\nu}$$

donde u y L representan una velocidad y escala de longitud, respectivamente, y ν es la viscosidad cinemática (medida de la resistencia interna de un fluido). En el caso de una tubería, el flujo turbulento ocurre cuando el número de Reynolds es más grande que 2000 [7].

principio de conservación de masa

Si no existen reacciones nucleares, el principio de conservación de masa se puede expresar como

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \sum \dot{m}_{in} - \sum \dot{m}_{out}$$

donde \dot{m} es el flujo másico [M/T], que indica la rapidez con que la masa atraviesa una frontera.

En un régimen estacionario, las propiedades del sistema no varían con el tiempo, tanto en su interior como en las fronteras del sistema, lo que se representa como

$$\frac{\partial M}{\partial t} = 0 \Rightarrow \sum \dot{m}_{in} = \sum \dot{m}_{out}$$

Ecuación de continuidad

Un sistema es un conjunto dado de partículas de fluido, donde su masa permanece fija.

Bajo las suposiciones generales de estado transitorio (hay una dependencia del sistema con respecto al tiempo); las componentes de la velocidad del fluido son diferentes de cero y la velocidad y densidad dependen del tiempo se deduce la identidad conocida como ecuación de conservación de masa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0,$$

donde ρ representa la densidad del fluido y v es la velocidad.

Estado transitorio y estacionario

Estado transitorio (no estacionario) es aquel estado de un sistema donde los valores de las variables involucradas en su estudio cambian a lo largo del tiempo, es decir, son dinámicas. Este cambio en las variables del sistema se debe a una acumulación de materia o energía.

Lo que cambia dentro del proceso transitorio, o sistema en estudio bajo régimen de estado transitorio, puede ser masa, energía, volumen, concentración, temperatura o cualquier otra variable que integre el sistema. Cabe destacar que el comportamiento debe ser el mismo a lo largo del tiempo de estudio y dicho comportamiento debe regirse y calcularse por las mismas leyes que definen el sistema. Así mismo, para poder realizar estos cálculos se requiere de una relación entre las variables que integran el sistema en estudio.

Como ejemplo consideremos un tanque con agua y una llave en la parte inferior de este. A partir del momento en que se permite la salida del agua se puede apreciar como la altura del nivel del líquido y el caudal a través de la llave varía con respecto al tiempo.

Estado estacionario, es aquel estado de un proceso o de un sistema en estudio en donde los parámetros a estudiar no varían a través del tiempo, es decir, no presentan cambios a medida que pasa el tiempo. Se concluye que todos los parámetros que describen el comportamiento del sistema en estudio son independientes del tiempo. podemos describir matemáticamente el estado estacionario, donde las

propiedades del sistema a estudiar no varían a o largo del tiempo con la expresión

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0;$$

donde ρ es la variable estudiada y t es el tiempo.

El ejemplo para el estado estacionario, sería un tanque al cual ingresa la misma cantidad de agua que sale de este. De esta manera, tanto la altura como el caudal de salida permanecerán constantes en el tiempo.

Trazador: Cualquier sustancia conservativa (no transformadora) que se mueve exactamente con el fluido. Un trazador es usado para realizar estudios que permiten determinar el caudal y las propiedades de transporte de un río; en particular, la velocidad advectiva media y el coeficiente de dispersión longitudinal efectivo. Para estimar estas cantidades, se inyecta colorante aguas arriba, se mide la distribución de la concentración aguas abajo y comparamos los resultados con las soluciones analíticas. Los dos tipos principales de inyecciones de tinte son las inyecciones instantáneas y las inyecciones continuas.

Esfuerzo cortante (Fuerza de corte): Una fuerza ejercida de una capa de fluido a otra, debido a las diferencias en su velocidad, que tiende a tirar, empujar, comprimir o torcer el cuerpo del fluido.

Capítulo 4

Marco teórico y antecedentes

4.1. Contaminación ambiental

Se entiende por **contaminación ambiental**, la presencia de sustancias perjudiciales en el medio ambiente que pueden ser de tipo químico, biológico o físico y que por su composición pueden causar daño a los seres vivos que lo habitan. La contaminación ambiental es clasificada en diferentes tipos, entre ellas, la contaminación atmosférica, contaminación hídrica, y contaminación de suelos.

4.2. Minería

Los **minerales** son compuestos que se han formado en nuestro planeta durante millones de años y que cuentan con características especiales que los hacen útiles para la fabricación de innumerables artículos que se utilizan en diferentes sectores, desde nuestro hogar hasta grandes industrias.

Una **mina** es el lugar donde se identifica que existe un mineral y se comienza un proceso de trabajo con mineros, máquinas y otros recursos para extraer el mineral, procesarlo y trabajarlo.

Finalmente, la **minería** es el conjunto de actividades que se llevan a cabo en un yacimiento para obtener recursos de una mina, a través de la explotación o extracción de los minerales acumulados en el suelo y subsuelo [11].

La minería es una de las actividades en la actualidad capaz de generar los tres tipos de contaminación mencionados. Los problemas causados incluyen la deforestación, el drenaje ácido de las minas, el ruido, el polvo, la contaminación del aire y el agua por arsénico, cianuro y mercurio, lo que se representa en conflictos

ambientales tales como la desorganización social, la pérdida de medios de vida y los desplazamientos masivos de la población [9].

El agua en los procesos de minería es indispensable por su uso en las diferentes etapas para obtener minerales: la exploración, la explotación y el cierre. Durante la fase de exploración minera se usa y contamina el agua en el proceso de perforación para sacar muestras de roca. Las aguas residuales de las perforaciones pueden ser drenadas directamente a los cuerpos de agua, pueden contaminar el suelo o lixiviar desde tanques de sedimentación [18]. El volumen de agua utilizada en estos procesos no es mínima. Por ejemplo, en el caso de la minería aurífera se estima que en promedio se usan $500m^3$ de agua para producir un kilogramo de oro [10].

Ahora, los químicos que se introducen en la extracción de minerales son de alto riesgo para el ser humano como el cianuro y el mercurio, que al cumplir su propósito en los procesos son drenados directamente junto con el agua utilizada a los ríos como en el caso de la minería ilegal. Por otra parte, aún tratándose de minería a gran escala ejercida por multinacionales, el agua trata de ser reciclada mediante relaves donde podrían ocurrir accidentes de fugas con estas sustancias que llegarán a los cuerpos de agua trayendo consecuencias. En cualquiera de los dos casos, los habitantes (incluyendo especies de animales) quienes se abastecen del líquido vital resultan afectados gravemente al consumir el fluido.

4.3. Problemas de mezclas

Los problemas de mezclas hacen referencia a situaciones donde dos o más sustancias son mezcladas juntas en uno o varios contenedores. Por ejemplo, una forma de tratar los relaves de minería es almacenándolos en un estanque, donde ingresa y sale agua junto con químicos que ayudan en el proceso. Este método permite que las partículas queden suspendidas en el agua o vayan hasta el fondo del estanque. Posteriormente, el agua puede ser tratada y reutilizada.

Para modelar la cantidad de químicos en el estanque del ejemplo anterior, por lo general se asume que el agua dentro del tanque esta en constante movimiento para obtener una **mezcla homogénea** con los químicos: lo que nos permite encontrar en cualquier punto del estanque con agua, la misma concentración de químicos. Así, el problema podría modelarse con una ecuación diferencial ordinaria de primer orden de tipo lineal o en el caso más sencillo con una ecuación diferencial ordinaria separable. Un análisis completo se encuentra en [16].

Por otro lado, al ingresar una sustancia en un cuerpo de agua como un río que posee un parámetro hidráulico como la velocidad, podremos presenciar una **mezcla no homogénea**, pues la concentración de la sustancia depositada dependerá del espacio y el tiempo que transcurre hasta el momento de tomar una muestra de la

mezcla. En este caso, el problema se vuelve más complicado e involucra ecuaciones diferenciales parciales a la hora de modelar.

4.4. Mecánica de fluidos ambiental

La mecánica de fluidos ambiental es el estudio de los procesos mecánicos de fluidos que afectan el destino y el transporte de sustancias a través de la hidrosfera y la atmósfera a escala local o regional. En términos más simples, la mecánica de fluidos ambiental estudia cómo los fluidos mueven sustancias a través del entorno natural a medida que también se transforman[15].

En la naturaleza existen procesos que cambian las concentraciones de una sustancia que se pueden clasificar en dos grupos: **transporte y transformación**.

4.4.1. Transporte

Se refiere a procesos que permiten el desplazamiento de las sustancia en un fluido los cuales se dividen en los fenómenos de **advección y difusión**.

4.4.2. Difusión

La difusión se refiere al movimiento de masa debido a la actividad o mezcla aleatoria del agua [4]. Por ejemplo, si depositamos una gota de tinta en agua limpia, dicho transporte provoca la extensión y dilución de la mancha de tinta en el tiempo con un movimiento neto insignificante de su centro de masa. Además de ser de naturaleza aleatoria también tiene la propiedad de que su transporte se da desde regiones de alta concentración a regiones de baja concentración, con un estado de equilibrio de concentración uniforme.

4.4.3. Primera ley de Fick

Trabajaremos ahora en la búsqueda de una expresión matemática para el flujo difusivo que permita predecir el proceso de expansión que ocurre desde lugares de alta concentración a lugares de baja concentración. Analizaremos con detalle los resultados expuestos en [15].

Consideremos inicialmente dos columnas paralelas de moléculas centradas en $x = 0$, tal como lo muestra la figura 4.1-(1). Cada una de estas moléculas se mueve de manera incierta en respuesta a la temperatura en un proceso aleatorio llamado movimiento Browniano. Con un propósito didáctico, consideramos únicamente el movimiento que puede realizar cada molécula hacia la derecha o izquierda; es decir, consideraremos el movimiento unidimensional a lo largo del eje x .

Procedemos a definir la masa de las partículas del lado izquierdo como M_l , similarmente para las partículas del lado derecho determinamos M_r . Ahora, por la aleatoriedad del movimiento existe una probabilidad de transferencia por unidad de tiempo en que una partícula se mueva a través de $x = 0$, definimos a esta tasa de transferencia como k , con unidades $[T^{-1}]$.

Dado que no existe una dirección preferencial de movimiento para las moléculas, luego de un tiempo δt , un promedio de la mitad de las partículas se han movido hacia la derecha y la otra mitad hacia la izquierda como se aprecia en la figura 4.1-(3). Observamos como las concentraciones máximas han disminuido, mientras que la región total que contiene a las partículas ha aumentado.

Matemáticamente, el flujo promedio de partículas de la columna izquierda hacia la derecha es kM_l y el flujo promedio de partículas de la columna derecha hacia la izquierda es $-kM_r$, donde el signo menos indica la dirección del movimiento (de derecha a izquierda). Por lo tanto el flujo neto de partículas q_x es

$$q_x = kM_l + (-kM_r) = k(M_l - M_r). \quad (4.1)$$

La concentración es la razón entre la masa de una sustancia M_i y el volumen total de la mezcla V y se expresa como

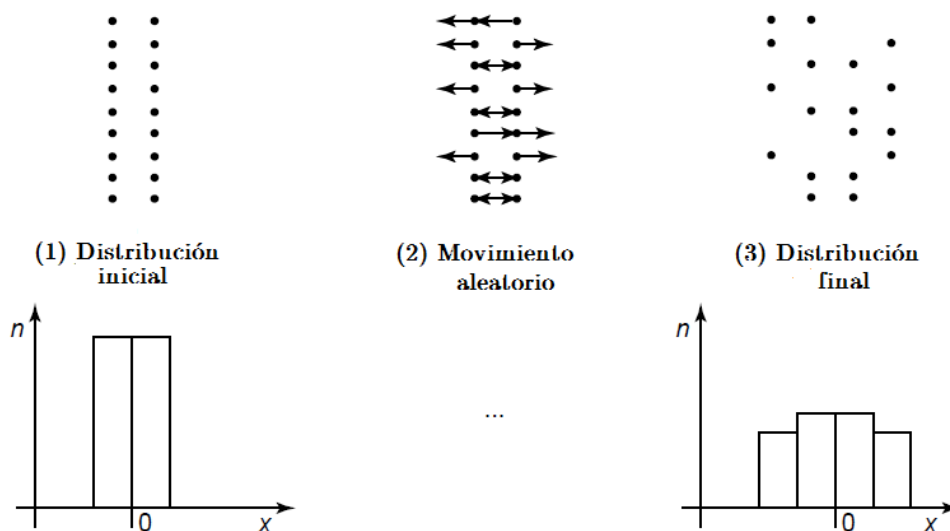


Figura 4.1: Esquema del movimiento molecular Browniano unidimensional de un grupo de partículas para ilustrar el modelo de difusión Fickiano. La parte inferior de la figura muestra el correspondiente histograma de la ubicación de las partículas, el cual es análogo a la concentración (Scott A. Socolofsky & Gerhard H. Jirka, 2005).

$$C = \frac{M_i}{V},$$

luego las unidades de la concentración son $[M/L^3]$.

