

UNIVERSIDAD DE SONORA
DIVISIÓN DE CIENCIAS EXACTAS Y
NATURALES

Departamento de Física

COMENTARIOS RELACIONADOS CON EL
TRANSPORTE DE MASA



Para obtener el grado académico:
LICENCIADO EN FISICA

Presenta:

ROMUALDO MAQUEDA GARCIA

Hermosillo, Sonora

Enero de 2021

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

Comité de revisión

Dr. Ramón Ochoa Landín

Dr. Temistocles Mendivil Reynoso

M.C. Enrique Troyo Vega

Dr. Luis Patricio Ramírez Rodríguez

Dedicatoria:

***A las personas que me han acompañado
Incondicionalmente en el proyecto de
Mi vida***

AGRADECIMIENTOS:

A la Universidad de Sonora

Mi Universidad por el tiempo que me cobijó y el amor con el que me permitió adquirir el conocimiento.

A mis profesores por la paciencia y el profesionalismo con el que me transmitieron sus enseñanzas.

A mis compañeros que me mostraron lo hermoso que es la vida.

A mi familia y amigos que sin ellos no habría yo vivido esta maravillosa experiencia de ser universitario.

Índice general

• Dedicatoria	3
• Agradecimientos	4
• Índice	5
• Introducción	6
Capítulo 1	
• Conceptos básicos	8
1.- Teoría fundamental	8
1.1 Ecuación de Boltzmann	8
1.2 Ecuación de transporte y el teorema de H	9
1.3 Ecuación de transporte de masa	11
• Notas sobre la atmósfera	13
Capítulo 2	
2.1 Calidad del aire	15
2.1.2 Transporte de contaminantes en aire	16
2.2 Calidad del agua	23
2.2.2 Descripción del modelo Streeter-Phelps	24
2.2.3 Comentarios sobre control de contaminación del aire y tratamiento De agua	31
2.3 Problema de Buckley-Leverett	33
Capítulo 3	
• Resultados	41
3.1 Dispersión de contaminantes en agua	41
3.2 Modelo Buckley-Leverett	48
• Conclusiones	
• Referencias	51
• Apéndice	53

INTRODUCCIÓN

Estudiar el comportamiento de contaminantes en las matrices ambientales: agua, suelo y aire es importante pues en los tiempos actuales estos fenómenos representan un riesgo para la salud humana y los ecosistemas en general.

La Organización mundial de la salud (OMS) define la salud en el ser humano como: Un estado completo de bienestar físico, mental y social [1]. Sin embargo, la actividad misma del humano y su necesidad de crecimiento económico y la urbanización están produciendo daños al aire y el agua al emitir contaminantes a la atmosfera y vaciar aguas residuales en ríos [2], y como consecuencia de lo anterior cada año en el mundo se registran millones de casos de enfermedades respiratorias en el hombre que tiene una relación causal directa con los contaminantes del aire [2].

Para poder llevar a cabo el análisis del transporte de esos contaminantes de utilizará un balance de masa y en particular y supondremos que el sistema se rige por la segunda ley de Fick. En el balance masa se puede aplicar a los fenómenos de difusión y dispersión de contaminantes en agua, suelo y aire. El análisis diferencial que se realiza en dichos sistemas tiene como consecuencia el uso de ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden.

El presente trabajo comienza con la teoría general de fenómenos de transporte desde el punto de vista de Boltzmann y también, desde la perspectiva macroscópica. Una vez contrastado dichas formas de apreciar a los fenómenos se enfocará en particularizar modelos de dispersión. El capítulo II comienza con el estudio de la dispersión de contaminantes en la matriz agua se describirá el modelo de Streeter-Phelps el cual se utiliza en los ríos y que utiliza dentro de sus conceptos el parámetro de oxígeno disuelto (OD), de hecho, cuando se resuelve la ecuación diferencial se tiene una expresión para el OD. Por otro lado, para el caso de la matriz aire se trabajará que las fuentes de contaminación se pueden describir como funciones delta de Dirac y como consecuencia tiene como solución que la concentración forma una Gaussiana. De hecho, el paquete ALOHA se basa en que las emisiones de pueden describir de esta manera. Finalmente, se examinará modelos de dispersión en medios porosos pero desde un enfoque de extracción, para ello se resolvieron las ecuaciones diferenciales pertinentes para el estudio del transporte de contaminantes mediante la transformada de Fourier y de Laplace.

Cabe comentar que el presente trabajo hace mención del origen de algunos contaminantes y una breve semblanza de su composición, así como los efectos en el ambiente. Por lo expuesto anteriormente el objetivo principal de esta tesis conocer el transporte de masa, en este caso contaminantes, en distintas matrices ambientales.

Capítulo 1

Conceptos básicos

1.- Teoría fundamental

En Física una de las ecuaciones diferenciales parciales más relevantes es la ecuación de onda la cual describe la propagación de la luz o bien una onda mecánica a través de un medio material. Cuando una onda se propaga lleva consigo, es decir, transporte energía, y es lo que en esta capítulo se desea discutir; el transporte de energía, masa y momento lineal.

Los fenómenos mencionados anteriormente el caso más simple se analizan con una ecuación diferencial parcial de primer orden en el tiempo y segunda en posición

$$\frac{\partial u}{\partial t} = b^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

Por otro lado, la Física involucrada en estos procesos son precisamente aquellos que se presenta en sistemas fuera de equilibrio, más aun, los fenómenos de transporte son como la naturaleza reacciona para buscar el equilibrio termodinámico. Este capítulo se basa de los textos de las referencias [3-6].

1.1 Ecuación de Boltzmann

Consideremos el gas ideal fuera de equilibrio y la describiremos utilizando una función de distribución de las moléculas. La función de distribución depende de la posición, momento y tiempo. El número de moléculas distribuidas en un elemento del espacio fase en el instante t [5-6],

$$dn = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d\mathbf{p}dV \quad (2)$$

$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ es la función de distribución de las moléculas. La variación del número de moléculas en el volumen se debe a las colisiones entre las moléculas, por lo que es posible decir que una cantidad de moléculas entra y otra sale del volumen en el espacio fase. Entonces, por conservación

$$\frac{df(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)d\mathbf{p}dV}{dt} = (b - a)d\mathbf{p}dV \quad (3)$$

$ad\mathbf{p}dV$ son las partículas que salen y $b d\mathbf{p}dV$ son las partículas que entran en el volumen. Utilizando la regla de la cadena

$$\frac{df(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial f}{\partial z} \frac{dz}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_x} \frac{dp_x}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_y} \frac{dp_y}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p_z} \frac{dp_z}{dt}$$

O bien,

$$\frac{df(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_r f \cdot \mathbf{v} + \nabla_p f \cdot \mathbf{F} = b - a = I \quad (4)$$

Donde I se llama termino de colisión.

1.2 Las ecuaciones de transporte y el teorema de H.

La entropía de un gas está dada por la expresión [5-6]

$$S = \int f \ln \frac{e}{f} d\tau \quad (5)$$

El teorema H de Boltzmann establece que la entropía debe tener un valor máximo cuando se alcance el equilibrio. Derivando con respecto al tiempo y utilizando el teorema de Leibnitz

$$\frac{dS}{dt} = \int \frac{\partial}{\partial t} \left(f \ln \frac{e}{f} \right) d\tau = \int \left[\frac{\partial}{\partial t} (f - f \ln f) \right] d\tau = - \int \frac{\partial f}{\partial t} \ln f d\tau$$

La ecuación de Boltzmann establece que

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_r f \cdot v + \nabla_p f \cdot F = I$$

De aquí,

$$\frac{dS}{dt} = - \int [-\nabla_r f \cdot v - \nabla_p f \cdot F + I] \ln f d\tau$$

Dividiremos en dos términos de tal manera que

$$\frac{dS}{dt} = - \int [-\nabla_r f \cdot v - \nabla_p f \cdot F] \ln f d\tau - \int \ln f I d\tau$$

Reescribiendo el primer término como

$$\frac{dS}{dt} = \int [\nabla_r f \cdot v + \nabla_p f \cdot F] f \ln \frac{f}{e} d\tau - \int \ln f I d\tau \quad (6)$$

El primer término es cero, debido al teorema de Gauss; por lo que nos queda que el cambio en la entropía se debe solo a las colisiones de las partículas del sistema

$$\frac{dS}{dt} = - \int \ln f I d\tau \quad (7)$$

La ecuación (6) cumple con la siguiente desigualdad

$$\frac{dS}{dt} \geq 0 \quad (8)$$

No se demostrará lo anterior, el primero que mostró la ecuación (7) fue Boltzmann y lo aplicó a gases y se le conoce como teorema H donde curiosamente denotó a la entropía con la letra H [5-6]. La interpretación de teorema H implica que en un fenómeno de transporte la entropía aumenta. Por otro lado, es posible obtener la ecuación de continuidad mediante la ecuación de Boltzmann [5-6]

1.3 Ecuación de transporte de masa

Uno de los principios básicos de la Física es que la masa se conserva, dicho hecho se escribe en una ecuación diferencial que se llama ecuación de continuidad [3-6]

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) = 0 \quad (9)$$

Si solo hay una componente se omite el subíndice. Si nos colocamos en centro de masa tenemos que

$$\mathbf{v} = \frac{\sum_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha}{\rho} \quad (10)$$

O sea que, si hacemos una sumatoria de todas las componentes del sistema, obtenemos la ecuación de continuidad

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

Pero, es más conveniente

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) = \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + (\mathbf{v}_\alpha \cdot \nabla) \rho_\alpha + \rho_\alpha (\nabla \cdot \mathbf{v}_\alpha) + \nabla \cdot [\rho_\alpha (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v})] = 0 \quad (11)$$

El flujo másico como se define en mecánica de fluidos es

$$\mathbf{j} = \rho \mathbf{v} \quad (12)$$

Y en este caso tendremos

$$\mathbf{j}_\alpha = \rho_\alpha(\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v})$$

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + (\mathbf{v}_\alpha \cdot \nabla) \rho_\alpha + \rho_\alpha(\nabla \cdot \mathbf{v}_\alpha) + \nabla \cdot [\rho_\alpha(\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v})] = \frac{d\rho_\alpha}{dt} + \rho_\alpha(\nabla \cdot \mathbf{v}_\alpha) + \nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha = 0$$

En los experimentos es más fácil hablar de la concentración de la sustancia en lugar de las densidades,

$$c_\alpha = \frac{\rho_\alpha}{\rho} \quad (13)$$

O sea

$$\frac{dc_\alpha}{dt} + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{j}_\alpha = 0 \quad (14)$$

En termodinámica se introduce el concepto de potencial químico μ y en el contexto del transporte podemos establecer que un sistema que no este en equilibrio químico, habrá un flujo de masa por lo que tomaremos que

$$\mathbf{j} = -\gamma \nabla \mu \quad (15)$$

Tomando un proceso isotérmico

$$\mathbf{j}_\alpha^{(M)} = -\gamma \left(\frac{\partial \mu}{\partial c_\alpha} \right)_{p,T} \nabla c_\alpha - \gamma \left(\frac{\partial \mu}{\partial p} \right)_{c_\alpha,T} \nabla p$$

Se ha propuesto entonces que la difusión se debe a dos causas, un gradiente de concentración y de presión; lo cual concuerda con el experimento. Definimos el coeficiente de difusión molecular y el de la presión como

$$D_\alpha = \frac{\gamma}{\rho} \left(\frac{\partial \mu}{\partial c_\alpha} \right)_{p,T} \quad (16)$$

$$\frac{k_p^{(\alpha)}}{p} = \frac{\gamma}{\rho D_\alpha} \left(\frac{\partial \mu}{\partial c_\alpha} \right)_{p,T} \quad (17)$$

Si $D_\alpha \gg \frac{k_p^{(\alpha)}}{p}$ entonces

$$\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla c_\alpha) - D_\alpha \nabla^2 c_\alpha = 0 \quad (18)$$

La última expresión se le llama segunda ley de Fick.

