Ensayos

Cómo hacer un modelo matemático

Resumen

En este trabajo se muestra cómo hacer un modelo matemático riguroso a través de la aplicación de una teoría establecida donde se toma a la calidad de agua superficial como un caso de estudio. Con este parámetro se pretende demostrar como los modelos se pueden complicar dependiendo de la rigurosidad y exactitud que se quiera tener al representar el fenómeno. También se presentan soluciones analíticas de algunos de los modelos y se propone resolver por el método numérico de diferencias finitas los modelos que no tengan solución analítica, dejando las ecuaciones discretizadas.

Abstract

The present study shows how to make a rigorous mathematical model by applying an established theory which takes the quality of surface water as a case study. This parameter aims to demonstrate how models can get complicated depending on how thoroughly and precise one wishes to represent the phenomenon. The study also presents analytical solutions of some of the models. By means of the finite difference numerical method, It sets out to solve models which have no analytical solutions thereby leaving the equations discrete.

Résumé

Ce travail montre comment réaliser un modèle mathématique rigoureux en mettant en pratique la théorie ici établie dans le cas de l´étude de la qualité de l´eau de superficie. Avec ce paramètre, on prétend démontrer comment les modèles peuvent se compliquer en fonction de la rigueur et exactitude que l'on désire obtenir en représentant le phénomène. On présente également des solutions analytiques de certains modèles et la méthode numérique de différences finies est proposée pour résoudre les modèles qui n'ont pas de solution analytique, en laissant les équations discrétisées.

* Alejandro Regalado Méndez
** Ever Peralta Reyes
* Carlos Alberto González Rugerio

Palabras clave: DBO; OD; Ecuaciones diferenciales; Fenómenos de Transporte.

Introducción

Para darle un seguimiento y entendimiento de lo que los autores queremos mostrar, comenzaremos por definir lo que para nosotros es un modelo. Un modelo: *es la representación abstracta de algún aspecto de la realidad. Su estructura esta conformada por dos partes, la primera son todos aquellos aspectos que caracterizan la realidad modelizada, y la segunda no son más que las relaciones existentes entre los elementos antes mencionados.*

Científicos e Ingenieros usan al menos alguna de las tres metodologías para obtener las ecuaciones de un modelo las cuales se describen a continuación:

1. Fundamental: Usa la teoría aceptada de la ciencia fundamental para obtener ecuaciones. En este caso, las teorías que se aceptan son los axiomas básicos en el proceso lógico de construcción de un modelo.

* Profesor Investigador, Universidad del Mar, Campus Puerto Ángel, Instituto de Industrias

** Profesor Investigador, Universidad del Mar, Campus Puerto Ángel, Instituto de Ecología

2. Empírica: Hace uso de observación directa para desarrollar ecuaciones que describen los experimentos.
3. Analogía: Usar las ecuaciones que describen a un sistema análogo, con variables identificadas por analogía en una base uno a uno.

Además un modelo matemático está basado en la lógica matemática, cuyos elementos son esencialmente variables y funciones, y las relaciones entre ellas, que vienen expresadas a través de relaciones matemáticas (ecuaciones, inecuaciones, operadores lógicos, etc.) que se empatan con las correspondientes relaciones del mundo real que modelizan (relaciones tecnológicas, leyes físicas, restricciones del mercado, etc.).

Una de las razones para obtener un modelo es la adecuación del cálculo del supuesto comportamiento de un proceso para determinadas condiciones, el cálculo depende de la aplicación; por ejemplo, un modelo de tratamiento de aguas debe ser usado para determinar la cantidad de contaminantes presentes para la limpieza parcial o total del agua tratada. De esta forma podemos mostrar que la importancia de los modelos matemáticos radica en que:

- Nos revela a veces relaciones que no son evidentes a primera vista.
- Una vez construido el modelo, es posible extraer de él propiedades y características de las relaciones que de otra forma permanecerían ocultas.
- En aquellas situaciones del mundo real en las que no es posible experimentar con la realidad, ofrecen un marco teórico para evaluar la toma de decisiones así como sus consecuencias.

Los modelos pueden ser estáticos o dinámicos, en un modelo estático, la variable tiempo no desempeña un papel relevante, por el contrario en un modelo dinámico, ya que alguno(s) de los elementos que intervienen en la modelización no permanecen constantes, sino que se consideran como funciones del tiempo, describiendo trayectorias temporales. El análisis de un modelo dinámico tiene por objeto el estudio de la trayectoria temporal específica de alguno(s) de sus elementos.