Para el caso unidimensional escribimos la ecuación (4.1) en términos de las concentraciones como sigue

$$C_l = \frac{M_l}{\delta x \delta y \delta z}, \quad (4.2)$$

$$C_r = \frac{M_r}{\delta x \delta y \delta z}; \quad (4.3)$$

donde δx representa el ancho, δy indica el largo y δz es la altura de cada columna. Físicamente δx es la distancia promedio a lo largo del eje x tomada por una molécula en el tiempo δt .

El objetivo para q_x es representar el flujo en la dirección x por unidad de área perpendicular a x ; por lo tanto, es necesario que $\delta y \delta z = 1$.

Notemos que mediante la diferencia entre (4.3) y (4.2) obtenemos

$$\begin{aligned} C_r - C_l &= \frac{M_r - M_l}{\delta x \delta y \delta z} \\ &= \frac{M_r - M_l}{\delta x}. \end{aligned}$$

Por otro lado,

$$\frac{\Delta C}{\Delta x} = \frac{C_r - C_l}{x_r - x_l}$$

brinda una nueva expresión para $M_r - M_l$ como sigue

$$M_r - M_l = -\delta x (x_r - x_l) \frac{\Delta C}{\Delta x}. \quad (4.4)$$

Convirtiendo $\delta x = (x_r - x_l)$ y reemplazando (4.4) en (4.1) obtenemos

$$q_x = -k(\delta x)^2 \frac{\Delta C}{\Delta x}$$

y dado que la derivada de C con respecto a x es

$$\frac{dC}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta C}{\Delta x}$$

tenemos que

$$q_x = -k(\delta x)^2 \frac{dC}{dx}$$

La ecuación (4.4.3) contiene dos incógnitas k y δx , pero la probabilidad de transferencia es función del movimiento molecular, y también una función del tamaño de la caja, ya que cuanto más grande es la caja, menos moléculas están cerca del límite. Por supuesto, la tasa de transferencia de masa no debe depender de un tamaño de caja definido arbitrariamente, así que debemos asumir a $k(\delta x)^2$ como constante [7], a la cual llamaremos coeficiente de difusión. Finalmente, hemos obtenido una ecuación para el flujo difusivo unidimensional

$$q_x = -D \frac{dC}{dx}.$$

Como observación, el flujo es medido en una dirección, es decir, el flujo difusivo es una cantidad vectorial. Además, como se mencionó anteriormente, las unidades de medida para la concentración son $[M/L^3]$, mientras que para D son $[L^2/T]$, de ahí que el flujo difusivo tiene unidades $[M/TL^2]$.

Para calcular la tasa de flujo total de masa \dot{m} , en unidades $[M/T]$, el flujo difusivo debe ser integrado sobre un área de superficie. En el caso unidimensional se tiene que $\dot{m} = Aq_x$, donde $A = \delta y \delta z$.

Para generalizar a tres dimensiones, el vector de flujo difusivo en un punto se define agregando las otras dos dimensiones, obteniendo

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= -D \left(\frac{\partial C}{\partial x}, \frac{\partial C}{\partial y}, \frac{\partial C}{\partial z} \right) \\ &= -D \nabla C \\ &= -D \frac{\partial C}{\partial x_i}. \end{aligned}$$

De igual forma, para el caso tridimensional, si buscamos obtener la tasa de flujo total de masa debemos integrar la componente normal del vector \mathbf{q} sobre una superficie de área, es decir

$$\dot{m} = \iint_A \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dA$$

donde \mathbf{n} es el vector normal unitario a la superficie A .

La ecuación (4.4.3) es conocida como primera ley de Fick y los procesos de difusión que obedecen a esta relación se consideran de tipo Fickiano. Es de tener en cuenta que esta ley esta basada en el movimiento de los compuestos en un medio en condición de reposo.

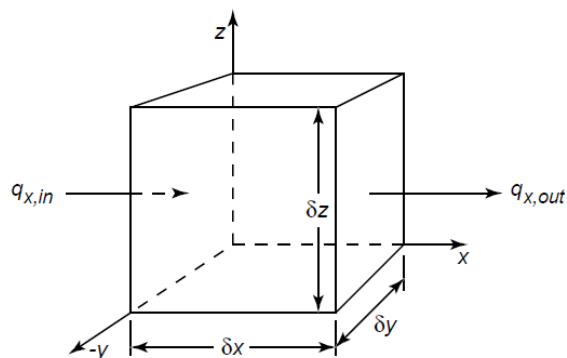


Figura 4.2: Volumen de control diferencial para la deducción de la ecuación de difusión (Scott A. Socolofsky & Gerhard H. Jirka, 2005).

4.4.4. Ecuación de difusión

Nótese que el flujo de masa debido al proceso de difusión expresado por la primera ley de Fick no considera el tiempo. En situaciones diferentes, es necesario ver como varía en el tiempo la concentración de la sustancia de un problema en otro punto situado a x metros de distancia.

Para deducir una ecuación que permita la predicción del cambio de la concentración en el transcurso del tiempo consideremos el volumen de control de la figura 4.2. De acuerdo a la ley de conservación de masa, la variación de la masa de una sustancia en el tiempo sobre nuestro volumen de control esta dado por

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \sum \dot{m}_{in} - \sum \dot{m}_{out} \quad (4.5)$$

donde \dot{m}_{in} es el flujo másico que indica la rapidez con que la masa de la sustancia ingresa al volumen de control, mientras que \dot{m}_{out} es el flujo másico que indica la rapidez con que la masa de la sustancia sale del volumen de control.

Gracias a la primera ley de Fick sabemos que el flujo difusivo de entrada en la dirección x es

$$q_{x,in} = -D \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_1,$$

mientras que el flujo difusivo de salida en la misma dirección es

$$q_{x,out} = -D \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_2.$$

Aquí las ubicaciones 1 y 2 representan respectivamente la frontera de entrada y salida de flujo del volumen de control.

Como se mencionó antes, para obtener el flujo de masa \dot{m} multiplicamos q_x por la superficie de área por donde ocurre el flujo. En este caso $A = \delta y \delta z$. Así, el flujo másico que ingresa al volumen de control es

$$\dot{m}_{in} = q_{x,in} A = -D \delta y \delta z \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_1,$$

de igual forma, el flujo másico que sale es

$$\dot{m}_{out} = q_{x,out} A = -D \delta y \delta z \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_2.$$

En consecuencia, el flujo neto es

$$\delta \dot{m}|_x = -D \delta y \delta z \left(\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_1 - \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_2 \right). \quad (4.6)$$

Buscamos simplificar esta expresión, y para ello buscaremos una expresión para $\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_2$ en términos de $\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_1$.

Recordemos que para una función f diferenciable en x_0 , tenemos la aproximación lineal

$$f(x) \approx L(x) = f(x_0) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_0} (x - x_0).$$

Obtendremos una igualdad aproximadamente correcta cuando $(x - x_0)$ tienda a cero [2]. Haremos un abuso de notación al emplear el símbolo de igualdad como en [15].

Reemplazando a $\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_2$ por $f(x)$ tenemos que

$$\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_2 = \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_1 + \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_1 \left(\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_1 \right) \delta x,$$

donde δx representa la distancia entre los puntos que se encuentran entre las fronteras de entrada y de salida de flujo.

Regresando a (4.6)

$$\begin{aligned} \delta \dot{m}|_x &= -D \delta y \delta z \left(\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_1 - \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_1 - \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_1 \left(\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_1 \right) \right) \delta x \\ &= D \delta y \delta z \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \delta x, \end{aligned}$$

lo cual es la contribución para el lado derecho de (4.5) en la dirección x .

Con el mismo análisis encontramos el flujo a través del volumen de control en las direcciones y y z , obteniendo

$$\delta\dot{m}|_y = D\delta x\delta z \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \delta y$$

$$\delta\dot{m}|_z = D\delta x\delta y \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \delta z.$$

Dado que $C = M/V$, expresamos $M = C(\delta x\delta y\delta z)$, así

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(C(\delta x\delta y\delta z)) = \delta x\delta y\delta z \frac{\partial C}{\partial t}.$$

aplicando esto, junto con el flujo neto de masa

$$\delta\dot{m} = \delta\dot{m}|_x + \delta\dot{m}|_y + \delta\dot{m}|_z$$

en la ecuación (4.5) obtenemos

$$\delta x\delta y\delta z \frac{\partial C}{\partial t} = D\delta x\delta y\delta z \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)$$

lo que finalmente nos brinda la ecuación de difusión tridimensional

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} &= D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \\ &= D\nabla^2 C \\ &= D \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2} \end{aligned}$$

En el caso unidimensional, los gradientes de concentración en las direcciones de z e y son cero, y tenemos la ecuación de difusión unidimensional

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}. \quad (4.7)$$

Vale la pena recordar que el calor se conduce desde fuentes calientes hacia regiones mas frías, esta razón es precisa para identificar que (4.7) es la misma ecuación de calor, donde D es reemplazado por el coeficiente de transferencia de calor k . Esto resulta ser útil, pues hay muchas soluciones conocidas de la ecuación de calor, además de información.

4.4.5. Coeficientes de difusión

El parámetro D con unidades $[L^2/T]$ recibe el nombre de coeficiente de difusión molecular, pues la primera ley de Fick se deriva para moléculas que responden a un movimiento Browniano (se mueve aleatoriamente en respuesta a la temperatura). Por lo tanto, D depende de la fase (sólida, líquida o gaseosa), la temperatura y el tamaño de la molécula. Para solutos diluidos en agua, D es generalmente de orden $2 \cdot 10^{-9} m^2/s$; mientras que, para los gases dispersos en el aire, D es de orden $2 \cdot 10^{-5} m^2/s$, una diferencia de magnitud de 10^4 [15].

4.4.6. Advección

La advección es el desplazamiento de una sustancia en un fluido (agua o aire) que es resultado del flujo unidireccional y que no cambia la identidad de la sustancia al ser transportada. El fluido se describe matemáticamente para tales procesos como un campo vectorial, y el material transportado como una concentración escalar de sustancia, que está presente en el fluido [6]. En nuestro contexto, el transporte de contaminantes en un río es un buen ejemplo de advección: los diferentes tipos de movimiento presentes en el río permiten el desplazamiento de cualquier sustancia.

En la siguiente sección mencionaremos la expresión matemática que describe el transporte por advección.

4.4.7. Ecuación de advección-difusión

Conociendo un poco sobre los fenómenos de transporte, difusión y advección, es natural pensar que en un espacio como un río, estos se presentan de manera simultánea provocando una mezcla más eficiente. La ecuación de advección-difusión que deduciremos a continuación, representa la variación de un contaminante teniendo en cuenta el transporte de este, considerando ambos fenómenos.

El principio de superposición permite la deducción de la ecuación de advección-difusión dado que los procesos de advección y difusión son independientes. Por un lado, la difusión es un proceso aleatorio debido al movimiento molecular; por este fenómeno, cada molécula en el tiempo δt se moverá ya sea un paso a la izquierda o un paso a la derecha ($\pm \delta x$). Debido a la advección, si la velocidad del fluido es u , cada molécula también se moverá $u \delta t$ en la dirección del flujo cruzado. Estos procesos son claramente aditivos e independientes; la presencia del flujo cruzado no sesga la probabilidad de que la molécula dé un paso difusivo hacia la derecha o hacia la izquierda, simplemente agrega algo a ese paso [15].

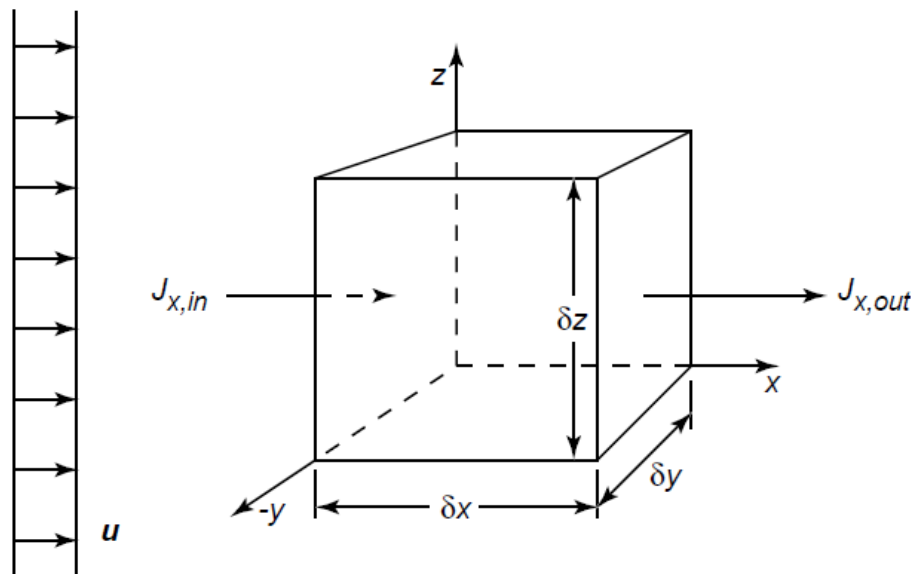


Figura 4.3: Volumen de control diferencial para la deducción de la ecuación de advección difusión (Scott A. Socolofsky & Gerhard H. Jirka, 2005).