Notas sobre la atmosfera

La atmosfera que respiramos actualmente es el resultado de una serie de cambios e interacciones que han ocurrido en nuestro planeta, los estudios que han modelado esta evolución aseguran que la formación de la atmosfera terrestre se inició hace unos 4500 millones de años [7]. El estudio señala que nuestro planeta en sus inicios no contenía atmosfera, fue hasta que, con la erupción de volcanes, y el impacto múltiple de objetos provenientes del espacio ocurrió la liberación de gases como CO₂, H₂O, CH₄, N₂. Unido a estos fenómenos la tierra fue enfriándose lo que produjo la condensación del vapor de agua, el agua erosionó la tierra arrastrando sales, de esa forma se originó el océano primitivo. Los gases se mantuvieron en el espacio cercano debido al efecto del campo magnético de la tierra y la gravedad, para esta etapa todavía no existía oxígeno en la naciente atmosfera. El oxígeno aparece primero en los océanos por efecto de los organismos fotosintéticos y posteriormente es liberado para incorporarse a los otros gases liberados por la tierra. De esta manera se fueron acumulando estos gases alrededor de la tierra permaneciendo en los limites más cercanos los más pesados, y los ligeros se fueron acomodando por capas en regiones más alejadas rodeando el planeta, pero sin escapar del campo gravitacional de la tierra, es así como se dio la creación de la atmosfera terrestre con sus capas como son la troposfera,

estratosfera, mesosfera, ionosfera, exosfera, estas capas por la característica de su composición sirven a la tierra como protección [8].

La atmosfera protege la tierra de la radiación dañina que proviene del sol como los rayos gama y ultravioleta, también la protege de objetos en el espacio como asteroides que pueden impactar la tierra, también sirve para mantener la temperatura del planeta aproximadamente estable, es por es por una de las capas de la atmosfera (la ionosfera) que es posible el viaje de las ondas que llevan la información de las telecomunicaciones, en fin sin la atmosfera no existiría vida en nuestro planeta [1].

Capítulo 2

Fenómenos de transporte en aire y agua

2.1 Calidad en aire.

Ahora que ya tenemos una idea general de lo que es la atmósfera terrestre, concentraremos nuestra atención en la troposfera que es la capa que tiene contacto con la superficie de la tierra, y es donde se encuentra el aire que respiramos, en esta tienen lugar todos los fenómenos meteorológicos y permite la regulación de la temperatura del planeta [8].

Los componentes principales del aire que respiramos son: 78% nitrógeno, 21% oxígeno, y 1% restante de gases como Ar, CO₂, Ne, vapor de agua, He, CH₄, entre otros. Esta composición del aire es lo que se necesita para la existencia de la vida del ser humano y la naturaleza en general y es lo que podríamos definir como aire de calidad, es decir el aire de calidad es aquel que no representa un riesgo para la salud humana y los ecosistemas [7].

Sin embargo, a pesar de la importancia de la calidad del aire para la vida en nuestro planeta, aparece el fenómeno de la contaminación, que puede ser de origen natural o artificial, el artificial se debe a la actividad del ser humano, es decir el aire pierde su calidad debido a la aparición de moléculas contaminantes en su composición [9].

El término contaminación del aire se refiere a la introducción de cualquier agente químico, físico o biológico cuya acumulación tiene efectos nocivos en la salud del ser humano y los ecosistemas de la tierra [7].

El deterioro de la calidad del aire hizo necesario la celebración de diferentes convenciones internacionales, por ejemplo 1889 se efectuó la convención internacional para la prohibición de armas químicas sin embargo estos acuerdos fueron violados durante la primera y segunda guerra mundial, de ahí hasta 1997 se celebró la primera conferencia sobre el ambiente humano por la Organización de las Naciones Unidas donde se invita a las naciones limitar la emisión de químicos tóxicos al ambiente, más tarde se creó la Comisión Mundial de Ambiente y desarrollo, se aprobó el convenio de Viena para la protección de la capa de ozono,

y así fueron apareciendo organismos como La Organización Meteorológica Mundial (OMM), Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente (PNUMA), Comité Internacional de Negociación para la Convención Marco sobre el Cambio Climático (CIN/CMCC), Agencia de protección Ambiental (EPA) [2].

Los principales agentes contaminantes de aire son Monóxido de Carbono (CO), Óxidos de Nitrógeno (NO, NO₂, NO_x), Dióxido de Azufre (SO₂), Compuestos Orgánicos Volátiles (COV), que son hidrocarburos en estado gaseoso, Material particulado (PM). Pueden ser las PM₁₀ partículas inhalables con un diámetro aproximado de 10 micrómetros, PM_{2.5} partículas inhalables finas con diámetro aproximado de 2.5 micrómetros, estos tipos de partículas contienen solidos microscópicos y gotas liquidas que al ser inhaladas provocan problemas de salud, pueden estar contenidas en el polvo, suciedad, hollín, humo entre otras formas [1].

A estas moléculas contaminantes es que aplicaremos el estudio de transporte por difusión llamado transporte de Fick, o más comúnmente considerado como difusión molecular [10].

2.1.1 Transporte de contaminantes en aire.

En esta sección se describirá el modelo para analizar el transporte de un contaminante en aire mediante el uso del balance de masa y se utilizará el concepto de la función Delta de Dirac, entonces

$$\frac{\partial c_{\alpha}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla c_{\alpha}) - D_{\alpha} \nabla^2 c_{\alpha} = 0 \quad (1)$$

Es una ecuación de segundo orden lineal y en el lado derecho se agregará la fuente de contaminante que en este caso es una chimenea

$$\frac{\partial c_{\alpha}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla c_{\alpha}) - D_{\alpha} \nabla^2 c_{\alpha} = R \quad (2)$$

Siendo R reacciones químicas. El sistema es de dos fases (contaminante-aire) y nos enfocaremos al estudio del contaminante. A continuación, se resolverá la ecuación de transporte de masa mediante la transformada de Fourier en una dimensión, con viento y sin reacciones químicas; como se habla del contaminante se omitirá el subíndice α . Con fines de cálculo se desarrollará primero en una dimensión sin velocidad y después con velocidad, el presente cálculo se basa en la tesis de [11].

La ecuación diferencial que describe el caso más simple es

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} \quad (3)$$

Esta ecuación la resolveremos aplicando la transformada de Fourier, a saber, $c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{c}(k, t) e^{ikx} dx$ así como utilizando las siguientes condiciones iniciales y de frontera

$$c(x, 0) = \frac{m}{A} \delta(x - x_0)$$

$$c(\pm\infty, t) = 0$$

Se obtiene

$$c(x, t) = \frac{m}{A\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4Dt}} \quad (4)$$

Siendo A el área por donde se emite el contaminante y, m la masa del contaminante. La ecuación (4) es una Gaussiana y por esta razón al modelo utilizado se le llama modelo Gaussiano. El desarrollo completo está en el apéndice B del presente trabajo. Sin embargo, la expresión (4) este resultado no incluye efectos del viento y para ello se plantea la ecuación diferencial parcial que considere este fenómeno, es decir,

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} - u \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} \quad (5)$$

Para obtener el comportamiento de la concentración del contaminante se hace el siguiente cambio de variable $\varepsilon = x - ut$ y al usar de nuevo la transformada de Fourier, se obtiene

$$c(x, t) = \frac{m}{A\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}} \quad (6)$$

El modelo Gaussiano tiene limitantes, pero también una gran utilidad para el estudio del impacto ambiental. Un caso importante se presenta cuando se emite contaminantes en una fila de autos; y esto se hace solo una superposición o bien se puede describir como si fuera una fuente lineal o de área. Para resolver esta problemática sólo debemos de cambiar las condiciones iniciales, a saber,

$$c(x, 0) = \frac{m}{A(b-a)}; a \leq x \leq b$$

Y se puede utilizar la hipótesis de la mecánica del medio continuo y el principio de superposición y obtener que para este caso

$$c(x, t) = \int_a^b \frac{m dx'}{A(b-a)\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x'-ut)^2}{4Dt}} = \frac{m}{A(b-a)\sqrt{4\pi Dt}} \int_a^b dx' e^{-\frac{(x'-ut)^2}{4Dt}}$$

Para realizar esta integral se dividirá en regiones

$$c(x, t) = \frac{m}{A(b-a)\sqrt{4\pi Dt}} \left\{ \int_a^0 dx' e^{-\frac{(x'-ut)^2}{4Dt}} + \int_0^b dx' e^{-\frac{(x'-ut)^2}{4Dt}} \right\}$$

Usando la función error,

$$c(x, t) = \frac{m}{2A(b-a)\sqrt{4\pi Dt}} \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{x-a-ut}{\sqrt{4Dt}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{x-b-ut}{\sqrt{4Dt}} \right] \right\} \quad (7)$$

El siguiente caso a analizar es cuando existe una variación en el flujo emitido, por lo que m ahora es $\frac{dm}{dt}$ y se distribuye de forma homogénea en un área fija. Utilizaremos de nuevo la hipótesis de la mecánica del medio continuo y el principio de superposición la cantidad de concentración emitida al tiempo T es

$$dc(x, t) = \frac{\frac{dm}{dt} dt}{A\sqrt{4\pi D(t-T)}} e^{-\frac{x^2}{4D(t-T)}}$$

O bien,

$$c(x, t) = \int_0^t \frac{\frac{dm}{dt} dt}{A\sqrt{4\pi D(t-T)}} e^{-\frac{x^2}{4D(t-T)}} \quad (8)$$

En resumen, se puede generalizar en varias dimensiones como se muestra en la tabla.