Generalmente todos los modelos deterministas derivan ecuaciones diferenciales ya sean ordinarias o parciales, éstas se pueden resolver por métodos analíticos y/ó métodos numéricos, ya que muchos de los problemas son prácticamente imposibles de resolver por métodos analíticos. Los métodos numéricos se aplican a problemas de valores en la frontera o condiciones de inicio. Los métodos numéricos pueden transformar la ecuación diferencial (ordinaria o parcial), que se encuentra en tiempo continuo, en una ecuación en diferencias finitas, es decir en tiempo discreto.

Según Rutherford (1976), se deben de tomar en consideración algunos pasos para obtener lo máximo de un modelo matemático, éstos se describen a continuación:

- Los problemas de la forma más elegante posible.
- Elegir la notación más simple, pero sin que ésta sea de gran importancia.
- Tratar de hacer las variables adimensionales.

En este trabajo se desarrollan modelos matemáticos para la calidad de agua superficial. Estos arrojan ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales. Algunas de ellas tienen soluciones algebraicas, pero algunas sólo pueden resolverse por métodos numéricos.

El agua es un líquido vital y está sujeta a diversos cambios ya sean de manera natural o por la actividad antropogénica. Más adelante se describe la problemática de la contaminación del agua superficial así como el desarrollo de modelos simples y complejos de contaminación del agua superficial. Así también la solución analítica o por métodos numéricos.

En primera instancia se definirá lo que es el agua superficial, así como los parámetros que se emplean para su caracterización, de ahí se desarrollan los modelos matemáticos desde su forma escrita hasta la codificación en ecuaciones, se tomarán elementos de volumen, los cuales permiten hacer un análisis de entradas, salidas, pérdidas o generación de materia.

Calidad del agua superficial

El agua es un líquido vital para el consumo de las especies vivas, es decir, la flora y fauna. Sin embargo este recurso natural ha sufrido gran deterioro, tanto de forma natural (eutroficación, microorganismos) como por la actividad humana.

Los ríos han sido considerados como la principal fuente de disposición de descargas de contaminantes, es decir de aguas residuales de la industria, doméstica y agricultura. (James, 1993). Claramente, los ríos poseen varios rasgos atractivos como un medio de disposición de aguas residuales:

- Transporte de aguas residuales hacia el océano.
- Dilución y dispersión debido al mezclado rápido.
- Baja sedimentación y resuspensión con extendimiento del sedimento sobre un área grande.
- Condiciones turbulentas que causan una rápida reaireación.

Sin embargo, pese a estas ventajas existen muchos cambios indeseables en la flora y la fauna. La mayoría de estos cambios son a través de la descarga de materia orgánica (DBO), la cual da como resultado un incremento en la concentración de oxígeno disuelto.

Los modelos de los ríos, no son más que relaciones entre la velocidad de descarga y la concentración del oxígeno disuelto. A continuación se describirán los modelos de sistema DBO-OD, Streeter Phelps.

Sistema DBO-OD

Antes de conocer el sistema de DBO-OD conoceremos los términos de DBO y OD, los cuales son definidos a continuación, y además se presentan tablas del nivel DBO Y de OD, que dan una idea de la calidad del agua.

La Demanda Biológica de Oxígeno (DBO)

Es una medida de oxígeno que usan los microorganismos para descomponer el agua. Si hay una gran cantidad de desechos orgánicos en el suministro de agua, implica que habrá una cantidad importante de bacterias presentes trabajando para descomponer el desecho presente en el agua. En este caso, la demanda de oxígeno será alta, así que el nivel del DBO será alto. Conforme el desecho es consumido o dispersado en el agua, los niveles de la DBO empezarán a bajar (Tabla 1).

Oxígeno disuelto

Es la cantidad de oxígeno que está disuelto en el agua y que es esencial para los ríos y lagos saludables. El nivel de oxígeno disuelto puede ser un indicador de qué tanto está contaminada el agua y cuánto soporte puede dar esta agua a la vida vegetal y animal. Generalmente, un nivel más alto de oxígeno disuelto indica agua de mejor calidad. Si los niveles de oxígeno disuelto son demasiado bajos, algunos peces y otros organismos no pueden sobrevivir (Tabla 2).

Nivel DBO *(ppm)*	***Calidad del Agua***
1.0 – 2.0	Muy Buena: El desecho orgánico presente en la muestra de agua es casi nulo
3.0 – 5.0	Aceptable: Moderadamente limpia
6.0 – 9.0	Mala: Algo Contaminada, indica que hay materia orgánica presente y que las bacterias están descomponiendo este desecho.
100.0 ó más	Muy Mala: Muy Contaminada, contiene desecho orgánico

TABLA 1. NIVEL DE DBO PRESENTE EN EL AGUA.