Para deducir la ecuación de advección difusión asumiremos que estamos trabajando con la difusión molecular en un flujo laminar, de tal forma que el coeficiente de difusión tiene un valor constante D . Supongamos además que el fluido se mueve con una velocidad \mathbf{u} , cuyas componentes en las direcciones x, y, z son u, v, w respectivamente.

Dado que los procesos de advección y difusión son aditivos, como lo analizamos al inicio de la sección, entonces esperamos que el flujo total en la dirección x que denotaremos como J_x debido a estos dos fenómenos de transporte, se exprese como la suma de dos términos: uno asociado a la advección y otro determinado por la difusión que como ya sabemos es q_x .

La tasa de transporte de masa a través de una unidad de área en el plano yz por el componente de velocidad en la dirección x es la cantidad uC . Si analizamos las unidades de esta expresión, vemos que son idénticas a las de un flujo de masa por difusión [M/TL^2]; lo que permite deducir que el término uC también describe la masa que fluye a través de un área por unidad de tiempo. Así, la expresión que describe el flujo advectivo es en efecto uC . En consecuencia

$$\begin{aligned} J_x &= uC + q_x \\ &= uC - D \frac{\partial C}{\partial x}. \end{aligned}$$

Por el principio de conservación de masa, el flujo neto a través del volumen de control ilustrado en la figura 4.3 es

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \sum \dot{m}_{in} - \sum \dot{m}_{out} \quad (4.8)$$

donde \dot{m}_{in} es el flujo másico que indica la rapidez con que la masa de la sustancia ingresa al volumen de control, mientras que \dot{m}_{out} es el flujo másico que indica la rapidez con que la masa de la sustancia sale del volumen de control.

Para la dirección x tenemos

$$J_{x,in} = \left(uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_1$$

$$J_{x,out} = \left(uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_2.$$

Nuevamente

$$\dot{m}_{in} = J_{x,in}A = \left(uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_1 \delta y \delta z$$

$$\dot{m}_{out} = J_{x,out}A = \left(uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_2 \delta y \delta z,$$

de ahí que

$$\begin{aligned} \delta \dot{m}|_x &= \left(uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_1 \delta y \delta z - \left(uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_2 \delta y \delta z \\ &= (uC|_1 - uC|_2) \delta y \delta z + \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_2 - D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_1 \right) \delta y \delta z. \end{aligned}$$

Como ya lo hicimos antes, emplearemos aproximaciones lineales en esta oportunidad para $uC|_2$ y para $D(\partial C/\partial x)|_2$, pretendiendo simplificar más la anterior igualdad.

Para uC , una “aproximación” lineal mediante el polinomio de Taylor de orden uno es

$$uC|_2 = uC|_1 + \frac{\partial(uC)}{\partial x} \Big|_1 \delta x,$$

luego,

$$\begin{aligned} uC|_1 - uC|_2 &= uC|_1 - \left(uC|_1 + \frac{\partial(uC)}{\partial x} \Big|_1 \delta x \right) \\ &= -\frac{\partial(uC)}{\partial x} \delta x. \end{aligned}$$

Por otro lado,

$$D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_2 = D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_1 + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_1 \delta x,$$

luego,

$$\begin{aligned} D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_2 - D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_1 &= D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_1 + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_1 \delta x - D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_1 \\ &= D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \delta x, \end{aligned}$$

pues hemos asumido que D es constante en todas las direcciones.

Entonces para la dirección x tenemos que

$$\delta \dot{m} \Big|_x = \left(-\frac{\partial(uC)}{\partial x} \delta x \right) \delta y \delta z + \left(D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \delta x \right) \delta y \delta z$$

De manera similar deducimos $\delta \dot{m} \Big|_y$ y $\delta \dot{m} \Big|_z$ con sus respectivas componentes de velocidad v y w , obteniendo

$$\begin{aligned} \delta \dot{m} \Big|_y &= \left(-\frac{\partial(vC)}{\partial y} \delta y \right) \delta x \delta z + \left(D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \delta y \right) \delta x \delta z \\ \delta \dot{m} \Big|_z &= \left(-\frac{\partial(wC)}{\partial z} \delta z \right) \delta x \delta y + \left(D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \delta z \right) \delta x \delta y. \end{aligned}$$

Retomando y organizando nuestra ecuación inicial (4.8) tenemos

$$\begin{aligned} \sum \dot{m}_{in} - \sum \dot{m}_{out} &= \delta \dot{m} \Big|_x + \delta \dot{m} \Big|_y + \delta \dot{m} \Big|_z \\ &= \left(-\frac{\partial(uC)}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) \delta x \delta y \delta z \\ &\quad + \left(-\frac{\partial(vC)}{\partial y} + D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \delta x \delta y \delta z + \left(-\frac{\partial(wC)}{\partial z} + D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \delta x \delta y \delta z. \end{aligned}$$

Como antes, reescribimos la masa como $M = C \delta x \delta y \delta z$ obteniendo

$$\begin{aligned} \frac{\partial M}{\partial t} &= \frac{\partial C \delta x \delta y \delta z}{\partial t} \\ &= \delta x \delta y \delta z \frac{\partial C}{\partial t}, \end{aligned}$$

en consecuencia

$$\delta x \delta y \delta z \frac{\partial C}{\partial t} = \left[- \left(\frac{\partial u C}{\partial x} + \frac{\partial v C}{\partial y} + \frac{\partial w C}{\partial z} \right) + D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \right] \delta x \delta y \delta z.$$

Finalmente, dividiendo esta última igualdad por $\delta x \delta y \delta z$ y pasando el término advectivo al lado izquierdo obtenemos la ecuación de advección-difusión, que escrita de manera más compacta queda como

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u}C) = D\nabla^2 C \quad (4.9)$$

y en notación de Einstein

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u_i C}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2}$$

Note que hemos supuesto que D es constante, en caso contrario la ecuación tomará la forma

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u_i C}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right). \quad (4.10)$$

Existe una modificación de nuestra ecuación de advección-difusión en el término advectivo a causa de una característica que tienen algunos fluidos: incompresibilidad. Cuando esta propiedad se tiene, el fluido tendrá una densidad constante ρ en cualquier lugar y tiempo. En consecuencia, la ecuación de continuidad dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0$$

será igual a

$$0 + \rho \nabla(\mathbf{u}) = 0$$

que equivale a

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0. \quad (4.11)$$

Si se expande el término advectivo en (4.9) obtenemos

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}C) = (\nabla \cdot \mathbf{u})C + \mathbf{u} \cdot \nabla C \quad (4.12)$$

de (4.11) se tiene que

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}C) = \mathbf{u} \cdot \nabla C.$$

Por lo tanto, la ecuación de advección-difusión para un fluido incompresible es

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2}. \quad (4.13)$$

Esta observación acerca de la incompresibilidad de los fluidos se debe tener en cuenta, pues los líquidos son considerados como incompresibles, en particular el agua de los ríos por donde se transporta contaminantes.

Como habíamos acordado, mencionaremos ahora la expresión para el fenómeno de la advección, la cual extraemos de (4.9) bajo la suposición de que el transporte de una sustancia se debe expresamente al fenómeno de la advección (no está presente el fenómeno de difusión). Por lo tanto, la ecuación para la advección es

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u_i \frac{\partial C}{\partial x_i}$$

para el caso unidimensional, asumimos que la concentración del contaminante es homogénea en toda la sección transversal del río (lateral y verticalmente). Si usamos la ecuación de advección para calcular el transporte de una ola de contaminación corriente abajo en un río, la forma de la ola permanece sin cambios. En otras palabras, se asume un compuesto conservativo y un proceso donde no existe nada más que advección [17].

4.4.8. Difusión turbulenta

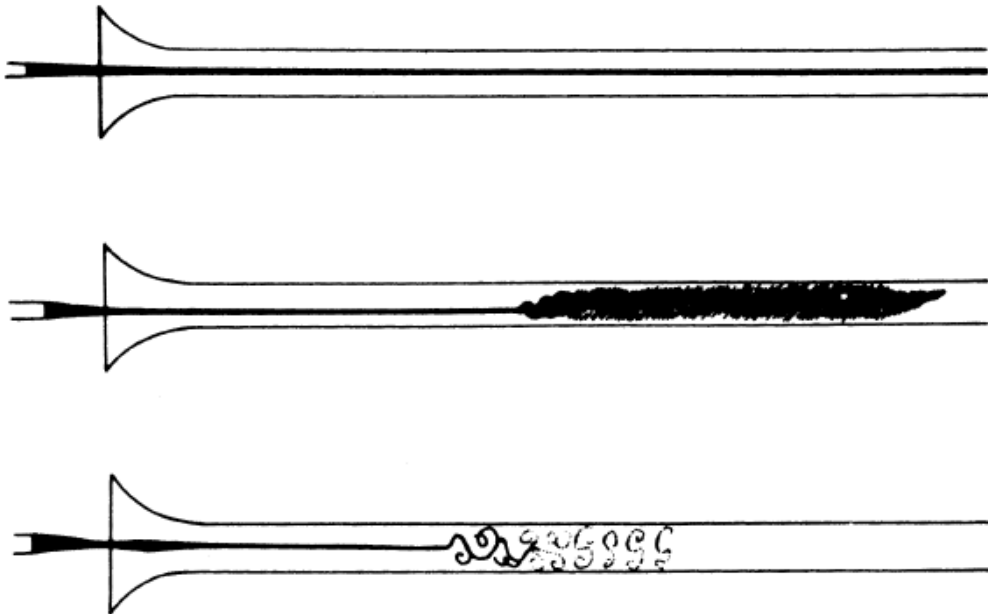


Figura 4.4: Bocetos de Reynolds (1883) que muestran flujo laminar (arriba), flujo turbulento (medio) y flujo turbulento iluminado con una chispa eléctrica (abajo). (Acheson (1990)).

En términos sencillos, nos referimos a la turbulencia como a unos movimientos irregulares y caóticos. Pese a que no se define fácilmente el movimiento turbulento en los fluidos, la turbulencia presenta algunas características que permiten detectarla.

En un flujo turbulento la masa introducida en un punto se propagará mucho más rápido que en flujo laminar. Una demostración clásica es el experimento de Reynolds sobre el transporte de rayas de tinte en el flujo de una tubería, ilustrado en la figura 4.4, en el que se introduce un filamento de tinte en la línea central en el extremo de una tubería.

El primer caso que describe, el de velocidades bajas, es el de flujo laminar: el fluido se mueve en capas paralelas a lo largo de líneas casi perfectas y las perturbaciones se amortiguan con la viscosidad. La única forma en que la línea de colorante puede extenderse lateralmente en el flujo laminar es mediante la acción de la difusión molecular; por lo tanto, se necesitaría una tubería mucho más larga antes de que la difusión molecular pudiera dispersar el tinte uniformemente a través de la sección transversal de la tubería [15].

El último caso, a velocidades más altas, es un flujo turbulento: el fluido se vuelve repentinamente inestable y se convierte en un espectro de remolinos, y estas perturbaciones aumentan debido a la inestabilidad. El tinte, que sigue más o menos el fluido de forma pasiva, se mezcla rápidamente a lo largo de la sección transversal a medida que los remolinos crecen y llenan el tubo con un flujo turbulento. Las observaciones con una chispa eléctrica indican que el tinte se adapta a la forma de los remolinos. Sin embargo, después de algún tiempo, los remolinos habrán crecido y se habrán roto suficientes veces como para que el tinte ya no tenga gradientes de concentración fuertes que delineen los remolinos: en ese punto, el tinte está bien mezclado y la mezcla es más o menos aleatoria (aunque todavía está controlado por remolinos discretos) [15].

Es importante mencionar que para abordar la turbulencia en esta parte del trabajo se considera una turbulencia de tipo homogénea, es decir, que las propiedades estadísticas del flujo son estables (invariantes), donde el flujo aún puede ser muy irregular. Estas propiedades estadísticas homogéneas generalmente se describen por las propiedades de la velocidad experimentada en un punto del espacio en el flujo turbulento (esta es una descripción Euleriana)[15].