Caso	Solución
1D sin viento.	$c(x, t) = \frac{m}{A\sqrt{4\pi Dt}} c_0 e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$
1D con viento.	$c(x, t) = \frac{m}{A\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}}$
1D con viento (fuente de área)	$c(x, t) = \frac{m}{2A(b-a)\sqrt{4\pi Dt}} \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{x-a-ut}{\sqrt{4Dt}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{x-b-ut}{\sqrt{4Dt}} \right] \right\}$
2D con viento	$c(x, y, t) = \frac{m}{A4\pi Dt} e^{-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}} e^{-\frac{(y-vt)^2}{4Dt}}$
3D con viento	$c(x, y, z, t) = \frac{m}{A(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}} e^{-\frac{(y-vt)^2}{4Dt}} e^{-\frac{(z-H)^2}{4Dt}}$

Si el sistema a considerar está en dos dimensiones, esto implica que la ecuación a resolver es

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} + D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} \quad (9)$$

Cuya solución mediante el uso de la transformada de Fourier es

$$c(x, y, t) = \frac{m}{A4\pi Dt} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} e^{-\frac{y^2}{4Dt}} \quad (10)$$

De forma análoga se hacen dos cambios de variable e la forma $\varepsilon = x - ut$ y $\delta = y - vt$ para obtener

$$c(x, y, t) = \frac{m}{A4\pi Dt} e^{-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}} e^{-\frac{(y-vt)^2}{4Dt}}$$

Haciendo un poco de estadística y como el comportamiento de los sistemas discretos con anterioridad tenemos

$$\sigma = \sqrt{2Dt} \quad (11)$$

Y con ello

$$c(x, z, t) = \frac{c_0}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} e^{-\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{(y-vt)^2}{2\sigma_y^2}} e^{-\frac{(y-H)^2}{2\sigma_z^2}} \quad (12)$$

Si tenemos el caso de una región con varias chimeneas, entonces, se puede modelar cada chimenea como una función delta de Dirac y con ello:

$$c(x, y, z, t) = \sum_{i=1}^n \frac{c_i}{(2\pi)^{3/2} \sigma_{xi} \sigma_{yi} \sigma_{zi}} e^{-\frac{(x-x_i-ut)^2}{2\sigma_{xi}^2}} e^{-\frac{(y-y_i-vt)^2}{2\sigma_{yi}^2}} e^{-\frac{(z-H_i)^2}{2\sigma_{zi}^2}} \quad (13)$$

Para poder utilizar las ideas anteriores se apoyan en datos experimentales que consideran la velocidad del viento y condiciones termodinámicas, a continuación, se muestran tablas que se utilizaron para estudiar los fenómenos asociados a la calidad del aire ya que se busca además poder hacer un control del mismo.

Grado de aislamiento en nubes

Velocidad del viento en (m/s) a una elevación de 10 metros	Grado de aislamiento			Ligeramente nublado o más del 50% de nubes bajas	Menos del 50% de cobertura de nubes
	Fuerte	Moderado	Ligero		
< 2	A	A-B	B	G	G
2 – 3	A-B	B	C	E	F
3 – 5	B	B-C	D	D	E
5 – 6	C	C-D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

Fuente: Turner (1994) y Pasquill (1961), Turner (1989). Agrega las siguientes notas o selecciona la categoría.

1. Un aislamiento fuerte corresponde al medio día soleado en pleno verano en Inglaterra, un aislamiento ligero a una condición similar en pleno invierno.
2. Noche se refiere al periodo de 1 hora antes del atardecer hasta 1 hora después del amanecer.
3. También se debe utilizar la categoría neutral D independientemente de la velocidad del viento, para condiciones nublados durante el día o la noche para cualquier cielo durante una hora anterior o posterior a la noche, según se define en la nota 2

Parámetro de dispersión urbana

Tipo de estabilidad Pasquill	σ_y (en metros)	σ_z (en metros)
A-B	$0.32/(0.0004X)^{-0.5}$	$0.24/(0.001X)^{0.5}$
C	$0.22/(0.0004X)^{-0.5}$	0.20X
D	$0.16/(0.0004X)^{-0.5}$	$0.14/(0.0003X)^{-0.5}$
E-F	$0.11/(0.0004X)^{-0.5}$	$0.08/(0.0015X)^{-0.5}$

Para distancias entre 100 y 10,000 metros

Fuente: Turner (1994), Briggs (1972), McElroy, Pooler (1968)

2.2 Transporte de contaminantes en agua.

2.2.1 Calidad del agua.

El concepto calidad de agua implica, conocer las características físicas, químicas y biológicas del cuerpo de agua, esto se hace por lo general comparando esas características con un modelo estándar que contiene información sobre la concentración del oxígeno disuelto, el pH, conductividad eléctrica entre otras[15].

Cuando se habla de oxígeno disuelto OD en agua se refiere a la cantidad de oxígeno por unidad de volumen, es decir la concentración de oxígeno dado en mg/l, los valores normales para el agua de calidad están en el rango de 7.0 a 8.0 mg/l. El OD es una de las principales variables usadas para determinar la calidad del agua [15].

Otro aspecto importante es el porcentaje de saturación, cuando se habla de saturación nos referimos a la cantidad de oxígeno existente en el agua a una temperatura dada. El contenido de oxígeno disuelto depende de la actividad física, biológica o química del agua, por ejemplo, en agua pura a temperatura ambiente el oxígeno se disuelve a una concentración aproximada de 8.5 mg/l. Por todo esto se puede decir que el OD es clave para determinar la calidad y contaminación de los cuerpos de agua [16].

Otras características útiles para definir la calidad del agua es el pH y la conductividad eléctrica, sin embargo, este trabajo se enfoca en el comportamiento del OD por medio del modelo Streeter-Phelps [16].

Para fines de una evaluación de la afectación provocada por la contaminación existen índices de calidad del agua, en México se utiliza el (ICA), que es un parámetro utilizado para medir la demanda bioquímica del oxígeno (DBO), (OD), coliformes, fosfatos, pH, sólidos suspendidos etc. [15-16].

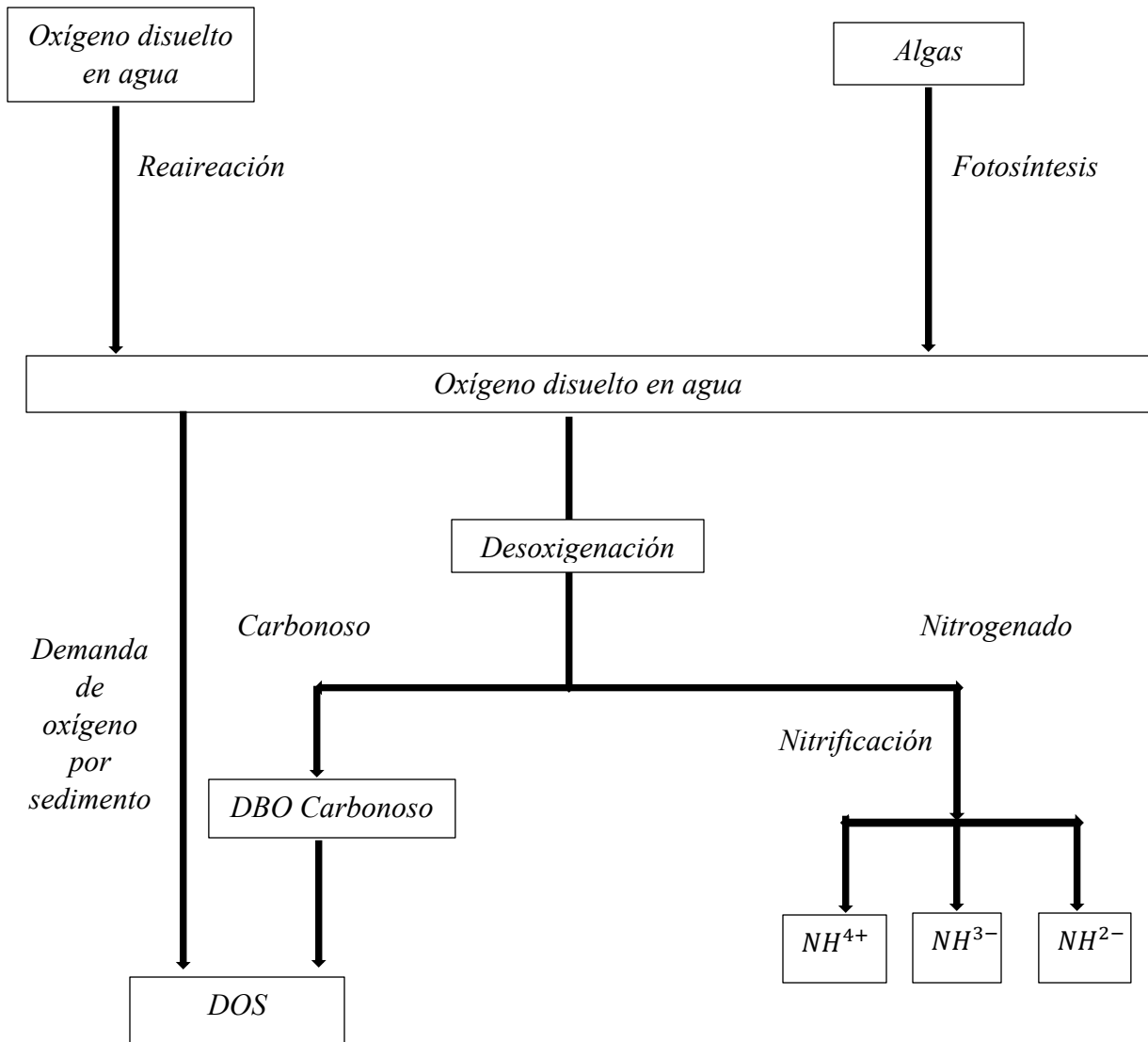
2.2.2 Descripción del modelo de Streeter-Phelps.

Uno de los modelos que se ha utilizado desde hace décadas se llama modelo de Streeter-Phelps y relaciona los principales mecanismos que regulan el OD en un cauce de agua superficial que recibe la descarga de aguas residuales, este modelo ha sido adoptado tanto para fuentes puntuales como para fuentes difusas [17].

La forma inicial del modelo de Streeter y Phelps fue propuesta para estudiar el proceso de oxidación y aireación en el río Ohio en los Estados Unidos, posteriormente otras versiones del modelo consideraron los procesos de fotosíntesis, respiración y demanda del oxígeno [17]. Sin embargo, la composición natural de los cuerpos de agua, se pueden alterar por actividades humanas: agrícolas, ganaderas e industriales, principalmente por recibir en su cauce aguas residuales, o también debido al paso de las aguas por terrenos tratados por productos químicos o cualquier contaminante, estas incorporaciones degradan la calidad del agua provocando su contaminación [18].

El presente estudio se centra sobre contaminación de cuerpos de agua de los ríos provocada por la descarga de aguas residuales, donde aplicaremos el modelo Streeter-Phelps que considera el OD como una variable dinámica para estudiar la calidad del agua, y es el oxígeno disuelto OD que aparecerá como nuestra variable de interés en el planeamiento de la ecuación modelo [17].