Nivel OD *(ppm)*	***Calidad del Agua***
0.0 – 4.0	Mala: Algunas poblaciones de peces y macroinvertebrados empezarán a disminuir
4.1 – 7.9	Aceptable
8.0 – 12.0	Buena
12.0 o más	Repita la prueba: El agua puede airearse artificialmente

TABLA 2. NIVEL DE OD PRESENTE EN EL AGUA.

El modelo de oxígeno consta de 3 términos los cuales se describen a continuación:

a) Descomposición del agua:

$$\left(\begin{array}{c}\text{El cambio de la materia}\\ \text{orgánica con respecto}\\ \text{al tiempo}\end{array}\right)=\left(\begin{array}{c}\text{Cantidad de}\\ \text{materia orgánica}\\ \text{disponible}\end{array}\right)$$

Matemáticamente se escribe como:

$$\frac{dC_{DBO}}{dt} = -k_1 C_{DBO} \tag{1}$$

Donde:

C_{DBO} Concentración de la demanda biológica de oxígeno.
k_1 Constante cinética de reacción.

b) Desoxigenación:

$$\left(\begin{array}{c}\text{El cambio en la concentración}\\ \text{de la demada de oxígeno}\\ \text{con respecto al tiempo}\end{array}\right)=\left(\begin{array}{c}\text{Velocidad de}\\ \text{desaparición}\\ \text{de materia}\\ \text{orgánica}\end{array}\right)$$

Matemáticamente se escribe como:

$$\frac{dC_{OD}}{dt} = -k_1 C_{DBO} \tag{2}$$

Donde:

C_{DBO} Concentración de la demanda biológica de oxígeno.
C_{OD} Concentración de la demanda química de oxígeno.
k_1 Constante cinética de reacción.

c) Reaireación:

$$\left(\begin{array}{c}\text{El cambio en la concentración}\\ \text{de la demanda de oxígeno con}\\ \text{respecto al tiempo}\end{array}\right)=\left(\begin{array}{c}\text{Velocidad de desaparición}\\ \text{de oxígeno en el agua}\\ \text{debido a la presencia}\\ \text{de los microorganismos}\end{array}\right)$$

Matemáticamente se escribe de la siguiente forma:

$$\frac{dC_D}{dt} = -k_1 (C_S - C_{OD}) \tag{3}$$

Donde:

C_D Deficiencia de oxígeno en el agua.
C_{OD} Concentración de oxígeno disuelto.
C_S Constante de oxígeno disuelto saturado en el agua.

Kiely (1999), expresa la concentración de OD en términos de la deficiencia de oxígeno, es decir $C_D=(C_S - C_{OD})$(*Streeter and Phelp*), considerando que cuando un residuo biodegradable se vierte a un curso de agua consume oxígeno, el cual sólo es renovado por la reaireación atmosférica. De tal forma que la dinámica del sistema DBO-OD se representa como sigue:

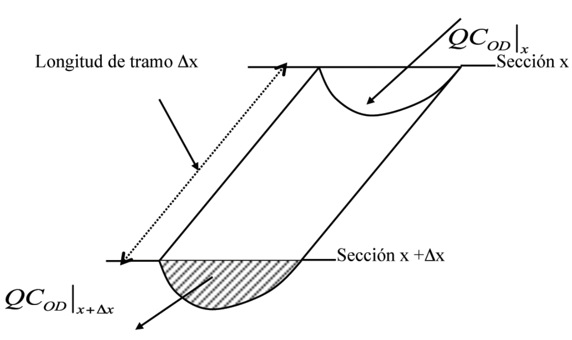

FIGURA 1. VOLUMEN DE CONTROL DE UN RÍO.

Considerando un volumen de control de un río con entradas y salidas como el que se muestra en la Figura 1. Se hace el balance de materia alrededor del volumen de flujo:

(Acumulacón)=(Entrada)-(Salida)+(Desoxigenación)+(Reaireación)

$$QC_{OD}|_x - QC_{OD}|_{x+\Delta x} + r_{desoxigenación}\Delta V + r_{reaireación}\Delta V = \frac{\partial C_{OD}}{\partial t}\Delta V \tag{4}$$

Donde:

C_{OD} Concentración de oxígeno disuelto.
$\Delta V = A\Delta x$ Incremento de volumen de longitud Δx.

$$QC_{OD}|_x - QC_{OD}|_{x+\Delta x} + r_{desoxigenación} A\Delta x + r_{reaireación} A\Delta x = \frac{\partial C_{OD}\Delta V}{\partial t} A\Delta x \tag{5}$$

Dividimos la ec. (5) por $A\Delta x$ y para el caso de un régimen en estado estacionario $\left(\frac{\partial C_{OD}}{\partial t} = 0\right)$:

$$\frac{QC_{OD}|_x - QC_{OD}|_{x+\Delta x}}{\Delta x} + r_{desoxigenación} + r_{reaireación} = 0 \tag{6}$$