La figura 4.5 muestra un ejemplo de una medición de velocidad turbulenta para un componente de velocidad en un punto. Si consideramos una pequeña parte de la medición de la velocidad, las velocidades están altamente correlacionadas y parecen deterministas. Si comparamos velocidades más separadas en la serie de tiempo, las velocidades se vuelven completamente descorrelacionadas y parecen aleatorias. La escala de tiempo en la que las velocidades comienzan a parecer no correlacionadas y aleatorias se llama escala de tiempo integral t_I . De acuerdo con

[13], t_I es lo suficientemente grande para eliminar toda dependencia en el tiempo de la velocidad promedio.

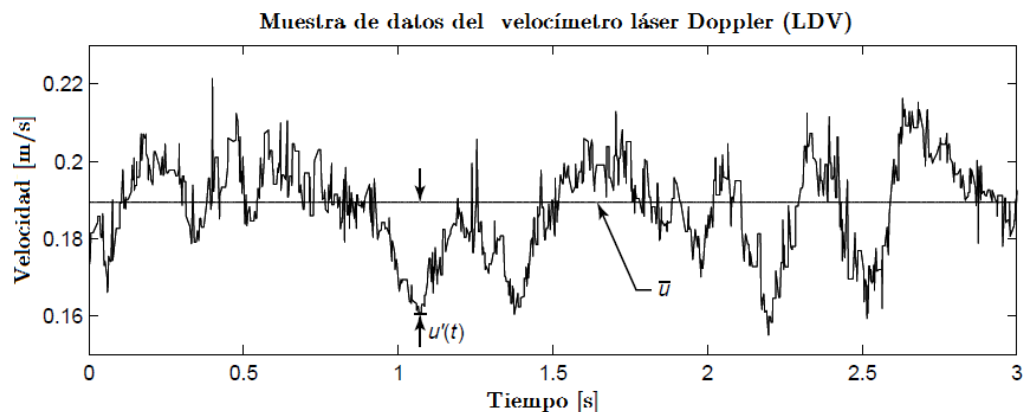


Figura 4.5: Medición esquemática de la velocidad fluctuante turbulenta en un punto que muestra la velocidad promedio \bar{u} y el componente fluctuante $u'(t)$. (Scott A. Socolofsky & Gerhard H. Jirka, 2005).

La naturaleza aleatoria de las variables que caracterizan el flujo turbulento conducen a abordar una teoría estocástica que permitan reducir el grado de complejidad a las situaciones encontradas en la turbulencia. Hasta la actualidad, en uno de los siete problemas del milenio se encuentran la ecuaciones de Navier-Stokes, las cuales describen el movimiento del fluido y mas aún, contiene posiblemente la información de la turbulencia; sin embargo no existen soluciones exactas para estas ecuaciones, por lo que debe tenerse algunas consideraciones para el estudio del flujo turbulento. Por esta razón se considera útil conocer cómo es el comportamiento de los valores medios del campo de velocidades como de otras variables que reflejan formas más suaves en sus variaciones y guían a una idea más general del flujo que sus cantidades instantáneas [12].

Reynolds sugirió que en algún tiempo mas grande que t_I , la velocidad en un punto x_i podría ser descompuesto en una velocidad media \bar{u}_i y una fluctuación u'_i tal que

$$u_i(x_i, t) = \bar{u}_i(x_i) + u'_{i(x_i, t)}$$

lo anterior es conocido como descomposición de Reynolds. t_I es entonces comparable al tiempo que se tarda \bar{u}_i en volverse estable (constante).

4.4.9. Ecuación de advección-difusión turbulenta

Al igual que la velocidad, la concentración de una sustancia también varía irregularmente en el tiempo y espacio en un flujo turbulento. En consecuencia, podemos considerar la descomposición de Reynolds para la concentración como sigue

$$C(x_i, t) = \bar{C}(x_i) + C'(x_i, t).$$

Nos interesará el comportamiento a largo plazo en comparación con t_I ; es decir, luego de que la velocidad sea estable. Entonces, luego de sustituir la descomposición de Reynolds en nuestra ecuación de advección-difusión, tomaremos también un tiempo promedio.

El operador promedio sobre una cantidad v es definido como

$$\bar{v} = \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} v d\tau.$$

Demostremos algunas propiedades que cumple este operador que usaremos para continuar con nuestra labor de deducir una ecuación de transporte que incluya el fenómeno de la turbulencia.

Sean u_i, u_j dos variables independientes. Entonces se cumple que

$$1. \quad \overline{\bar{u}_i} = \bar{u}_i \tag{4.14}$$

$$2. \quad \overline{u'_i} = 0 \tag{4.15}$$

$$3. \quad \overline{\bar{u}_i \bar{u}_j} = \overline{u_i u_j} \tag{4.16}$$

$$4. \quad \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x} = \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x} \tag{4.17}$$

$$5. \quad \overline{u_i + u_j} = \bar{u}_i + \bar{u}_j \tag{4.18}$$

$$6. \quad \overline{u'_i u'_j} \neq 0 \tag{4.19}$$

$$7. \quad \overline{u_i u_j} = \bar{u}_i \bar{u}_j + \overline{u'_i u'_j} \tag{4.20}$$

Demostración:

1. Por definición

$$\overline{u_i} = \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} \overline{u_i} d\tau.$$

Como $\overline{u_i}$ ya es constante en el tiempo t_I , se tiene que

$$\overline{\overline{u_i}} = \frac{\overline{u_i}}{t_I} \int_t^{t+t_I} d\tau = \frac{\overline{u_i}}{t_I} [(t + t_I) - t] = \overline{u_i}.$$

2. Por definición y aplicando la descomposición de Reynolds tenemos

$$\overline{u_i} = \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} u_i d\tau = \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} (\overline{u_i} + u'_i) d\tau = \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} \overline{u_i} d\tau + \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} u'_i d\tau.$$

El primer término del lado de la derecha es $\overline{u_i}$ por la primera propiedad (4.14), mientras que el último término es por definición $\overline{u'_i}$,

luego $\overline{u_i} = \overline{u_i} + \overline{u'_i}$, de ahí que, $\overline{u'_i} = 0$.

3. Por definición

$$\overline{\overline{u_i u_j}} = \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} \overline{u_i u_j} d\tau$$

como $\overline{u_i}$ ya es constante en el tiempo t_I

$$\overline{\overline{u_i u_j}} = \frac{\overline{u_i}}{t_I} \int_t^{t+t_I} u_j d\tau = \overline{u_i} \overline{u_j}.$$

4. Por definición

$$\overline{\frac{\partial u_i}{\partial x}} = \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} \frac{\partial u_i}{\partial x} d\tau.$$

Dado que t_I es constante, podemos reescribir la igualdad como

$$\overline{\frac{\partial u_i}{\partial x}} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} u_i d\tau \right) = \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x}$$

5. Partiendo de la definición

$$\overline{u_i + u_j} = \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} u_i + u_j d\tau,$$

basta con separar la integral para obtener lo deseado

$$\overline{u_i + u_j} = \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} u_i + u_j d\tau = \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} u_i d\tau + \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} u_j d\tau = \overline{u_i} + \overline{u_j}.$$

6. Suponiendo que $\overline{u'_i u'_j} = 0$, para el caso particular donde $u = v$ tendríamos que $\overline{u'_i u'_i} = \overline{u_i'^2}$, luego, no es posible considerar que el promedio de una cantidad no negativa sea cero. En consecuencia $\overline{u'_i u'_i} \neq 0$.
7. Mediante la descomposición de Reynolds podemos expresar al producto de $u_i u_j$ como

$$u_i u_j = (\overline{u_i} + u'_i)(\overline{u_j} + u'_j) = \overline{u_i} \overline{u_j} + \overline{u_i} u'_j + u'_i \overline{u_j} + u'_i u'_j.$$

Calculamos el promedio de los dos lados de la expresión para obtener

$$\frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} u_i u_j d\tau = \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} (\overline{u_i} \overline{u_j} + \overline{u_i} u'_j + u'_i \overline{u_j} + u'_i u'_j) d\tau$$

$$\overline{u_i u_j} = \overline{\overline{u_i} \overline{u_j} + \overline{u_i} u'_j + u'_i \overline{u_j} + u'_i u'_j}$$

aplicando las propiedades anteriores se tiene

$$\overline{u_i u_j} = \overline{u_i} \overline{u_j} + \overline{u'_i u'_j}.$$

Continuando con nuestro objetivo principal, nuestra ecuación de advección-difusión es la siguiente

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u_i C}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2},$$

la cual escribiremos como

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u_i C}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) \quad (4.21)$$

Reemplazamos entonces en (4.21) la descomposición de Reynolds y posteriormente integramos sobre la escala de tiempo t_I para tomar el promedio definido antes

$$\frac{\partial(\overline{C} + C')}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{u_i} + u'_i)(\overline{C} + C')}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial(\overline{C} + C')}{\partial x_i} \right).$$

Integrando

$$\frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} \frac{\partial(\bar{C} + C')}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_i + u'_i)(\bar{C} + C')}{\partial x_i} d\tau = \frac{1}{t_I} \int_t^{t+t_I} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial(\bar{C} + C')}{\partial x_i} \right) d\tau$$

$$\frac{\partial(\bar{C} + C')}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_i + u'_i)(\bar{C} + C')}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial(\bar{C} + C')}{\partial x_i} \right).$$

Vemos entonces la necesidad de convencernos acerca de las propiedades demostradas con anterioridad para aplicarlas en esta última igualdad y obtener

$$\frac{\partial(\bar{C} + \bar{C}')}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_i + \bar{u}'_i)(\bar{C} + \bar{C}')}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial(\bar{C} + \bar{C}')}{\partial x_i} \right) \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u}_i \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} = - \frac{\partial \bar{u}'_i \bar{C}'}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} \right).$$

La identidad que hemos obtenido debe ser familiar para nosotros. A parte de las barras superiores que indica un promedio respecto al tiempo, que como lo habíamos mencionado antes es necesario para tratar de interpretar la turbulencia, esta ecuación difiere de la ecuación de advección-difusión en un término, a saber, $-\partial \bar{u}'_i \bar{C}' / \partial x_i$. Habiendo revisado la sección anterior, identificamos fácilmente que la cantidad en cuestión, es de naturaleza advectiva, corresponde a la forma uC tratada antes y que representa un flujo de masa advectivo. Dado que se trata de fluctuaciones en la componente de velocidad y de concentración, directamente podemos concluir que se trata de un flujo de masa asociado con la turbulencia.

Reynolds describe este término cualitativamente como “una forma de mezcla rápida”; por lo que se podría hacer una analogía con la difusión molecular. Taylor (1921) comienza abordando este tema, obteniendo importantes resultados que demuestran que en un flujo turbulento, para tiempos mayores que t_I la nube de partículas de un trazador crece linealmente con el tiempo. Este resultado es abordado posteriormente por Rutherford (1994) y Fischer (1974) para justificar esta analogía con la difusión molecular. Para el modelo de la analogía del término advectivo asociado con la turbulencia y la difusión molecular, la escala de tiempo de difusión turbulenta promedio es $\Delta t = t_I$, y la escala de longitud de difusión turbulenta promedio es $\Delta x = u_I t_I = l_I$, por tanto el modelo es solo válido para tiempos mayores que t_I [15].

Retomando la primera ley de Fick,

$$\mathbf{q} = -D_m \frac{\partial C}{\partial x_i}.$$

Introducimos como subíndice el símbolo m al término D_m , para hacer referencia a que se trata del coeficiente de difusión molecular. Recordemos que $D_m = k(\delta x)^2$.

Entonces, volviendo a nuestra analogía, usando la primera ley de Fick para obtener una expresión que describa el flujo de masa advectivo asociado con la turbulencia, obtendríamos

$$\overline{u'_i C'} = -D_t \frac{\partial \overline{C}}{\partial x_i}; \quad (4.23)$$

donde

$$D_t = \frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} = u_I l_I.$$

Usando esto y eliminando la barra superior de los términos teniendo en cuenta de ahora en adelante que las concentraciones y velocidades son valores medios, reescribimos (4.22)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_t \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_m \frac{\partial C}{\partial x_i} \right). \quad (4.24)$$

Aunque esta analogía está respaldada por el análisis de Taylor desarrollado con experimentos, debe notarse que no es una prueba concluyente de su vigencia. Sin embargo, Rutherford reporta una gran cantidad de evidencia empírica para apoyar el uso de la Ecuación (4.24) para describir situaciones de mezcla turbulenta [3].

En su momento, podíamos ver que el coeficiente de difusión molecular D_m dependía del fluido en el cual se encuentra disuelta la sustancia; sin embargo, D_t depende de las características que impone el fluido expresadas por los remolinos.