Representación conceptual del flujo de oxígeno en un volumen de control[19]



El comportamiento de la DBO en el tiempo es un sistema tipo batch se comporta como un sistema de primer orden, por lo que si definimos L a la cantidad de masa orgánica oxidable entonces[20-21]

$$L = L_o e^{-k_1 t} \quad (1)$$

Y por ello la DBO es

$$DBO = L_o(1 - e^{-k_1 t}) \quad (2)$$

Si analizamos ahora la masa del oxígeno podemos decir que se debe a la DBO su variación, a saber,

$$O = O_0 - L_o(1 - e^{-k_1 t}) \quad (3)$$

Si se hace un análisis de masa incluyendo el transporte de la DBO en un río tenemos

$$\frac{\partial L}{\partial t} = -u \frac{\partial L}{\partial x} - k_r L \quad (4)$$

Otra propiedad de la naturaleza el aire puede lograr “entrar” al agua hasta alcanzar el equilibrio, la constante de equilibrio se llama constante de Henry que para el O_2 a 20 °C es 32.2 y cuando ocurre esto se ha saturado. La variación temporal del cómo llega al equilibrio se puede modelar como [20]

$$\frac{dO}{dt} = k_a(O_s - O) \quad (5)$$

Y su solución es

$$O = O_s(1 - e^{-k_a t}) \quad (6)$$

Siendo k_a una velocidad de reareación. De lo expuesto anteriormente y si nos enfocamos en la masa del oxígeno en un río, tenemos

$$\frac{dO}{dt} = -k_d L + k_a(O_s - O)$$

Y definiremos el déficit oxígeno disuelto como,

$$D = O_s - O \quad (7)$$

La ecuación diferencial que describe el modelo de Streeter-Phelps es [22]

$$\frac{dD}{dt} = -k_d L + k_a D \quad (8)$$

Y se resolverá mediante la transformada de Laplace, o sea,

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = F(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad (9)$$

Decimos que la transformada de Laplace es una aplicación lineal cuando se cumple que:

$$\mathcal{L}\{A + B\} = \mathcal{L}\{A\} + \mathcal{L}\{B\} \quad (10)$$

Donde A y B son espacios vectoriales y c es una constante que pertenece a un campo, por lo tanto, la ecuación diferencial que deberemos resolver es

$$\frac{dD}{dt} = k_d l_0 e^{-k_d t} D - k_r D \quad (11)$$

Ahora Aplicamos la transformada de Laplace:

$$\mathcal{L}\left\{\frac{dD}{dt}\right\} = \mathcal{L}\{k_d L_0 e^{-k_d t} - k_r D\} \quad (12)$$

Ahora por la propiedad de linealidad:

$$\mathcal{L}\left\{\frac{dD}{dt}\right\} = k_d L_0 \mathcal{L}\{e^{-k_d t}\} - k_r \mathcal{L}\{D\} \quad (13)$$

Si trabajamos el lado derecho usando la tabla 1 (13), el primer término del lado derecho es la ecuación (2) de esa tabla. Y por último $\mathcal{L}\{D\} = F\{s\}$ queda:

$$s F(s) - D_0 = \frac{k_d L_0}{s + k_d} - k_r F(s) \quad (14)$$

Reagrupamos y factorizamos

$$F(s) [s + k_r] = \left[\frac{k_d L_0}{s + k_d} + D_0 \right] \frac{1}{s + k_r}$$

Despejamos $F(s)$ y nos queda:

$$F(s) = \frac{k_d L_0}{(s + k_d)(s + k_r)} + \frac{D_0}{s + k_r} \quad (15)$$

Es de observar que la ecuación (15) es la solución a la ecuación diferencial en el espacio de Laplace, pero no perdamos de vista que estamos interesados en obtener el déficit de oxígeno, para ello escribimos nuevamente para facilitarnos la aplicación de la transformada de Laplace inversa. El primer término de la ecuación usando fracciones parciales queda:

$$\frac{k_d L_0}{(s + k_d)(s + k_r)} = \frac{A}{s + k_r} + \frac{B}{s + k_d} \quad (16)$$

Efectuemos algunas operaciones:

$$\frac{A(s + k_d) + B(s + k_r)}{(s + k_d)(s + k_r)} = \frac{s(A + B) + Ak_d + Bk_r}{(s + k_d)(s + k_r)}$$

$$A + B = 0 \quad \rightarrow \quad A = -B$$

$$Ak_d + (-A)k_r = k_d L_0$$

$$A(k_r - k_d) = k_d L_0$$

$$A = \frac{k_d L_0}{k_r - k_d} \quad (17)$$

$$B = -\frac{k_d L_0}{k_r - k_d} \quad (18)$$

Ahora utilizando estas expresiones encontramos que $F(s)$ queda de la manera siguiente:

$$F(s) = \frac{k_d L_0}{k_r - k_d} \frac{1}{s + k_d} - \frac{k_d L_0}{k_r - k_d} \frac{1}{s + k_r} + \frac{D_0}{s + k_r} \quad (19)$$

Aplicando la transformada inversa de Laplace queda de la siguiente manera:

$$D(t) = \mathcal{L}^{-1}\{F(s)\} = \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{k_d L_0}{k_r - k_d} \frac{1}{s + k_d} - \frac{k_d L_0}{k_r - k_d} \frac{1}{s + k_r} + \frac{D_0}{s + k_r}\right\} \quad (20)$$

Puesto que sabemos que es lineal obtenemos:

$$D(t) = \frac{k_d L_0}{k_r - k_d} \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{s + k_d}\right\} - \frac{k_d L_0}{k_r - k_d} \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{1}{s + k_r}\right\} + \mathcal{L}^{-1}\left\{\frac{D_0}{s + k_r}\right\}$$

Utilizando la tabla de soluciones finalmente se obtiene la expresión para el OD, representado por la función:

$$D(t) = \frac{k_d L_0}{k_r - k_d} (e^{-k_d t} - e^{-k_r t}) + D_0 e^{-k_r t} \quad (21)$$

Cabe comentar que los puntos de inflexión en el sistema son

$$D(t) = \frac{k_d L_0}{k_r - k_d} (e^{-k_d t} - e^{-k_r t}) + D_0 e^{-k_r t} \quad (22)$$

$$x_{min} = \frac{1}{k_r - k_d} \ln \left\{ -\frac{1}{k_d} \left[\frac{D_0 k_r}{k_d L_0} (k_r - k_d) - k_r \right] \right\} \quad (23)$$

Por otro lado, es posible, agregar otro fenómeno en el estudio de la calidad del agua, conocido como nitrificación e incluirlo en el modelo que se introduce.

$$\frac{dD}{dx} = \frac{k_d}{v_x} L_0 e^{-k_r \frac{x}{v_x}} - \frac{k_a}{v_x} D + \frac{k_N}{v_x} L_{0N} e^{-k_N \frac{x}{v_x}} \quad (24)$$

Donde $L_{0N}=4.33T_{KN}$, T_{KN} es una medida de todo el oxígeno oxidable [20] y la solución es entonces.

$$D(x) = \frac{k_d L_0}{k_a - k_r} \left(e^{-k_r \frac{x}{v_x}} - e^{-k_a \frac{x}{v_x}} \right) + D_0 e^{-k_a \frac{x}{v_x}} + \frac{k_N L_{0N}}{k_a - k_N} \left(e^{-k_N \frac{x}{v_x}} - e^{-k_a \frac{x}{v_x}} \right) \quad (25)$$

2.2.3 Comentarios sobre control de contaminación del aire y tratamiento de agua.

El principio de la conservación de la masa, energía y las leyes de Newton son la base para describir una gran cantidad tanto de fenómenos y, son referente para el análisis de problemas de distinto índole.

La sedimentación se puede describir como un efecto debido al campo gravitacional sobre partículas que están en un fluido y por cuestiones prácticas se ha clasificado en tres regiones a la sedimentación: discreta, por floculación y por zonas.

La sedimentación discreta el tamaño, forma y densidades no cambian; no es el caso de sedimentación con floculación donde los sólidos cambian las propiedades antes mencionadas. Cabe comentar que en un río los sólidos eventualmente pueden lograr a convertirse en parte del cuerpo de agua en la parte inferior y el problema es que los contaminantes se almacenan en los sedimentos.

Por lo anteriormente expuesto, es importante que se analice los sedimentos para la búsqueda de contaminantes, así como la norma mexicana solicita para realizar un estudio de calidad de agua.

De hecho, dentro de las operaciones que se utilizan en el tratamiento de agua es el uso de un sedimentador, flotación, clarificadores, absorbedores, intercambio iónico, ósmosis inversa,

electrocoagulación entre otros. En el caso del control de contaminación de aire algunas de las operaciones son ciclones, precipitadores electrostáticos, filtros(bolsas), depurador (scrubers), entre otros. Las ecuaciones de diseño de muchas de las operaciones se basa en el balance de masa, energía, teoría cinética y las leyes de Newton.

Algunas operaciones para el tratamiento de agua.

Operación	Uso
Cribado	Reduce el tamaño de partículas
Sedimentador primario (clarificador).	Remueve partículas que caen por acción del campo gravitacional.
Floculación.	Utilizando agitadores promueve la formación de películas más grandes (flóculos)para que se asienten más fácilmente.
Sedimentador secundario.	Promueve la formulación de flóculos al modificar el flujo.
Filtrado	Eliminar flóculos o partículas que no pueden eliminar por sedimentación
Aeración	Para aguas subterráneas y se utiliza para eliminar exceso de gases.
Floculación y precipitación	Para aguas subterráneas se agrega agentes que provocan la separación del calcio y magnesio del agua.

Algunas operaciones para el control de contaminación del aire.

Operación	Uso
Ciclones	Remueve partículas de cierto tamaño que por lo general son mayores a 10 μm de diámetro hidráulico.

Bolsas	Colectar polvo.
Lavadores	Remueve partículas de igual o menor que $10 \mu m$ de diámetro hidráulico.
Absorbedores	Remueve bajas concentraciones de gases y vapores.

2.3 Problema de Buckley-Leverett

Se entiende por reservorio un espacio geológico limitado que contiene hidrocarburos y en la ingeniería petrolera la extracción y recuperación de hidrocarburos es uno de los problemas más importantes; por tanto, el desplazamiento de aceite por agentes externos se ha estudiado durante varios años. Entre las propiedades importantes del aceite se encuentra la composición elemental: Carbono (84-87%), Hidrógeno (11-14%), Oxígeno (0.1 y 0.5%), Nitrógeno (0.2-2%), Azufre (0.5-6%) y metales (0-0,1%). Un parámetro que se utiliza en la extracción y refinación de petróleo crudo es el API [25].

Describir el desplazamiento de un fluido debido a otro es importante para recuperar petróleo, ya que, es necesario utilizar estrategias para extraer el crudo. De hecho, cuando la diferencia de presión del yacimiento en condiciones naturales se extrae el crudo se llama recuperación primaria. Recuperación secundaria es cuando se introduce agua o gas y, finalmente terciaria cuando se utiliza microorganismos, surfactantes entre otros.