Por otro lado, La variación de los coeficientes de difusión turbulenta en océanos, lagos y ríos es de varios grados de magnitud: el coeficiente de difusión turbulenta es por lo menos 100 veces más grande que el de difusión molecular, y en la mayoría de los casos es más de 10000 mayor [13]. Por esta razón, la ecuación (4.24) es en ocasiones simplificada aun más, eliminando el término final con el coeficiente de difusión molecular, lo cual no es correcto en el caso donde la turbulencia es amortiguada [13].

4.4.10. Dispersión longitudinal

La dispersión es un proceso relacionado con la difusión que también hace que los contaminantes se propaguen. Sin embargo, a diferencia del movimiento aleatorio del agua en el tiempo, la dispersión es el resultado de diferencias de velocidad en el espacio, o de modificaciones de la dirección del flujo. Dichas modificaciones pueden ser producidas por el cambio de curso de un río limitado por la geografía de un lugar o por la presencia de obstáculos dentro del cauce del sistema fluvial. Como ejemplo, suponga que se introduce un tinte en el agua que fluye a través de un tubo. En tales casos, una molécula de tinte cerca de la pared de la tubería, se

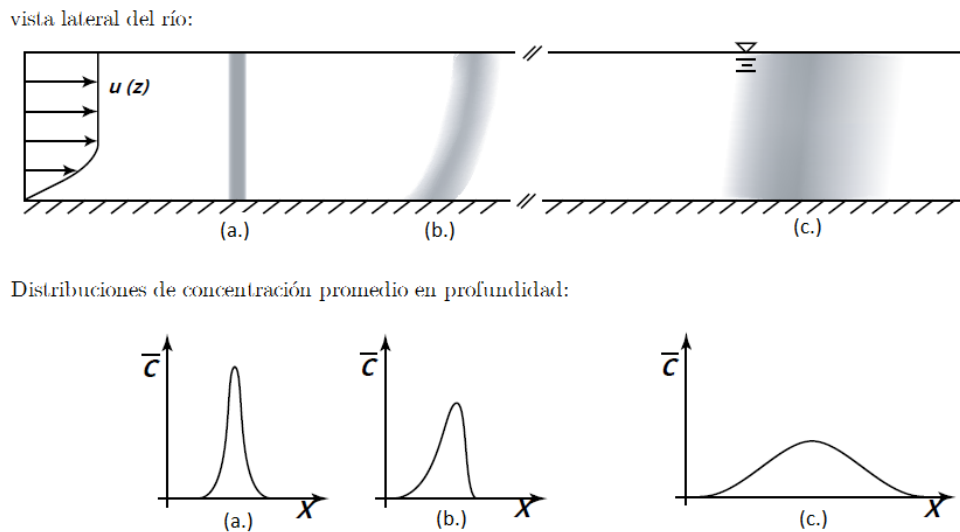


Figura 4.6: Esquema que muestra el proceso de dispersión longitudinal. El trazador se inyecta uniformemente en (a.) Y se estira mediante el perfil de corte en (b.). En (c.) La difusión vertical ha homogeneizado los gradientes verticales y se espera una distribución gaussiana promediada en profundidad en los perfiles de concentración (Scott A. Socolofsky & Gerhard H. Jirka, 2005).

movería más lentamente que una molécula cerca del centro debido a un gradiente de velocidad [4].

En la figura 4.6 se muestra lo que le sucede a un parche de tinte en un flujo de corte como en un flujo de canal abierto. Inicialmente si se inyecta un contaminante de manera que se distribuya uniformemente a través de la sección transversal en el punto (a.), no habrá gradientes de concentración vertical y por lo tanto, no hay flujo difusivo neto en la vertical en ese punto. El parche del trazador se desplazará corriente abajo y se estirará debido a las diferentes velocidades de advección en el perfil de corte. Después de una corta distancia río abajo, el parche se verá así en el punto (b.). En ese punto hay fuertes gradientes de concentración vertical y por lo tanto, un gran flujo de difusión neto en la vertical. A medida que el parche extendido continúa corriente abajo, la difusión (turbulenta) suavizará estos gradientes de concentración vertical y lo suficientemente lejos corriente abajo, el parche se verá así en el punto (c.). La cantidad que el parche se ha extendido en la dirección corriente abajo en el punto (c.) es mucho más de lo que podría haberse producido por difusión turbulenta longitudinal, pues la separación entre dos moléculas cualesquiera con diferentes velocidades advectivas podrían aumentar mucho más rápidamente que si sus velocidades advectivas eran las mismas y podían separarse sólo debido a su movimiento molecular térmico [7]. Este proceso combinado de

advección y difusión vertical es llamado dispersión.

4.4.11. Ecuación de advección-dispersión

El esfuerzo por haber encontrado una ecuación para determinar la variación de la concentración en un ambiente donde predomina la turbulencia no es en vano. El modelo tridimensional representado por la ecuación de advección-difusión turbulenta, es capaz de analizar la situación donde se incluyen desviaciones de velocidad debido a perfiles no uniformes sobre el transporte de contaminantes como el caso descrito en el gráfico 4.6. La dispersión esta incluida implícitamente en los modelos tridimensionales [15]. Sin embargo, estas ecuaciones, aunque parecen simples, requieren una cantidad significativa de información y esfuerzo para aplicarlas a ríos, lagos y aguas costeras [13]. Este nivel de detalle demanda mucho tiempo y dinero para realizar estudios de campo. Soluciones de la forma tridimensional completa de la ecuación para canales naturales también son muy complejos. En ciertas situaciones, algunos términos en la ecuación (4.24) son despreciablemente pequeños y se pueden hacer simplificaciones [3] que tienen lugar debido al comportamiento de la sustancia.

En la figura 4.6 observamos un hecho importante que es el punto de partida para deducir la ecuación de advección-dispersión. El hecho es que en el punto (c.) la sustancia esta bien mezclada en las direcciones y y z en otras palabras, la distribución de la concentración es esencialmente unidimensional. Abordaremos el análisis de Taylor para la dispersión, que es un método para incluir los efectos de estiramiento de la dispersión en un modelo unidimensional.

Como antes, trabajaremos con la descomposición de Reynolds. En realidad, es una variación de esta, pues ahora no vamos a descomponer la velocidad para un flujo turbulento mostrado en la figura 4.7, como anteriormente lo hicimos: Para una componente de la velocidad teníamos una velocidad media constante en un punto x_i en el espacio tridimensional y velocidades fluctuantes variables en el tiempo. Teníamos entonces la descomposición para la velocidad

$$u(x_i, t) = \bar{u}(x_i) + u'(x_i, t). \quad (4.25)$$

Ahora, abordaremos una descomposición de Reynolds para un flujo de corte (flujos con gradientes de velocidad (derecha de la figura 4.7)).

Para este caso, la velocidad de cualquier molécula individual es esencialmente la de la línea de corriente en que esta se encuentra, lo que se podría describir como una función de la posición de la sección transversal. La velocidad promedio será constante sobre la profundidad y las “desviaciones” de velocidad son variables con respecto a la profundidad, así que la descomposición de la velocidad en un flujo de corte es

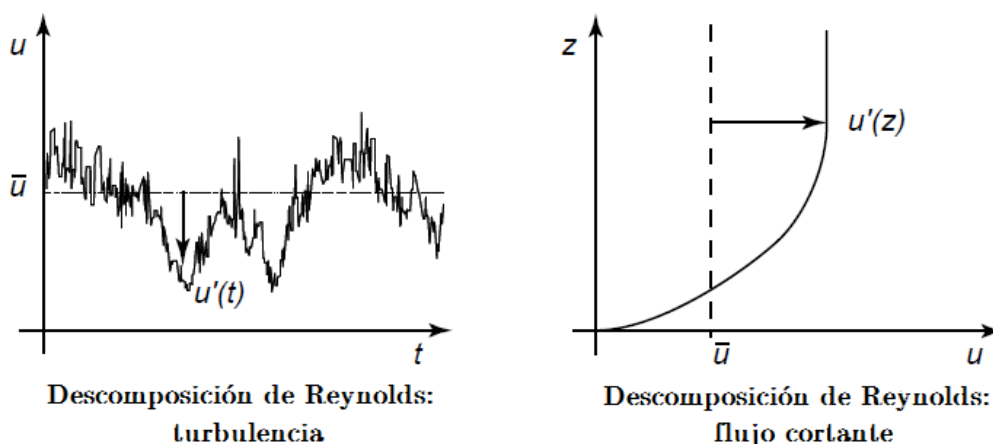


Figura 4.7: Comparación de la descomposición de Reynolds para flujo turbulento (izquierda) y flujo de corte (derecha) (Scott A. Socolofsky & Gerhard H. Jirka, 2005).

$$u(z) = \bar{u} + u'(z), \quad (4.26)$$

donde la barra superior representa un promedio sobre la profundidad en la sección transversal. Luego, la velocidad media puede encontrarse por integración como sigue

$$\bar{u} = \frac{1}{h} \int_0^h u dz.$$

Observe que el operador promedio sobre la profundidad definido de la forma

$$\bar{u} = \frac{1}{h} \int_0^h u dz$$

satisface también las propiedades mencionadas desde la ecuación (4.14) hasta la (4.20) en la sección 5.4.9.

Podemos evidenciar una importante diferencia entre las dos descomposiciones descritas. Por un lado (4.25), tiene una componente fluctuante aleatoria $u'(x_i, t)$, mientras que (4.26), tiene una componente fluctuante determinista, no aleatoria y completamente conocida $u'(z)$, lo que es preferible llamar una desviación que una fluctuación.

Como antes también tenemos una descomposición para la concentración

$$C(z) = \bar{C} + C'(z).$$

Continuaremos siguiendo el análisis de Taylor, aplicándolo a la dispersión longitudinal en un canal abierto. Asumiremos para esta deducción un flujo laminar.

La extensión del análisis de Taylor al flujo turbulento no demandará demasiado trabajo. En flujo turbulento, el perfil de velocidad será algo diferente que en un flujo laminar en el mismo canal, y el coeficiente de mezcla turbulenta transversal desempeñará el papel de la difusión molecular en el flujo laminar. Las conclusiones a las que llegaremos sobre el uso de la ecuación de dispersión unidimensional se aplica sin cambios [7]. En el transcurso de la deducción se mencionara la única diferencia significativa en el desarrollo matemático.

También asumiremos un canal infinitamente ancho sin flujo en las fronteras superior e inferior, de modo que $v = w = 0$. El parche de tinta es introducido como un plano, de modo que podemos eliminar la difusión lateral ($\partial C/\partial y = 0$). Con las anteriores suposiciones, la ecuación gobernante de advección difusión es

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}.$$

Esta ecuación es valida en tres dimensiones y contiene el efecto de la dispersión. Los coeficientes podrían ser moleculares o turbulentos dependiendo del tipo de flujo. A continuación sustituimos la descomposición de Reynolds para el perfil de velocidad de corte

$$\frac{\partial(\bar{C} + C')}{\partial t} + (\bar{u} + u') \frac{\partial(\bar{C} + C')}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2(\bar{C} + C')}{\partial x^2} + D_z \frac{\partial^2(\bar{C} + C')}{\partial z^2}.$$

como se argumento antes, la dispersión longitudinal será mucho mayor que la difusión longitudinal, por lo tanto eliminaremos el término D_x por brevedad (siempre se puede volver a agregar más tarde como un término de difusión aditivo) [15]. Además, tenga en cuenta que \bar{C} no es una función de z ; así que, se elimina del último término de la ecuación obteniendo

$$\frac{\partial(\bar{C} + C')}{\partial t} + (\bar{u} + u') \frac{\partial(\bar{C} + C')}{\partial x} = D_z \frac{\partial^2 C'}{\partial z^2}. \quad (4.27)$$

Será más fácil manejar esta ecuación en un marco de referencia que se mueve con la velocidad de advección media; en otras palabras, podríamos ver el flujo como un observador moviéndose a la velocidad media. Introducimos entonces la transformación de coordenadas siguiente

$$\xi = x - \bar{u}t$$

$$\tau = t$$

$$z = z.$$

Mediante la regla de la cadena, los operadores diferenciales se convierten en

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial x} \\ &= \frac{\partial}{\partial \xi}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} \\ &= \frac{\partial}{\partial \tau} - \bar{u} \frac{\partial}{\partial \xi}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial z} \\ &= \frac{\partial}{\partial z}.\end{aligned}$$

Por tanto, la ecuación (4.27) se transforma en

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \bar{u} \frac{\partial}{\partial \xi}\right)(\bar{C} + C') + (\bar{u} + u') \frac{\partial(\bar{C} + C')}{\partial \xi} &= D_z \frac{\partial^2 C'}{\partial z^2} \\ \frac{\partial}{\partial \tau}(\bar{C} + C') - \bar{u} \frac{\partial}{\partial \xi}(\bar{C} + C') + \bar{u} \frac{\partial}{\partial \xi}(\bar{C} + C') + u' \frac{\partial}{\partial \xi}(\bar{C} + C') &+ = D_z \frac{\partial^2 C'}{\partial z^2},\end{aligned}$$

que es equivalente a

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial \tau} + \frac{\partial C'}{\partial \tau} + u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} + \frac{\partial u' C'}{\partial \xi} = D_z \frac{\partial^2 C'}{\partial z^2}. \quad (4.28)$$

Esta ecuación continua siendo intratable debido a la variación de las desviaciones de la velocidad con respecto a la profundidad. Un procedimiento general para tratar con ecuaciones diferenciales con coeficientes variables no está disponible, así que no es posible encontrar una solución general para (4.28). Taylor obtuvo su solución mediante un despliegue del tipo de brillantez que sólo podemos admirar; descartó tres de los primeros cuatro términos, incluido el término $\partial \bar{C} / \partial \tau$ que expresa precisamente lo que estamos tratando de encontrar, la tasa de decaimiento de la concentración, para dejar una ecuación de fácil solución para $C'(z)$ [7]

$$u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} = D_z \frac{\partial^2 C'}{\partial z^2}. \quad (4.29)$$

Note que esta ecuación establece un equilibrio entre difusión y advección.

La justificación para este gran paso depende del orden de magnitud de los términos en la ecuación. Inicialmente, aplicamos el operador promedio de profundidad sobre la ecuación (4.28)

$$\frac{1}{h} \int_0^h \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial \tau} + \frac{\partial C'}{\partial \tau} + \frac{\partial u' \bar{C}}{\partial \xi} + \frac{\partial u' C'}{\partial \xi} \right) dz = \frac{1}{h} \int_0^h \left(D_z \frac{\partial^2 C'}{\partial z^2} \right) dz.$$

Como ya habíamos dicho, el operador promedio aplicado satisface las propiedades mencionadas en la sección 5.4.9, de ahí que

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial \tau} + \frac{\partial \overline{u' C'}}{\partial \xi} = 0. \quad (4.30)$$

Restando esta ecuación de (4.28)

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial \tau} + \frac{\partial C'}{\partial \tau} + u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} + u' \frac{\partial C'}{\partial \xi} - \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial \tau} + \frac{\partial \overline{u' C'}}{\partial \xi} \right) = D_z \frac{\partial^2 C'}{\partial z^2},$$

tenemos

$$\frac{\partial C'}{\partial \tau} + u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} + u' \frac{\partial C'}{\partial \xi} = \frac{\partial \overline{u' C'}}{\partial \xi} + D_z \frac{\partial^2 C'}{\partial z^2}, \quad (4.31)$$

la cual es una ecuación gobernante para las desviaciones de la concentración C' . Resolviendo esta ecuación para C' , podríamos sustituir la solución en (4.30) y obtener la ecuación deseada para \bar{C} .

Es ahora, que juegan un papel importante el orden de las magnitudes en la ecuación (4.31). Se considera la escala de cada término y se decide si es necesario mantener a todos. A esto se le llama “análisis de escala”.

Recordemos que estamos buscando soluciones para el punto (c.) de la figura 4.6, donde se da un equilibrio entre la difusión y la advección que es expresado por (4.29). A esta distancia, es experimentalmente observado e intuitivamente aparente que la nube del trazador se extienda sobre una gran distancia en la dirección x , de modo que $\partial \bar{C} / \partial x$ es casi constante durante un largo periodo de tiempo [7]. Por su parte C' se vuelve pequeño porque la difusión vertical iguala los gradientes de concentración verticales y se espera una distribución normal promediada en profundidad en los perfiles de concentración. Por lo anterior $C' \ll \bar{C}$. Las siguientes comparaciones como consecuencia de la anterior permiten avanzar hacia nuestro objetivo, no es sencillo y requiere de cuidado establecer estas desigualdades que proponen en la página 63 los autores Scott A. Socolofsky & Gerhard H. Jirka, 2005 y que se presentan a continuación

$$\begin{aligned} u' \frac{\partial C'}{\partial \xi} &\ll u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} \\ u' \frac{\partial \overline{u' C'}}{\partial \xi} &\ll u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi}. \end{aligned}$$

Por lo anterior, podemos suprimir el tercer y cuarto término de (4.31), quedándonos con

$$\frac{\partial C'}{\partial \tau} + u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} = D_z \frac{\partial^2 C'}{\partial z^2}. \quad (4.32)$$

En el caso de turbulencia como también ocurre en la dispersión, explicamos que el término $\overline{\partial u' C'}/\partial \xi$ representa un flujo de masa debido a las fluctuaciones; aún así, lo acabamos de descartar en el anterior paso. Sin embargo, analicemos el segundo término del lado izquierdo de la ecuación (4.32). Notamos que este término también es de naturaleza advectiva sobre la concentración media \bar{C} , pero debido a la desviación de velocidad no aleatoria $u'(z)$. Por lo tanto, se asume que $u' \partial \bar{C}/\partial \xi$ es el término de transporte que representa la acción del perfil de velocidad de corte.

A continuación, vemos otra simplificación perspicaz que hizo Taylor. A la distancia del punto (c.) en la figura 4.6, luego de que el perfil de velocidad se ha muestreado completamente, las fluctuaciones de la concentración vertical alcanzarán un estado estacionario; es decir, habrá un transporte vertical equilibrado de contaminantes. Esto representa el caso de un coeficiente de dispersión constante (invariante en el tiempo) [15]. Por lo tanto, al no haber dependencia del tiempo, la ecuación (4.32) se convierte en

$$u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} = \frac{\partial C'}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C'}{\partial z} \right), \quad (4.33)$$

donde hemos escrito a D_z como no constante. De acuerdo con [7], aquí yace la única diferencia significativa al pasar del régimen laminar al turbulento. En realidad la ecuación (4.33) va de acuerdo al régimen turbulento, pues el coeficiente de mezcla transversal D_z puede ser una función de la posición z de la sección transversal, por tanto no podría ser constante. En cuanto a un flujo laminar (4.33) sería

$$u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} = D_z \frac{\partial^2 C'}{\partial z^2},$$

como se había expresado en (4.29).

Hemos justificado entonces la eliminación que realizó Taylor de los tres términos en la ecuación (4.28). Además podemos evidenciar la facilidad al momento de encontrar una solución para $C'(z)$ como lo habíamos mencionado.

Resolviendo entonces para $C'(z)$ en (4.33) tenemos que

$$\int_0^{\bar{z}} u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} dz = \int_0^{\bar{z}} \frac{\partial C'}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C'}{\partial z} \right) dz. \quad (4.34)$$

Consideremos

$$F(\bar{z}) = \int_0^{\bar{z}} \frac{\partial C'}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C'}{\partial z} \right) dz,$$

haciendo uso del teorema fundamental del Cálculo se tiene que

$$F'(\bar{z}) = \frac{\partial C'}{\partial \bar{z}} \left(D_{\bar{z}} \frac{\partial C'}{\partial \bar{z}} \right)$$

con la condición $F(0) = 0$.

A continuación solucionamos esta ecuación diferencial con la condición inicial obtenida. Tendríamos que

$$\begin{aligned} F(\bar{z}) &= \int \frac{\partial C'}{\partial \bar{z}} \left(D_{\bar{z}} \frac{\partial C'}{\partial \bar{z}} \right) d\bar{z} \\ &= D_z \frac{\partial C'}{\partial \bar{z}} + K_1. \end{aligned}$$

donde K_1 es una constante.

Por la condición inicial

$$0 = F(0) = D_z \frac{\partial C'}{\partial z} \Big|_{z=0} + K_1,$$

esto es

$$K_1 = -D_z \frac{\partial C'}{\partial z} \Big|_{z=0}$$

que no es más que el flujo difusivo en la dirección z y en la frontera, en donde habíamos supuesto que no existía. Por lo tanto $K_1 = 0$. Volviendo a (4.34) tenemos

$$\frac{\partial C'}{\partial z} = \frac{1}{D_z} \int_0^{\bar{z}} u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} dz.$$

Integramos por segunda vez

$$\int_0^{\bar{z}} \frac{\partial C'}{\partial z} dz = \int_0^{\bar{z}} \frac{1}{D_z} \int_0^{\bar{z}} u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} dz dz.$$

Para repetir el procedimiento llamamos

$$G(\bar{z}) = \int_0^{\bar{z}} \frac{\partial C'}{\partial z} dz,$$

luego

$$G'(\bar{z}) = \frac{\partial C'}{\partial \bar{z}}$$

con $G(0) = 0$.

Nuevamente solucionamos el problema de valor inicial

$$\begin{aligned} G(\bar{z}) &= \int \frac{\partial C'}{\partial \bar{z}} d\bar{z} \\ &= C' + K_2 \end{aligned}$$

donde K_2 es una constante.

Por la condición inicial

$$K_2 = -C'(0).$$

Por lo tanto

$$C'(z) = \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} \int_0^{\bar{z}} \frac{1}{D_z} \int_0^{\bar{z}} u' dz dz + C'(0). \quad (4.35)$$

El término $\partial \bar{C} / \partial \xi$ no depende de z , es por ello que sale de la integral.

Pese a que hemos obtenido una solución para $C'(z)$, esta aún conserva el término \bar{C} que es desconocido. Para dar solución a este último detalle, analicemos cual es el flujo de masa en la dirección longitudinal.

La transformación al nuevo sistema en movimiento nos permite ver el flujo como un observador moviéndose a la velocidad media. En el sistema en movimiento la única velocidad observable es u' , lo que explica porque la ecuación transformada no contiene la velocidad media \bar{u} . De ahí que, el flujo de masa advectivo q_a debe ser representado por

$$q_a = u'(\bar{C} + C').$$

Ahora tomamos el promedio de profundidad

$$\begin{aligned} \bar{q}_a &= \frac{1}{h} \int_0^h u'(\bar{C} + C') dz \\ &= \frac{1}{h} \int_0^h u' \bar{C} dz + \frac{1}{h} \int_0^h u' C' dz \\ &= \overline{u' \bar{C}} + \overline{u' C'}. \end{aligned}$$

Por las propiedades demostradas para un operador promedio tenemos que

$$\bar{q}_a = \frac{1}{h} \int_0^h u' C' dz = \overline{u' C'}.$$

Reemplazando la solución para C' en (4.35), el flujo de masa promedio se transforma en

$$\begin{aligned} \bar{q}_a &= \frac{1}{h} \int_0^h u' \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} \int_0^{\bar{z}} \frac{1}{D_z} \int_0^{\bar{z}} u' dz dz + C'(0) \right) dz \\ &= \frac{1}{h} \int_0^h u' \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} \int_0^{\bar{z}} \frac{1}{D_z} \int_0^{\bar{z}} u' dz dz \right) dz + \frac{1}{h} \int_0^h C'(0) dz. \end{aligned}$$

Ya hemos probado que $\overline{C'} = \frac{1}{h} \int_0^h C' dz = 0$, de manera que

$$\bar{q}_a = \frac{1}{h} \int_0^h u' \left(\frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} \int_0^{\bar{z}} \frac{1}{D_z} \int_0^{\bar{z}} u' dz dz \right) dz.$$

Sacando de la integral al término $\partial \bar{C} / \partial \xi$, podemos reescribir esta ecuación como

$$\bar{q}_a = -D_L \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi}$$

donde

$$D_L = -\frac{1}{h} \int_0^h u' \int_0^{\bar{z}} \frac{1}{D_z} \int_0^{\bar{z}} u' dz dz dz,$$

que es conocido como coeficiente de dispersión longitudinal.

Hemos obtenido finalmente un flujo de masa de tipo ley de Fick. Dado que la ecuación para D_L es solo una función de la profundidad y el perfil de velocidad, podemos calcular D_L para cualquier perfil de velocidad mediante integración; así, tenemos una solución analítica para el coeficiente de dispersión longitudinal.

Ahora, ya podemos regresar a la ecuación (4.30) para reemplazar este resultado final y obtener

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(D_L \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} \right)$$

y volviendo al sistema de coordenadas original conseguimos nuestro objetivo de deducir la ecuación de advección dispersión unidimensional que se utiliza ampliamente en el análisis de la dispersión en caudales del medio ambiente como ríos y estuarios [7]

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_L \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right) \quad (4.36)$$

con D_L definido por

$$D_L = -\frac{1}{h} \int_0^h u' \int_0^{\bar{z}} \frac{1}{D_z} \int_0^{\bar{z}} u' dz dz dz. \quad (4.37)$$

4.4.12. Aplicación de la ecuación de advección-dispersión en sistemas fluviales

La rigurosidad y detalle matemático; un “análisis de escala” y el entendimiento de el problema físico para hacer algunas suposiciones han permitido conseguir una ecuación que trata de modelar la evolución de un contaminante que se desplaza con el agua de los ríos. Sin embargo, la ecuación (4.36) no es usada tal como está en la investigación de problemas prácticos de dispersión en flujos turbulentos.