Uno de los modelos más sencillos se conoce como el problema de Buckley-Leverett y consiste en estudiar un sistema de dos fases inmiscibles, el fluido es incompresible, la porosidad no cambia con el tiempo ni con la presión y el sistema está saturado. Antes de adentrarnos al sistema de dos fases inmiscibles, se definirá los sistemas de una fase, es decir, en este caso un fluido en un medio poroso. La ecuación de continuidad es

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho\vec{u}] = q \quad (26)$$

ρ es la densidad del fluido, ε es la porosidad del medio, \vec{u} se le conoce como velocidad de Darcy y, q son las posibles fuentes o sumideros de masa. La velocidad de Darcy represente el momento, de aquí

$$\vec{u} = -\frac{k}{\mu}(\nabla p - \rho g \nabla z) \quad (27)$$

μ es la viscosidad de fluido y k es la permeabilidad absoluta. El termino de permeabilidad establece una medida de la facilidad de que tiene el medio en dejar que el fluido se transporte. Sustituyendo la ecuación constitutiva de la ley de Darcy en la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\rho \frac{k}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right] = q \quad (28)$$

Por otro lado, así como se habla de la compresibilidad de un fluido c_f también puede hacerse en términos de rocas c_R , a saber,

$$c_f = -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p} \Big|_T = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \Big|_T \quad (29)$$

$$c_R = \frac{1}{\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dp} \quad (30)$$

Si consideramos que las compresibilidades son constantes para ciertos valores de presión entonces,

$$\begin{aligned}\rho &= \rho^o e^{c_f(p-p^o)} \\ \varepsilon &= \varepsilon^o e^{c_R(p-p^o)}\end{aligned}\quad (31)$$

Haciendo un desarrollo en serie para considerar que son sistemas ligeramente compresibles

$$\begin{aligned}\rho &= \rho^o [1 + c_f(p - p^o)] \\ \varepsilon &= \varepsilon^o [1 + c_R(p - p^o)]\end{aligned}\quad (32)$$

En este caso, la ley de conservación de masa

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\rho \frac{k}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right] = \left(\varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial p} + \rho \frac{d\varepsilon}{dp} \right) \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\rho \frac{k}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right] = q \quad (33)$$

En término de la compresibilidad,

$$\rho(\varepsilon c_f + \varepsilon^o c_R) \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\rho \frac{k}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right] = q \quad (34)$$

Observando la simetría que tiene el lado izquierdo, se define la compresibilidad total como

$$c_t = c_f + \frac{\varepsilon^o}{\varepsilon} c_R \quad (35)$$

$$\rho \varepsilon c_t \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\rho \frac{k}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right] = q \quad (36)$$

La ecuación anterior se resuelve para la presión para el caso en cuestión. Mas aun el siguiente caso a analizar es el de un gas y por experiencia este tipo de fluido no es compresible ni ligeramente y esto provoca que la expresión a estudiar es

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\rho \frac{k}{\mu} (\nabla p - \rho g \nabla z) \right] = q \quad (37)$$

Pero tomaremos el caso de que el gas se pueda modelar como un gas ideal, a saber,

$$\rho = \frac{pW}{ZRT} \quad (38)$$

Sustituyendo en la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial(\varepsilon \frac{pW}{ZRT})}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\frac{pW}{ZRT} \frac{k}{\mu} (\nabla p - \frac{pW}{ZRT} g \nabla z) \right] = q \quad (39)$$

Eliminaremos el término del campo gravitacional porque por la experiencia el término relevante es el cambio de presión

$$\frac{\varepsilon}{k} \frac{\partial(\frac{p}{Z})}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\frac{p}{\mu Z} \nabla p \right] = \frac{RT}{Wk} q \quad (40)$$

Luego,

$$\frac{2\varepsilon\mu Z}{k} \frac{\partial(\frac{p}{Z})}{\partial t} - \nabla^2 p - 2pZ \frac{d}{dp} \left(\frac{1}{Z} \right) |\nabla p|^2 = \frac{2\mu ZRT}{Wk} q \quad (41)$$

Por ser gas ideal,

$$c_g = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial p} \Big|_T = \frac{1}{p} - \frac{1}{Z} \frac{dZ}{dp} \quad (42)$$

$$\frac{\partial(\frac{p}{Z})}{\partial t} = \frac{c_g p}{Z} \frac{\partial p}{\partial t}$$

Reescribiendo la expresión

$$\frac{\varepsilon\mu c_g}{k} \frac{\partial p^2}{\partial t} - \nabla^2 p^2 = \frac{2\mu ZRT}{Wk} q \quad (43)$$

A continuación, se explicará un sistema de dos fases inmiscibles y, en este caso son agua y aceite en un medio poroso. Por lo general, se denota como la letra w refiriéndose a el agua que es la parte húmeda o mojada; por otro lado, a la no mojada se le denotará con la letra n para indicar que es el aceite. Una relación que debe de cumplirse siempre en un sistema de dos fases es que la suma algebraica de las saturaciones de la fase mojada y no mojada es 1. La saturación se refiere a la relación del volumen del poro llenado por una fase.

$$S_w + S_n = 1 \quad (44)$$

Otro parámetro muy útil es la de presión capilar que se define como la diferencia entre la presión no mojada y la mojada

$$p_c = p_n - p_w \quad (45)$$

La ecuación de Darcy para un sistema multifásico se expresa como

$$\vec{u}_\alpha = -\frac{k}{\mu_\alpha} k_{r\alpha} (\nabla p_\alpha - \rho_\alpha g \nabla z) \quad (46)$$

Donde el α especifica la fase en cuestión. Las ecuaciones de continuidad para las fases mojada y no mojada son [25-28]

$$\frac{\partial \rho_w \varepsilon S_w}{\partial t} - \nabla \cdot [\rho_w k \lambda^w \nabla p_w] = 0 \quad (47)$$

$$\frac{\partial \rho_n \varepsilon S_n}{\partial t} - \nabla \cdot [\rho_n k \lambda^n \nabla p_n] = 0 \quad (48)$$

Donde hemos usado la notación utilizada por M. Diaz-Viera [28]

$$\lambda^\alpha = \frac{k_{r\alpha}}{\mu_\alpha} \quad (49)$$

Dividiendo cada ecuación con su respectiva densidad de masa y sumando las ecuaciones obtenemos

$$\frac{\partial \rho_w \varepsilon S_w}{\rho_w \partial t} - \frac{1}{\rho_w} \nabla \cdot [\rho_w k \lambda^w \nabla p_w] + \frac{\partial \rho_n \varepsilon S_n}{\rho_n \partial t} - \frac{1}{\rho_n} \nabla \cdot [\rho_n k \lambda^n \nabla p_n] = 0 \quad (50)$$

De aquí

$$\varepsilon \frac{\partial S_w}{\partial t} + S_w \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\varepsilon S_w}{\rho_w} \frac{\partial \rho_w}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial S_n}{\partial t} + S_n \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\varepsilon S_n}{\rho_n} \frac{\partial \rho_n}{\partial t} - \frac{1}{\rho_w} \nabla \cdot [\rho_w k \lambda^w \nabla p_w] - \frac{1}{\rho_n} \nabla \cdot [\rho_n k \lambda^n \nabla p_n] = 0 \quad (51)$$

Usando la expresión (44)

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\varepsilon S_w}{\rho_w} \frac{\partial \rho_w}{\partial t} + \frac{\varepsilon S_n}{\rho_n} \frac{\partial \rho_n}{\partial t} - \frac{1}{\rho_w} \nabla \cdot [\rho_w k \lambda^w \nabla p_w] - \frac{1}{\rho_n} \nabla \cdot [\rho_n k \lambda^n \nabla p_n] = 0 \quad (52)$$

Si la porosidad no varía en el tiempo y si las fases son no compresibles, se obtiene

$$\nabla \cdot [k\lambda^w \nabla p_w] + \nabla \cdot [k\lambda^n \nabla p_n] = 0 \quad (53)$$

Podemos utilizar la presión capilar, la misma variable que depende de la saturación S_w , como $p_c = p_n - p_w$, entonces

$$\nabla \cdot [\lambda^w k \nabla p_c] - \nabla \cdot [\lambda^n k \nabla p_n] = 0 \quad (54)$$

O bien, ya que $p_c = p_c(S_w)$ y usando la regla de la cadena el primer término toma la forma

$$\nabla \cdot \left[\lambda^w(S_w) k \frac{dp_c}{dS_w} \nabla S_w \right] - \nabla \cdot [\lambda^n k \nabla p_n] = 0 \quad (55)$$

En estas condiciones, escribimos el transporte de masa para la fase mojada

$$\varepsilon \frac{\partial S_w}{\partial t} - \nabla \cdot [\lambda^w(S_w) k \nabla p_n] + \nabla \cdot \left[\lambda^w(S_w) k \frac{dp_c}{dS_w} \nabla S_w \right] = 0 \quad (56)$$

Despreciando el efecto capilar y finalmente definiendo las ecuaciones buscadas se obtienen

$$-\nabla \cdot [\lambda^n k \nabla p_n] = 0 \quad (57)$$

$$\varepsilon \frac{\partial S_w}{\partial t} - \nabla \cdot [\lambda^w(S_w) k \nabla p_n] = 0 \quad (58)$$

Tomaremos que la saturación efectiva $S_e = k_{rw}$ y $k_{ro} = 1 - S_e$, entonces [28]

$$S_e = \frac{S_w - S_{rw}}{1 - S_{rw} - S_{ro}} \quad (59)$$

Las ecuaciones (57), (58) y (59) describen el comportamiento de un sistema de dos fases inmiscibles, incompresibles y la porosidad del medio no varía. El siguiente paso sería estudiar el modelo de tres fases, también conocido como modelo de petróleo negro, sin embargo, esto se abordará en trabajos futuros.

Capítulo 3

Resultados

En la presente sección se presentarán y discutirán los principales resultados acerca del estudio del transporte de contaminantes en agua y en un problema (caso más simple de dos fases) relacionado con la industria petrolera. Los cálculos se hicieron mediante el uso del FORTRAN y COMSOL tomando como condiciones de artículos así como libros de texto [24] y [28].

3.1 Dispersión de contaminantes en agua.

El caso particular correspondería al que en una ciudad se tira a un río $1.15 \text{ m}^3/\text{s}$ de aguas negras que todavía tienen un DBO de 29 mg/L y 1.7 mg/L de OD . Antes de la descarga el río tiene un flujo de $7.5 \text{ m}^3/\text{s}$ y una velocidad de 0.5 m/s en el punto de descarga, la DBO y OD en el río son 3.6 y 7.6 mg/L . El valor de saturación de OD (a la temperatura del río) es de 8.5 mg/L . El coeficiente de desoxigenación k_d , de 0.61 1/día , y el coeficiente de aireación k_r , es de 0.76 1/día . Se calculará el perfil de oxígeno disuelto En un caso particular de este estudio se consideraron los valores [24]:

$$k_r = 0.61 \frac{1}{\text{día}} \quad (1)$$

$$k_d = 0.76 \frac{1}{\text{día}} \quad (2)$$

Se hacen los cálculos de oxígeno disuelto OD y la demanda biológica de oxígeno cuando un río recibe una descarga de aguas residuales, proceso en cual hacemos uso del principio de conservación de la materia (lo que implica que la masa de OD y DBO que entran en el río son iguales a la masa de salida de OD y DBO). Entonces, las ecuaciones que representan esto último son:

$$QOD = Q_1OD_1 + Q_2OD_2 \quad (3)$$

$$QL_0 = Q_1L_1 + Q_2L_2 \quad (4)$$

En las expresiones anteriores Q, L_0, OD son el gasto volumétrico de salida, la DBO y el OD después de mezclarse en el agua. Despejando el OD y L_0

$$OD = \frac{Q_1OD_1 + Q_2OD_2}{Q_1 + Q_2} \quad (5)$$

$$L_0 = \frac{Q_1L_1 + Q_2L_2}{Q_1 + Q_2} \quad (6)$$

Obtenemos entonces los valores siguientes:

$$L_0 = 6.97mg/L \quad (7)$$

$$OD = \frac{6.89mg}{L} \quad (8)$$

$$D_0 = OD_{sat} - OD = 1.68mg/L \quad (9)$$

Sin olvidar que lo que estamos midiendo es la contaminación de un río, ahora calculamos el déficit de oxígeno a 10 km río abajo usando el modelo Streeter-Phelps, ya habiendo sustituido los valores en la ecuación correspondiente obtenemos:

$$D = 2.56mg/L \quad (10)$$

Y el OD 10 km río abajo

$$OD = 5.94mg/L \quad (11)$$

Veamos el comportamiento del OD con respecto al tiempo, y notaremos que se aprecia que a medida que pasa el tiempo el OD disminuye hasta alcanzar un mínimo y después aumenta hasta llegar a 8.5 mg/L, es decir oxígeno de saturación en una posición de 10 km.