Esencialmente esto se debe a que es imposible especificar completamente el campo de velocidad, que contiene no solo los efectos de la topografía, las fuerzas de flotabilidad, etc., sino también las fluctuaciones turbulentas aleatorias [5]. Por otra parte, hay que considerar también procesos de transformación de las sustancias contaminantes que aun no están representadas en nuestra ecuación de advección-dispersión.

4.4.13. Condiciones para la aplicación del modelo

Sin considerar aún procesos de transformación de las sustancias contaminantes, expondremos tres condiciones que aseguran el cumplimiento de la ecuación de advección-dispersión.

1. El tiempo que ha transcurrido desde que comenzó la dispersión es lo suficientemente grande en comparación con el tiempo necesario para mezclar completamente el contaminante sobre la sección transversal [5].
2. Turbulencia homogénea: propiedades estadísticas del flujo estacionarias.
3. El área de la sección transversal A del río es independiente de x y t .

En el desarrollo de obtener nuestra ecuación, resaltamos en varias oportunidades que para modelar el problema como lo hicimos, era necesario trabajar con el comportamiento del contaminante en el punto (c) de la figura 4.6, pues allí se daban condiciones suficientes para continuar con el proceso. Para que la sustancia llegue a este punto, debió haber transcurrido un tiempo necesario para obtener

una mezcla completa (uniforme) sobre la sección transversal del flujo. De acuerdo con [7] el sesgo que se ha obtenido de la dispersión longitudinal en el punto (b) de la figura 4.6 se produce en el periodo $t < 0,4h^2/D_z$. Cuando $t > 0,4h^2/D_z$ la varianza de la nube que se dispersa crece linealmente con el tiempo, y el sesgo inicial degenera en la distribución normal en el período $0,4 < tD_z/h^2 < 1$. La ecuación de advección-dispersión se aplica con una precisión razonable para $t > 0,4h^2/D_z$.

4.4.14. Caso ideal para la aplicación del modelo

Caso ideal: un canal uniforme recto, infinitamente ancho y con profundidad constante

El flujo de agua en un canal recto de profundidad constante y gran ancho es un ejemplo de un flujo en el que se encuentra todos los requisitos para el uso de un coeficiente de mezcla turbulento [7].

En este caso ideal, daríamos cumplimiento a la segunda y tercera condición de la sección anterior. La turbulencia es homogénea y estacionaria debido a la uniformidad del canal. Además, si no hay uniformidad, es poco probable que las características de difusión y dispersión sean funciones estacionarias de tiempo y por lo tanto, es probable que nunca se establezca el equilibrio entre la difusión y la dispersión.

4.4.15. Coeficientes de difusión turbulenta en ríos

Ahora, consideremos un río con una profundidad h y ancho W , tal que $h \ll W$. Una propiedad de la turbulencia tridimensional es que los remolinos más grandes suelen estar limitados por la dimensión espacial más pequeña, en este caso, la profundidad [15]. Esto significa que las propiedades turbulentas en un río ideal deben ser independientes del ancho, pero dependientes de la profundidad. Si el canal es lo suficientemente ancho, una nube de un trazador crecerá hasta llenar completamente la profundidad y luego continuará creciendo en las direcciones de largo y ancho.

Por otro lado, se cree que se generan turbulencias en zonas de alto corte, que en un río serían en el fondo. Un parámetro que captura la fuerza de corte es la velocidad de corte definido como

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}},$$

donde τ_0 es el esfuerzo de corte en el fondo del río y ρ la densidad del fluido. Para un flujo en un canal uniforme, la fuerza de corte se equilibra con la gravedad de modo que

$$u_* = \sqrt{ghS},$$

donde S es la pendiente del del río [15].

Cuando deducimos la ecuación de advección-difusión turbulenta, describimos al coeficiente de difusión turbulenta como $D_t = u_l l_I$. Como hemos identificado la profundidad como la longitud relevante, ahora vemos que en nuestro flujo idealizado cualquier coeficiente de difusión turbulenta debe ser proporcional al producto $u_* h$, esto es

$$D_t \propto u_* h.$$

Debido a que el perfil de velocidad es muy diferente en la dirección vertical z en comparación con la dirección transversal y , no se espera que D_t sea el mismo en todas las direcciones (isotrópico) por la existencias de fronteras en la superficie y fondo del río. En consecuencia, se obtienen coeficientes de mezcla diferentes en las direcciones vertical y transversal, cuyos valores tomados del análisis hechos en la bibliografía como [15], [7] y [3] se presentan a continuación.

Mezcla vertical. Los coeficientes de difusión vertical se deducen del perfil de velocidad. Para un flujo turbulento completamente desarrollado en un canal abierto, se puede demostrar que el perfil de velocidad logarítmico turbulento está dado por

$$\bar{u}_t(z) = \bar{u} + \frac{u_*}{k}(1 + \ln(z/h)), \quad (4.38)$$

donde k es la constante de von Karman.

El coeficiente de difusión vertical

$$D_{t,z} = 0,067hu_*.$$

se obtiene a partir de (4.38), que ha sido verificado por experimentos en ríos [7].

Mezcla transversal. Elder (1959) fue la primera persona en abordar la mezcla transversal demostrando que la distribución transversal del soluto en el flujo bidimensional es gaussiano, por lo tanto, la analogía de la difusión de Fick es válida [3].

Debido a que no hay un perfil de velocidad transversal en un canal uniforme e infinitamente ancho, conlleva en esta situación a obtener valores de experimentos. Para el caso idealizado, de un canal recto, una cantidad de experimentos tabulados en [7] respalda que el coeficiente de difusión transversal promedio es

$$D_{t,y} = 0,15hu_*.$$

En los arroyos naturales, la sección transversal rara vez tiene una profundidad uniforme y la trayectoria del río no es recta. De cierto modo, este tipo de irregularidades mejoran la mezcla transversal y, para corrientes naturales [7] sugiere la

relación

$$D_{t,y} = 0,6hu_*.$$

Mezcla longitudinal. La mezcla longitudinal se produce en el campo lejano, que es una vez que el trazador se ha mezclado por completo en toda la sección transversal del canal. Dado que asumimos que no hay efectos de frontera en las direcciones lateral o longitudinal, la mezcla turbulenta longitudinal debería ser equivalente a la mezcla transversal

$$D_{t,x} = D_{t,y}.$$

Aclarando la tercera condición para la aplicación de la ecuación de advección-dispersión, Fischer (1967) demostró que para los canales de los ríos los efectos de corte lateral (en la dirección y) hacen una mayor contribución a la mezcla longitudinal que el corte vertical [3]. Para el corte lateral, en [7] se deriva mediante un análisis similar la relación

$$D_L = -\frac{1}{A} \int_0^W u'h \int_0^{\bar{y}} \frac{1}{D_y h} \int_0^{\bar{y}} u'h \, dy \, dy \, dy. \quad (4.39)$$

donde A es el área de la sección transversal del río, W es el ancho y D_y es el coeficiente de difusión transversal. Este resultado es, por supuesto, sólo una estimación porque se basa en el concepto de un flujo uniforme en una sección transversal constante (ver [7], páginas 125-130). Así que un área constante brindara una mejor precisión para el valor del coeficiente de dispersión longitudinal y en consecuencia para el modelo completo.

Como hemos mencionado, los análisis discutidos se han limitado a canales uniformes ya que el análisis de Taylor que hemos venido abordando supone que en todas partes a lo largo del río la sección transversal es la misma. Sin embargo, un sistema fluvial pueden tener curvas, bancos de arena, estanques, rápidos, pilares de puentes, revestimientos hechos por el hombre, entre otras irregularidades que contribuyen a la dispersión. Algunos arroyos pueden ser tan irregulares que no se puede aplicar ningún análisis razonable. Por ejemplo, un arroyo de montaña que consta de una serie de estanques y rápidos no es adecuado lugar para aplicar el análisis de Taylor. Sin embargo, la mayoría de las corrientes son uniformes, suficiente para un análisis aproximado, si se tienen en cuenta las limitaciones [7].

Con tantas irregularidades mencionadas, no podemos incluir los efectos exactos de estas, lo que haría difícil obtener un coeficiente de dispersión longitudinal con una precisión demasiado alta. A continuación, deduciremos a partir de la ecuación (4.39) una expresión mas concreta para D_L que ha sido tomado en cuenta en algunas situaciones reales como el accidente mencionado en [1] y en ríos que poseen características similares para la aplicación del modelo.

Comenzamos escribiendo la ecuación (4.39) en forma adimensional usando las variables adimensionales (denotadas por $*$) propuestas en [15] definidas por

$$y = Wy^*, \quad (4.40)$$

$$u' = \sqrt{\overline{u'^2}} u'^*, \quad (4.41)$$

$$D_y = \overline{D_y} D_y^*, \quad (4.42)$$

$$h = \overline{h} h^*; \quad (4.43)$$

donde la barra superior indica un promedio en la sección transversal. El término $\sqrt{\overline{u'^2}}$ representa la “intensidad” de la desviación de velocidad; teniendo en cuenta que no es la intensidad turbulenta, sino más bien una medida de cuánto la velocidad turbulenta promediada se desvía a lo largo de su sección transversal [7].

Considerando las sustituciones mencionadas tenemos en cuenta que si $y = Wy^*$, entonces $dy = W dy^*$ y los límites de integración cambiarían como sigue: si $y = 0, y^* = 0$; si $y = \bar{y}, y^* = \frac{\bar{y}}{W}$ y si $y = W, y^* = 1$.

Sustituyendo en la integral interna de la ecuación (4.39) las expresiones (4.41) y (4.43) tenemos

$$D_L = -\frac{1}{A} \int_0^W u' h \int_0^{\bar{y}} \frac{1}{D_y h} \left(\int_0^{\bar{y}/W} \sqrt{\overline{u'^2}} u'^* \overline{h} h^* W \, dy^* \right) dy dy,$$

así que

$$D_L = -\frac{W \overline{h} \sqrt{\overline{u'^2}}}{A} \int_0^W u' h \int_0^{\bar{y}} \frac{1}{D_y h} \left(\int_0^{\bar{y}/W} u'^* h^* \, dy^* \right) dy dy.$$

De manera análoga con las otras integrales al sustituir las igualdades (4.40) - (4.43) obtenemos

$$\begin{aligned} D_L &= -\frac{\overline{h} W^2 \overline{u'^2}}{\overline{h} A \overline{D_y}} \int_0^W u' h \left[\int_0^{\bar{y}/W} \frac{1}{D_y^* h^*} \left(\int_0^{\bar{y}/W} u'^* h^* \, dy^* \right) dy^* \right] dy \\ &= -\frac{\overline{h} W^3 \sqrt{\overline{u'^2}}}{A \overline{D_y}} \int_0^1 u'^* h^* \left[\int_0^{\bar{y}/W} \frac{1}{D_y^* h^*} \left(\int_0^{\bar{y}/W} u'^* h^* \, dy^* \right) dy^* \right] dy^* \end{aligned}$$

Aquí resalta el caso ideal de una profundidad constante, pues de ser este el caso $\overline{h} = h$, luego $A = W \overline{h}$ y en consecuencia

$$D_L = -\frac{W^2\sqrt{\overline{u'^2}}}{\overline{D}_y} \int_0^1 u'^* h^* \left[\int_0^{\bar{y}/W} \frac{1}{D_y^* h^*} \left(\int_0^{\bar{y}/W} u'^* h^* dy^* \right) dy^* \right] dy^*,$$

que podemos escribir como

$$D_L = \frac{W^2\overline{u'^2}}{\overline{D}_y} I;$$

donde

$$I = - \int_0^1 u'^* h^* \int_0^{\bar{y}^*} \frac{1}{D_y^* h^*} \int_0^{\bar{y}^*} u'^* h^* dy^* dy^* dy^*; \bar{y}^* = \bar{y}/W.$$

En la literatura como en [7] encontramos valores de I que se ajustan a características reales de un río, lo que nos evita la triple integración. Sin embargo, parte de equilibrar este coeficiente de dispersión es buscar valores para I con cantidades propias del arroyo que se esta modelando. De acuerdo con [15], en la mayoría de los casos es suficiente tomar a I entre 0.01 y 0.1, mientras que de experimentos y comparaciones con el campo, la razón $\overline{u'^2}/\overline{u}^2$ puede tomarse como $0,2 \pm 0,03$. Como se menciono antes, el coeficiente de mezcla transversal para ríos irregulares se puede tomar $\overline{D}_y = 0,6hu_*$.