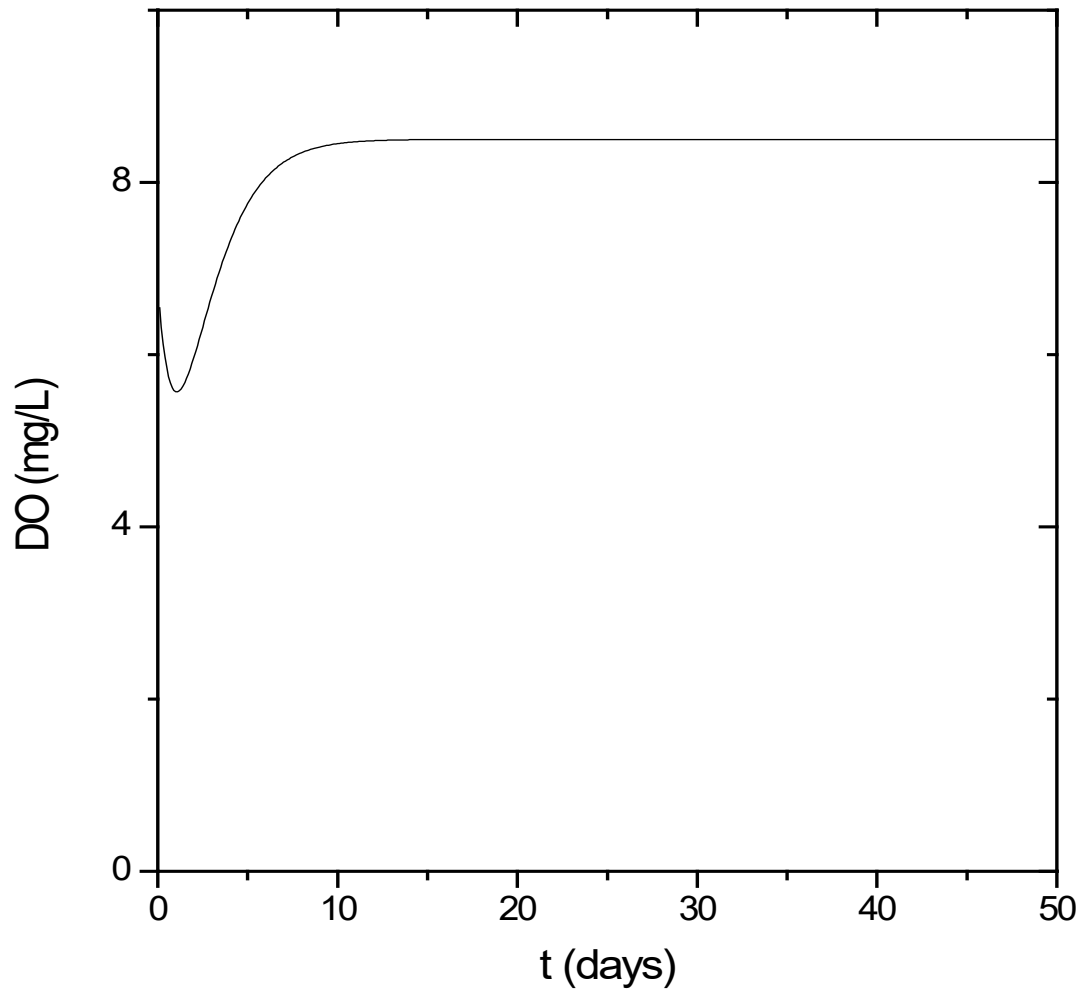


Figura 3.1 Se muestra el oxígeno disuelto en términos del tiempo.

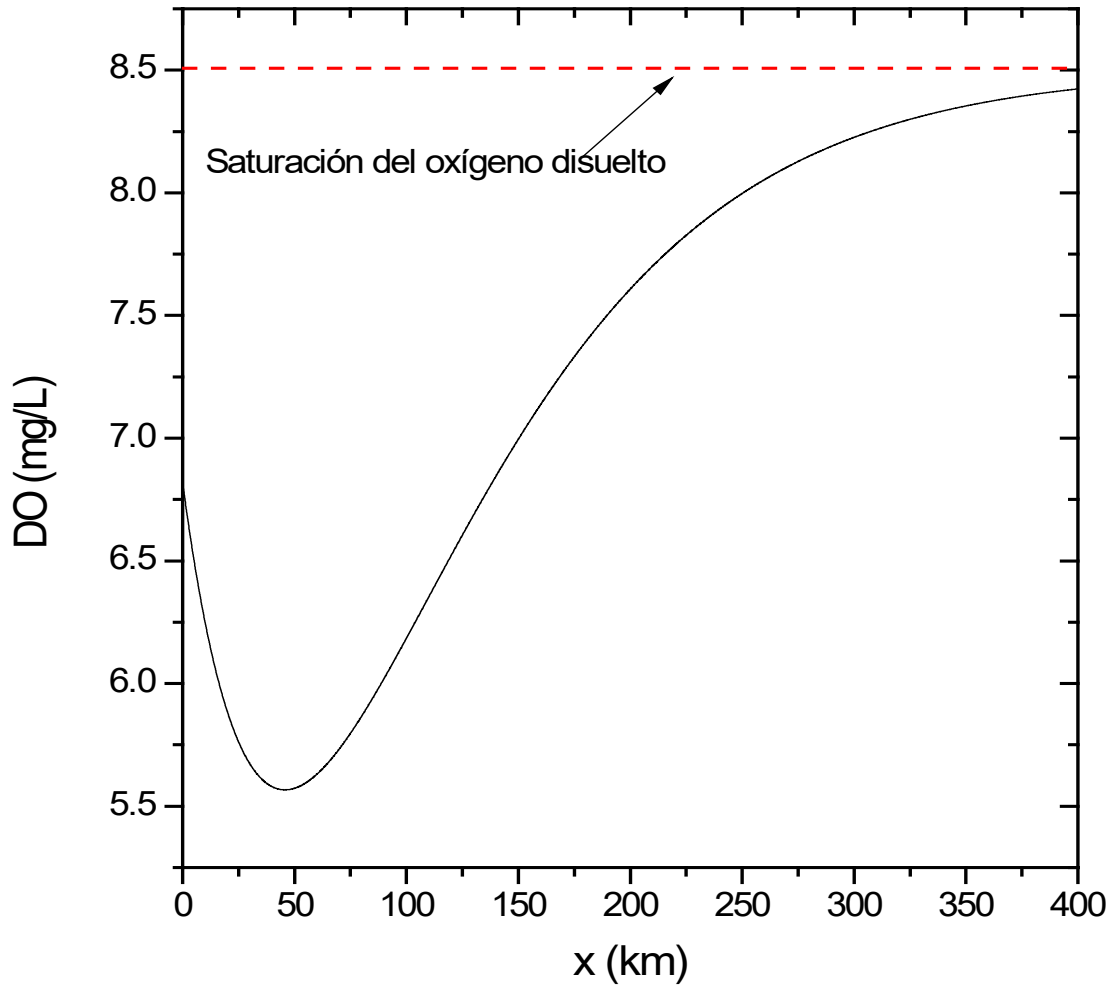


Figura 3.2 Se muestra el oxígeno disuelto en términos de la posición.

El valor mínimo se calcula derivando la ecuación (15) con respecto a la posición, posteriormente la hacemos igual a cero y resolviéndola obtenemos el punto más afectado debido a la contaminación: Si se vuelve a tomar muestras, pero ahora a 50 km. De la fuente Río abajo, con un $OD = 2.26 \text{ mg/L}$. Por otro lado, es posible estudiar un sistema donde no hay reacción química, es decir, $R = 0$, o considerar que la reacción es de primer orden $R = -kc$ como en el caso de un derrame

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - kc$$

Si consideramos un derrame que puede modelarse con una función delta de Dirac generalizada cuya solución es análoga a la solución a la del transporte aéreo, entonces

$$c(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi Kt}} e^{-kt} e^{-\frac{(x-v_c t)^2}{4Kt}}$$

A es la sección transversal del derrame, M es la masa del contaminante, K es el coeficiente de dispersión longitudinal. Las condiciones del problema a tratar son el caso de un derrame en un río de 15 m de ancho y 3 de profundidad con una velocidad promedio de 0.35 m / s. Se tomo como base el cálculo de 10 kg de un contaminante que no reacciona y bajo las mismas condiciones otro contaminante que tiene una velocidad de reacción de 0.051 / s. [20]

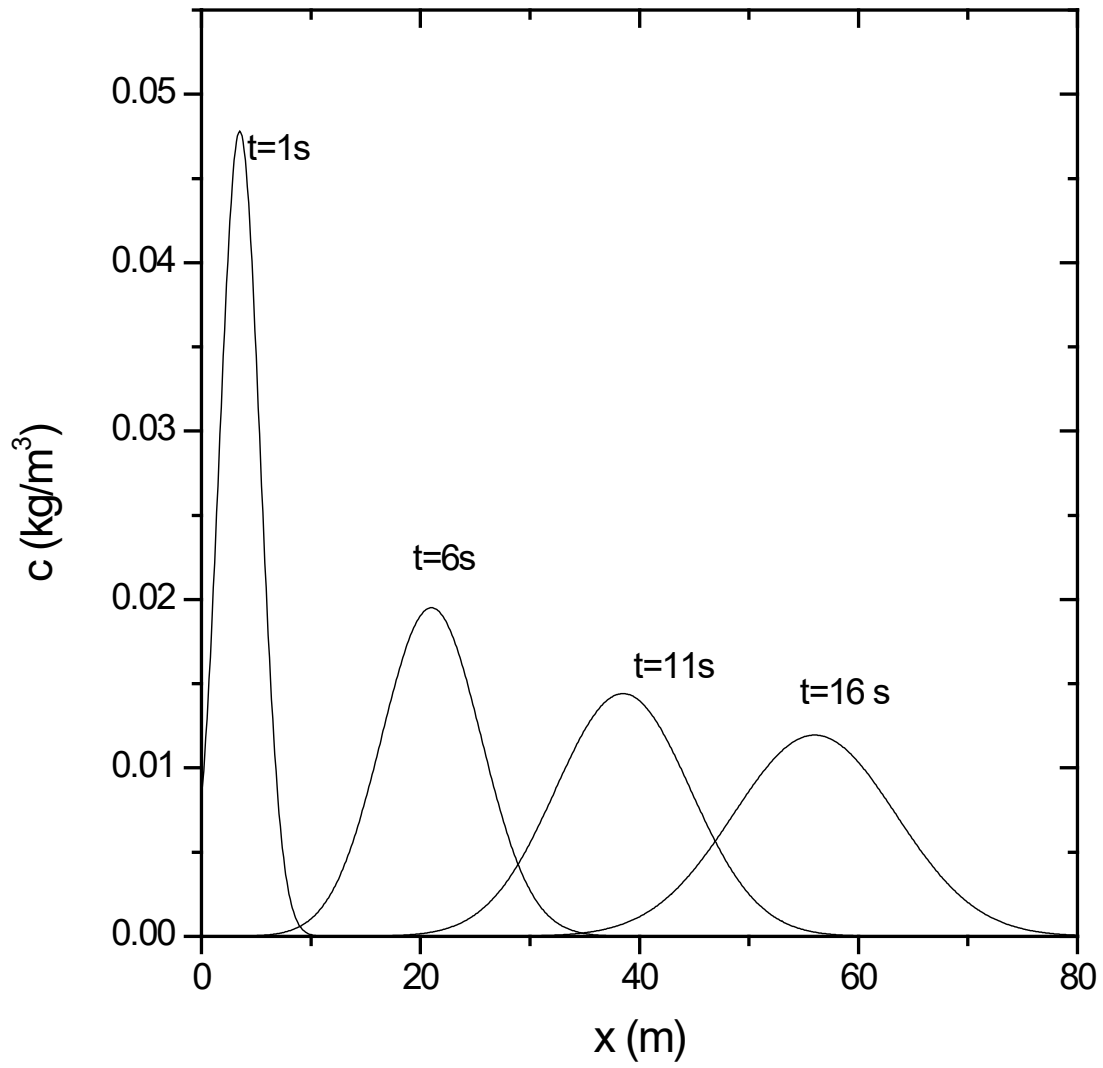


Figura 3.3 Se muestra la concentración del contaminante en un derrame en término del tiempo.

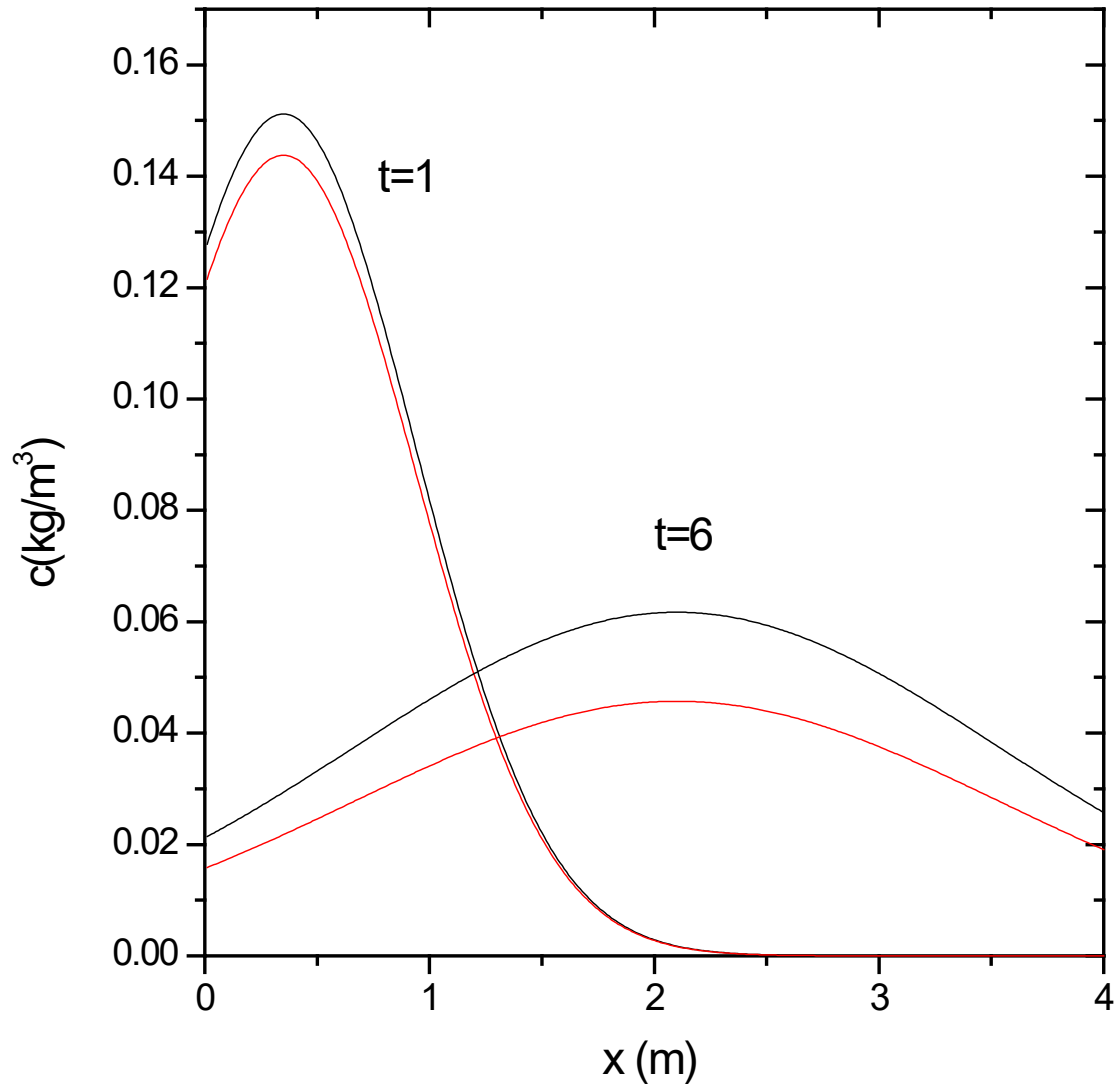


Figura 3.4 Se muestra la concentración del contaminante en un derrame en término del tiempo cuando hay reacción química(rojo) y cuando no (en negro).

3.2 Modelo de Buckley-Leverett.

Las condiciones iniciales y de contorno para que el problema se plantee físicamente son [28]

$$p_n(0) = 1 \text{ atm}; S_w(0) = 0$$

$$S_{wi} = 0.8; S_{wf} = 0$$

$$p_{nout} = 1 \text{ atm}$$

Tomando $3.4722 \times 10^{-7} \text{ m/s}$, $\varepsilon = 0.2$, $\mu_w = \mu_n = 0.001 \text{ Pa} \cdot \text{s}$, $k = 1 \times 10^{-15} \text{ m}^2$ se obtiene

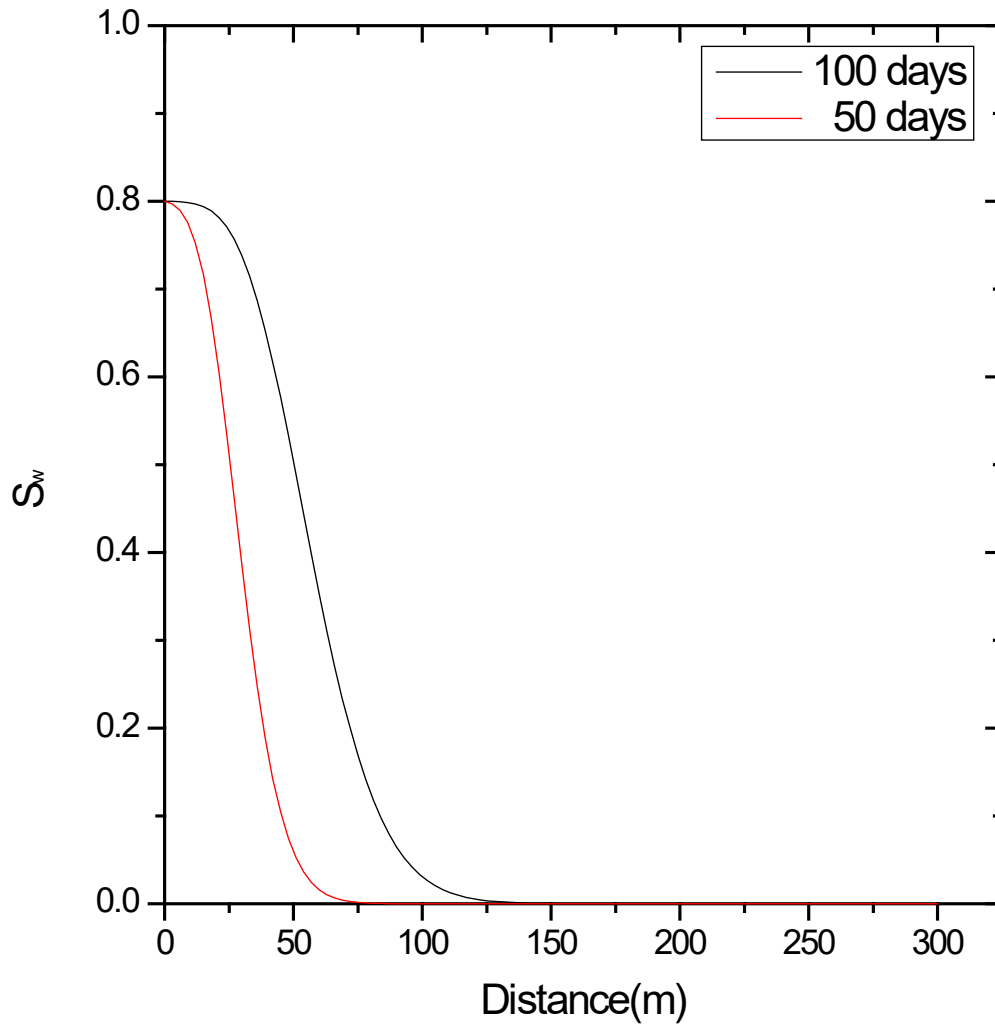


Figura 3.5 Se muestra la saturación del agua en términos de la distancia que recorre en dos tiempos distintos.

Podemos observar cómo está cambiando S_w en función de la distancia y en dos momentos particulares. A medida que aumenta el tiempo el perfil de la saturación del agua se desplaza hacia la derecha indicando que hay un transporte agua y al mismo tiempo el aceite se movería por lo que se podría extraer del yacimiento.

4.- Conclusiones

En este trabajo se comprueba que basándose en el principio de conservación de masa el fenómeno de contaminación en aire, así como el problema de extracción de hidrocarburos se puede interpretar con un modelo de transporte de masa. En este caso, el modelo es representado por medio de la ecuación diferencial parcial llamada segunda ley de Fick.