Tomando $\overline{u'^2}/\overline{u}^2 = 0,2$ se tiene que $u'^2 = 0,2\overline{u}^2$ y con $I = 0,033$ obtenemos la estimación

$$D_L = 0,011 \frac{W^2\overline{u}^2}{hu_*}. \quad (4.44)$$

Los canales de los ríos naturales a menudo exhiben regiones donde el flujo tiende a retornar o de agua estancada. Estas características son a menudo denominadas zonas muertas y atrapan eficazmente un trazador. El resultado de la ecuación (4.44) es bastante aproximado ya que depende de una estimación de D_y y no refleja explícitamente la presencia de zonas muertas. Sin embargo, tiene la ventaja de predecir el coeficiente de dispersión a partir de las cantidades disponibles de profundidad media, anchura, velocidad media y pendiente de la superficie.

4.4.16. Transformación

La transformación se refiere a aquellos procesos que transforman una sustancia de interés en otra. Las sustancias químicas pueden sufrir, una amplia variedad de procesos de transformación; los dos modos principales de estos procesos son el físico (transformaciones causadas por leyes físicas, como la desintegración radiactiva) y el químico (transformaciones provocadas por reacciones químicas o biológicas,

como la disolución y la respiración) [15]. Para que la ecuación de transporte que hemos modelado tenga en cuenta esto, se pretende agregar un término de reacción a la ecuación de advección-dispersión que describa el cambio de las sustancias en consideración.

Un sistema en el cual no ocurre una transformación, es llamado **conservativo**. En el caso de que ocurra una transformación, el sistema es llamado **reactivo**.

A su vez, las reacciones de una transformación son clasificadas en **homogéneas**: ocurren en todas partes dentro del fluido y son representadas agregando un término fuente (describe ganancia de la sustancia) o sumidero (describe una pérdida de la sustancia) a la ecuación gobernante. Por otra parte, las **heterogéneas**: ocurren solo en el límite del fluido. Por lo tanto, se especifican por condiciones de frontera de fuente o sumidero que restringen la ecuación diferencial gobernante. Las homogéneas son el tipo de reacción mas fundamental de las reacciones empleadas en el modelamiento de calidad de agua.

La cinética o velocidad de tales reacciones se puede expresar cuantitativamente mediante la **ley de acción de masas**, que establece que la velocidad es proporcional a la concentración de los reactivos [4].

4.4.17. Reacciones de orden cero, de primer orden y segundo orden

Una reacción de orden cero es modelada como

$$\frac{dC}{dt} = -k,$$

donde k tiene unidades $[ML^{-1}T^{-1}]$. Considerando el problema con valor inicial $C = C_0$ en $t = 0$, entonces podemos encontrar una solución mediante separación de variables para obtener

$$C = C_0 - kt.$$

Así, observando una gráfica de una concentración versus tiempo que sea lineal, concluimos que es una reacción de primer orden.

La ecuación general para una reacción de primer orden es

$$\frac{dC}{dt} = -kC;$$

donde k tiene unidades $[1/T]$. Este es un problema estándar de valor inicial, cuya solución se puede encontrar sujeta a la condición inicial $C(t = 0) = C_0$, obteniendo la solución

$$C(t) = C_0 e^{-kt}.$$

Para una reacción de segundo orden se tiene la ecuación

$$\frac{dC}{dt} = -kC^2;$$

donde k tiene unidades $[L^3 M^{-1} T^{-1}]$. De igual forma, sujeto a la condición inicial $C(t=0) = C_0$, tenemos la solución

$$C(t) = C_0 \frac{1}{1 + kt}$$

Generalizando, la ecuación para una reacción de orden n es

$$\frac{dC}{dt} = -kC^n;$$

donde k tiene unidades $[L^{3(n-1)} M^{-(n-1)} T^{-1}]$. La solución general a este problema con la condición inicial $C(t=0) = C_0$ es

$$\left(\frac{1}{n-1} \right) \left[\frac{1}{C^{n-1}} + \frac{1}{C_0^{n-1}} \right] = kt$$

para $n \geq 2$. Tales reacciones son raras y por lo general, se prueban diferentes valores de n para encontrar el mejor ajuste a los datos experimentales [15].

4.4.18. Incorporación de una reacción homogénea a la ecuación de advección-dispersión.

Como ya dijimos, una reacción homogénea agrega otro término a la ecuación de advección, por lo tanto, proporcionan otro flujo a nuestra ley de conservación de masa. Así, para obtener una ecuación de advección-difusión que contiene un término asociado a la transformación de una sustancia, se comienza agregando un término de reacción fuente o sumidero S a la ecuación de conservación de masa sobre un volumen de control como antes

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \sum \dot{m}_{in} - \sum \dot{m}_{out} \pm S.$$

Y al igual que antes

$$\delta \dot{m} = \sum \dot{m}_{in} - \sum \dot{m}_{out} = \left(D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u_i \frac{\partial(C)}{\partial x} \right) \delta x \delta y \delta z. \quad (4.45)$$

La velocidad de una reacción es proporcional a la concentración de los reactivos. Sin embargo, no todos ellos influyen de la misma manera en la velocidad. La expresión que nos permite calcular la velocidad a la que ocurre reacción y relacionar la velocidad con las concentraciones de los reactivos se llama Ley de Velocidad. El término de reacción es justamente esta ley integrada sobre el volumen de control [15], dándonos

$$S = \pm R \delta x \delta y \delta z. \quad (4.46)$$

Reemplazando los resultados (4.45) y (4.46) obtenemos

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_i \frac{\partial C}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x_i^2} \pm R \quad (4.47)$$

donde R es un término fuente o sumidero.

El hecho de aceptar las hipótesis para tomar el modelo de la ecuación de advección-dispersión no afecta al término relacionado con la transformación de las sustancias, de manera que también es válida la ecuación

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_L \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right) \pm R.$$

La representación más común para las reacciones cinéticas es la reacción de primer orden, que se emplea más comúnmente en aguas naturales y en particular cuando se analizan sustancias contaminantes que pueden venir de actividades de minería. Por ejemplo, como se expone en el artículo [1], el estudiar la variación del cianuro requiere más precisamente de la ecuación de advección-dispersión

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_L \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \right) - k \bar{C}. \quad (4.48)$$

Como hemos mencionado antes, el término $-kC$ tiene en cuenta las transformaciones biológicas, químicas y físicas del contaminante durante el transporte y cualquier otro proceso que conduzca al cambio de concentración del contaminante. Dependiendo de los contaminantes, las transformaciones pueden causar pérdida de contaminante, que es el caso cuando k es positivo, y se denominan sumideros de contaminantes; o ganancia de contaminante, cuando k es negativo, denominándose fuentes de contaminantes.

De lo anterior, vemos entonces que sin considerar el término asociado a las reacciones, el modelo de advección-dispersión representa el transporte de cualquier sustancia debido a que los parámetros principales para el modelo son la velocidad promedio y el coeficiente de dispersión longitudinal que depende de condiciones propias del río. Si buscamos modelar una sustancia en particular, entonces esta ya juega un papel importante para el modelo; por ejemplo al emplearse la ecuación (4.48), la sustancia debe generar una reacción homogénea y de primer orden, lo

que conduciría a un estudio del tipo de sustancia que resultan de actividades de minería.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo se deduce y analiza la ecuación de advección-dispersión dada en (4.48) exhibiendo los parámetros claves del modelo que son la velocidad promedio y el coeficiente de dispersión longitudinal representado en (4.39). Esta ecuación considera tanto el espacio como el tiempo para estudiar la evolución de la concentración de sustancias cuyas reacciones son homogéneas y de primer orden. Además, se exponen condiciones necesarias para la aplicación de dicha ecuación. Aunque para deducir dicho modelo se deben hacer aproximaciones, diferentes artículos que sustentan su aplicación reflejan que los resultados de la ecuación tienen un alto grado de precisión con los datos reales.

Cuando se involucra el fenómeno de la turbulencia en el modelo surge un nuevo término que representa el flujo advectivo asociado a la turbulencia. Para continuar con la deducción de la ecuación se debe asumir que este término sigue el principio de la difusión representado por la primera ley de Fick como se hace en (4.23).

Teniendo en cuenta que los principales parámetros en el modelo son la velocidad promedio y el coeficiente de dispersión longitudinal, el trabajo centra la atención a este último por su importancia y lo que representa para el modelo y en el momento de su aplicación. Se presenta una solución analítica que es resultado del análisis realizado por Taylor, donde vemos que el coeficiente se puede calcular a partir de cantidades conocidas: profundidad media, ancho del río, velocidad media y la pendiente de la superficie mediante integración; considerándose las condiciones necesarias para la aplicación del modelo, las cuales son de mayor relevancia para este cálculo.

Encontrar valores para la velocidad promedio y para el coeficiente de dispersión longitudinal en el campo generan gastos considerables y más si lo hacemos en diferentes puntos de un río. Por esta razón, también se limitara al modelo en sus predicciones si consideramos valores constantes para estas cantidades cuando deseamos modelar un tramo extenso de un río no uniforme. Es claro que, analizar la variación de estos parámetros mejoraría la capacidad del modelo.

Debido a las irregularidades de los ríos, el coeficiente de dispersión longitudinal es tan solo una aproximación de un valor real. sin embargo, este considera y representa estas irregularidades en cualquier río calibrándose su valor como mejor se ajuste a las características y naturaleza del sistema. Aún así, se menciona que el modelo es incapaz de considerar zonas muertas que pueden estar presentes en el tramo del río modelado; para ello se han construido otros modelo que tienen como punto de partida el presentado en este trabajo.

Los parámetros mencionados son independientes de las sustancias contaminantes producidas en actividades de minería u otras. El papel que juegan estas sustancias en el modelo se ubican en el término agregado a la ecuación de advección-dispersión (4.48), que representa el tipo de reacción homogénea que produce la sustancia considerada. Lo anterior, resalta la importancia de analizar también los procesos de transformación para los contaminantes.

Bibliografía

- [1] E.-C. ANI, V. M. CRISTEA, AND P. S. AGACHI, *Mathematical models to support pollution counteraction in case of accidents.*, Environmental Engineering & Management Journal (EEMJ), 11 (2012).
- [2] T. M. APOSTOL, *Análisis matemático*, Reverté, 2020.
- [3] J. B. BOXALL, *Dispersion of solutes in sinuous open channel flows.*, PhD thesis, University of Sheffield, 2000.
- [4] S. C. CHAPRA, *Surface water-quality modeling*, Waveland press, 2008.
- [5] P. CHATWIN AND C. ALLEN, *Mathematical models of dispersion in rivers and estuaries*, Annual Review of Fluid Mechanics, 17 (1985), pp. 119–149.
- [6] CICLO HIDROLÓGICO.COM, www.ciclohidrologico.com/adveccin.
- [7] H. B. FISCHER, J. E. LIST, C. R. KOH, J. IMBERGER, AND N. H. BROOKS, *Mixing in inland and coastal waters*, Academic press, 1979.
- [8] J. KANTHAN, *The baia mare gold mine cyanide spill: Causes, impacts and liability*, 2000.
- [9] A. KUMAR, *Sustainability and gold mining in the developing world*, Journal of Cleaner Production, 14 (2006), pp. 315–323.
- [10] G. M. MUDD, *Resource consumption intensity and the sustainability of gold mining*, in Proceedings of the 2nd International Conference on Sustainability Engineering & Science, 2007.
- [11] MÉXICO MINERO, <https://mexicominero.org/ciencia/que-es-la-mineria/>.
- [12] L. A. OSORIO QUIROGA ET AL., *Un análisis sobre la turbulencia bidimensional*, (2019).
- [13] M. POTTER AND D. WIGGERT, *Mecánica de fluidos, 3ra*, Edición, Thomson Learning, México, (2007).

- [14] J. RÍOS, *Transporte de contaminantes en sistemas fluviales y evaluación de la aplicabilidad del modelo wasp en las cuencas de los ríos elqui y choapa, región de coquimbo, chile*, 2013.
- [15] S. SOCOLOFSKY AND G. JIRKA, *Special topics in mixing and transport processes in the environment. 2005*, Coastal and Ocean Engineering Division, Texas A&M University, TX, pp. 77843–3136.
- [16] J. THOMAS W, *The Ordinary Differential Equations Project*, 2021.
- [17] M. VAN DER PERK, *Soil and Water Contamination 2nd Edition (Special Sale Only): From Molecular to Catchment Scale*, CRC Press, 2013.
- [18] J. VOS AND R. BOELEN, *Ríos de oro: la exportacion del agua virtual y la responsibilidad social empresarial de las empresas mineras y agroexportadoras*, in *Mineria, agua y justicia social en los Andes: Experiencias comparativas de Perú y Bolivia*, no. 21, Instituto de Estudios Peruanos (IEP), 2014, pp. 203–229.