En el presente trabajo verificamos que la transformada de Laplace y Fourier es un método para resolver ecuaciones diferenciales y que además estas ecuaciones modelan sistemas relacionados con la calidad del aire y agua.

Se encontró que la máxima contaminación por materia orgánica no está localizado en lugar donde se derramó la materia orgánica.

Los modelos que se utilizan en el transporte de agua y aire son muy similares y por ello el comportamiento será de igual manera similares.

El modelo de Buckley-Leverett es útil para comprender un sistema de dos fases o que se pueden modelar como dos fases.

Referencias

- [1] SEMARNAT., (2017), *Atmosfera*, 192-253
- [2] Romero, M., Diego, F., Álvarez, M., (2006), Contaminación del aire: su repercusión como problema de salud, *Revista cubana de higiene y epidemiología*, Recuperado de: <http://www.inhem.sld.cu/cniche/saludambiental/busbib.htm>
- [3] Landau, L. D., & Lifshits, E. M. (2002). *Curso de física teórica*. Reverté.
- [4] Landau, L. D. (2008). *Física teorica: Teoria De La Elasticidad* (Vol. 7). Reverte
- [5] Lifschitz, E. M., & Pitaevskii, L. P. (1981). *Physical kinetics*. Perg. Press.
- [6] Levich, B. G., & Mermin, N. D. (1974). *Theoretical Physics, Vol. 4: Quantum Statistics and Physical Kinetics*. *PhT*, 27(4), 100.
- [7] Contreras, A.M., García, G., Icaza, B., (2013), *Calidad del aire: una práctica de vida*, SEMARNAT-CECADES.
- [8] Pla. J., Menor, C., (2017), *La composición química de la atmosfera primitiva de la tierra*, ResearchGate, Recuperado de: <https://www.researgate.net/publication/3160365448>
- [9] Manahan, S.E, (2006), *Introducción a la química ambiental*, 1-50, Reverté.
- [10] Brenn, G, (2017), *Analytical solutions for transport*, 177-188, Springer
- [11] Cervantes-Muratalla R, Ramírez-Rodríguez L. P, Mendívil-Reynoso T: Murguia-Romero C. R. A, García-Bedoya D. (2020). Application of Fourier Transform for Distribution of Pollutants in Air. *World Journal of Environmental Biosciences* 9(2) 1-7
- [12] D.B. Turner, *Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates*, HEW, Washington, DC, 1969.
- [13] Briggs G.A.(1972): ‘Discussion of Chimney Plumes in Neutral and Stable Surroundings. *Atmospheric Environment*, 6; 507-510.
- [14] McElroy, J.L., Pooler, F., 1968b. *The St. Louis Dispersion Study—Analysis*, vol.II. National Air Pollution Control Administration, Pub.No.AP-53, US DHEW, Arlington.

- [15] SEMARNAT, (2002), Situación del medio ambiente en Mexico, Recuperado de: www.paot.org.mx/centro/ine-semarnat.
- [16] Pérez, C., Leon, F., M., Delgadillo, G., R., Tratamiento de aguas, (2013), UNAM.
- [17] Montes, R. T., Metodología para evaluar la modificación de la capacidad de autodepuración de los ríos por efecto del cambio climático, (2013), UNAM.
- [18] Catalán, J, (1990), Química del agua, Ed. Bellisco, Madrid
- [19] Lin, S (2001) Water and wastewater calculations manual. New York: McGraw-Hill.
- [20] Chin, D. A. (2012). Water-quality engineering in natural systems: fate and transport processes in the water environment. John Wiley & Sons.
- [21] Ramalho, R. S. (1996). Tratamiento de aguas residuales. Reverté.
- [22] Una aplicación a transformada de
- [23] Masters, G. M., Ela, W. P., & Parra, Y. D. (2008). Introducción a la ingeniería medioambiental. Pearson educación.
- [24] Davis, M. & Masten, S. (2005) Ingeniería y ciencias ambientales. México: McGraw-Hill.
- [25] Ancheyta, J. (2013). Modeling of processes and reactors for upgrading of heavy petroleum. CRC Press.
- [26] Nnaemeka Ezekwe, Petroleum Reservoir Engineering Practice, Ed. Prentice Hall, USA ,2010.
- [27] Chen, Z. (2007). Reservoir simulation: mathematical techniques in oil recovery. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [28] Diaz-Viera, M. A., Lopez-Falcon, D. A., Moctezuma-Berthier, A., & Ortiz-Tapia, A. (2008, October). COMSOL implementation of a multiphase fluid flow model in porous media. In Proceedings of the COMSOL Conference.

Apéndice

Partiendo de la ecuación,

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} \quad (1)$$

Aplicamos la transformada de Fourier,

$$c(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{c}(k, t) e^{ikx} dx \quad (2)$$

A continuación, hacemos las operaciones requeridas.

$$\frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} c(k, t) e^{ikx} dx \quad (3)$$

$$\frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} c(k, t) e^{ikx} dx \quad (4)$$

$$\frac{\partial^2 e^{ikx}}{\partial x^2} = -k^2 e^{ikx} \quad (5)$$

Llegamos a la siguiente expresión,

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = -\frac{Dk^2}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c(k, t) e^{ikx} dx \quad (6)$$

Al sustituir en (1) se Obtiene la siguiente Expresión

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = k^2 D c(k, t) \quad (7)$$

Cuya Solución es,

$$c(k, t) = A(k)e^{-k^2Dt} \quad (8)$$

Las condiciones iniciales para una ecuación diferencial parcial dan una idea de cómo es el sistema a un tiempo $t=0$, en este caso las condiciones iniciales están determinadas por el emisor del contaminante, en los pasos que describimos este hecho y aplicamos la transformada de Fourier.

$$c(x, 0) = f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} c(x, 0) e^{ikx} dk \quad (9)$$

$$c(k, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (10)$$

$$c(k, 0) = A(k) \quad (11)$$

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (12)$$

Sustituyendo para $c(k, t)$ se obtiene las expresiones,

$$c(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} e^{-k^2Dt} dx \quad (13)$$

$$c(k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2Dt} e^{ikx'} e^{ikx} \quad (14)$$

Si esta última expresión la escribimos en términos de $c(x, t)$ tenemos lo siguiente

$$c(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k^2Dt + ik(x-x')} \quad (15)$$

Ahora para continuar el desarrollo necesitamos un cambio de variable

$$\eta = -k^2 Dt + ik(x - x') \quad (16)$$

En el término de la derecha completaremos el trinomio cuadrado perfecto, el proceso algebraico se escribe a continuación,

$$\eta = -Dt \left\{ k^2 - \frac{i(x - x')}{Dt} + \frac{1}{4} \left[\frac{(x - x')}{Dt} \right]^2 - \frac{1}{4} \left[\frac{(x - x')}{Dt} \right]^2 \right\}$$

$$\eta = -Dt \left\{ \left[k^2 - \frac{i(x - x')}{2Dt} \right]^2 + \frac{1}{4} \left[\frac{(x - x')}{Dt} \right]^2 \right\}$$

De aquí que la expresión para el exponencial es:

$$e^\eta = e^{-Dt \left\{ \left[k^2 - \frac{i(x - x')}{2Dt} \right]^2 + \frac{1}{4} \left[\frac{(x - x')}{Dt} \right]^2 \right\}}$$

$$e^\eta = e^{Dt \left[k - \frac{i(x - x')}{2Dt} \right]^2} e^{-\frac{Dt}{4} \left[\frac{(x - x')}{Dt} \right]^2}$$

Y entonces obtenemos la expresión,

$$\int e^\eta dk = e^{-\frac{Dt}{4} \left[\frac{(x - x')}{Dt} \right]^2} \int e^{Dt \left[k - \frac{i(x - x')}{2Dt} \right]^2} dk \quad (17)$$

Nuevamente haciendo un cambio de variable,

$$u = \sqrt{Dt} \left[k - \frac{i(x - x')}{2Dt} \right] \quad (18)$$

$$du = \sqrt{Dt} dk$$

$$dk = \frac{du}{\sqrt{Dt}}$$

Haciendo la sustitución en la integral,

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} \frac{du}{\sqrt{Dt}} = \frac{1}{\sqrt{Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{u^2} du \quad (19)$$

A continuación, usaremos coordenadas polares y recurriendo al teorema de cambio de variable podemos efectuar las siguientes operaciones:

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2+y^2)} dx dy \quad (20)$$

Donde

$$x^2 + y^2 = r^2$$

$$dx dy = r dr d\theta$$

Con el cambio de variable

$$v = r^2$$

$$dv = 2r dr$$

$$dr = \frac{dv}{2r}$$

Para llegar a:

$$I^2 = \pi \int_0^{\infty} e^{-v} = \pi [e^{-v}]_0^{\infty}$$
$$I = \sqrt{\pi} \quad (21)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{\eta} = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{Dt}} e^{-\frac{D^2 t^2}{\sqrt{Dt}}(x-x')^2} \quad (22)$$

De la última ecuación tenemos la expresión para $c(x,t)$

$$c(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} c_0 e^{-\frac{(x-x_0')^2}{4Dt}} \quad (23)$$

Esta solución es utilizada en el análisis de contaminantes en aire.

Siguiendo con el análisis, ahora incluyendo efectos del viento se tiene la ecuación:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2} - u \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \quad (23)$$

Efectuamos el mismo tratamiento en la solución y recurrimos a la transformada de Fourier.

Iniciando con un cambio de variable

$$\epsilon = x - ut \quad (24)$$

Observemos ahora que c es una función de ϵ y $de t$, entonces podemos calcular la derivada parcial de c y luego sustituyendo en la ecuación (23) y aplicando la regla de la cadena en la misma ecuación, realizamos los siguientes movimientos.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \epsilon}{\partial t} &= -u & (25) \\ \frac{\partial c}{\partial t} &= \frac{\partial c}{\partial \epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial t} = -u \frac{\partial c}{\partial \epsilon} + \frac{\partial c}{\partial t} \\ \frac{\partial c(\epsilon,t)}{\partial x} &= \frac{\partial c}{\partial \epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial x} \\ \frac{\partial c}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial x} &= 0 \end{aligned}$$

$$\frac{\partial c(\varepsilon, t)}{\partial x} = \frac{c}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x}$$

$$\frac{\partial c(\varepsilon, t)}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial \varepsilon}$$

Calculando la segunda derivada parcial

$$\frac{\partial^2 c(\varepsilon, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 c}{\partial \varepsilon^2}$$

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x}$$

Pero como:

$$D \frac{\partial^2 y}{\partial \varepsilon^2} = \frac{\partial c}{\partial t} - u \frac{\partial c}{\partial \varepsilon} + u \frac{\partial c}{\partial \varepsilon}$$

Llegamos a la expresión,

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial \varepsilon^2} = \frac{\partial c}{\partial t} \tag{26}$$

Y obtenemos:

$$e^{-\frac{\varepsilon^2}{4Dt}} = e^{-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}} \tag{27}$$

Luego entonces se obtiene la siguiente expresión para $c(x, t)$

$$c(x, t) = \frac{c_0}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}} \tag{28}$$