Tomando el límite cuando $\Delta x \to 0$ y sustituyendo las respectivas velocidades de desoxigenación y reaireación respectivamente tenemos:

$$\lim_{\Delta x\to 0}\left[\left(\frac{1}{A}\right)\left(\frac{QC_{OD}|_x - QC_{OD}|_{x+\Delta x}}{\Delta x}\right)\right] - k_1 C_{DBO} + k_2 C_{OD} = 0 \tag{7}$$

$$-\frac{1}{A}\frac{d(QC_{OD})}{dx} - k_1 C_{DBO} + k_2 C_{OD} = 0 \tag{8}$$

Si el flujo de entrada es Q=cte. y además sabiendo que el tiempo de residencia es de la forma $t=V/Q$, y que $Ax=V$, podemos reordenar la ec. (8) para obtener:

$$\frac{dC_{OD}}{dt} = -k_1 C_{DBO} + k_2 C_D \tag{9}$$

Además sabemos que $C_D = C_S - C_{OD}$ así que

$\frac{dC_D}{dt} = -\frac{dC_{OD}}{dt}$, la cual sustituimos en la ec. (9)

$$\frac{dC_D}{dt} = k_1 C_{DBO} - k_2 C_D \qquad (10)$$

Ahora resolvemos en primera instancia la ec. (1), la cual tiene la siguiente condición inicial: $At=0$ $C_{DBO}=k1C_{DBO_0}$.

Reordenando la ec. (1) tenemos: $\frac{dC_{DBO}}{C_{DBO}} = -k_1 dt$,

integrando $\int \frac{dC_{DBO}}{C_{DBO}} = -k_1 \int dt$, la solución es:

$$Ln\left(\frac{C_{DBO}}{C_1}\right) = -k_1 t \qquad (11)$$

Despejando C_{DBO} para evaluar la condición inicial

$$C_{DBO} = C_1 e^{-k_1 t} \qquad (12)$$

Evaluando la ec. (12) tenemos que:

$$C_1 = -r_{desoxigenación} k_1 C_{DBO_0}$$

Por lo que finalmente la solución a la ec. (1) es:

$$C_{DBO} = k_1 C_{DBO_0} e^{-k_1 t} \qquad (13)$$

Para resolver la ec. (10) sustituimos la ec. (13) para eliminar términos, obteniendo:

$$\frac{dC_D}{dt} = k_1 C_{DBO_0} e^{k_1 t} - k_2 C_D \qquad (14)$$

La solución de la ec. (14), con la siguiente condición inicial: A $t=0$ $C_D=C_{D_0}$, es del tipo:

$$C_D = Ae^{-\int P(t)dt} + e^{-\int P(t)dt} \int e^{P(t)dt} f(t)dt$$

(Dennis G. Zill, Michael R. Cullen, 2002).

La solución analítica de la ec. (14) es como sigue:

Donde

$P(t)=k_2$

$f(t)=k_1 C_{DBO_0}{}^{ek_1 t}$

$$C_D = Ae^{-\int k_2 dt} + e^{-\int k_2 dt} \int e^{\int k_2 dt} k_1 C_{DBO_0} e^{-k_1 t} dt$$

integrando los primeros términos tenemos:

$$C_D = Ae^{-k_2 t} + e^{-k_2 t} \int e^{k_2 t} k_1 C_{DBO_0} e^{-k_1 t} dt \quad \text{, reordenando:}$$

$$C_D = Ae^{-k_2 t} + e^{-k_2 t} k_1 C_{DBO_0} \int e^{(k_2 - k_1)t} dt \text{,integrando tenemos:}$$

$$C_D = Ae^{-k_2 t} + e^{-k_2 t} \frac{k_1 C_{DBO_0}}{k_2 - k_1} e^{(k_2 - k_1)t} \qquad (15)$$

Ahora evaluamos la condición inicial para encontrar la constante de integración

$$C_{D_0} = A + \frac{k_1 C_{DBO_0}}{k_2 - k_1} \therefore A = C_{D_0} - \frac{k_1 C_{DBO_0}}{k_2 - k_1} ,$$

sustituyendo en la ec. (15) y reordenando tenemos:

$$D_t = \frac{k_1 C_{DBO_0}}{k_2 - k_1}\left(e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}\right) + C_{D_0} e^{-k_2 t} \qquad (16)$$

Modelo de Steeter-Phelps

Los procesos clave de transporte (de un soluto) en las masas de agua, sea un rio, un lago o un estuario son:

- Convección debida a la velocidad media de la masa de agua.
- Difusión o dispersión, ya sea molecular o turbulenta.

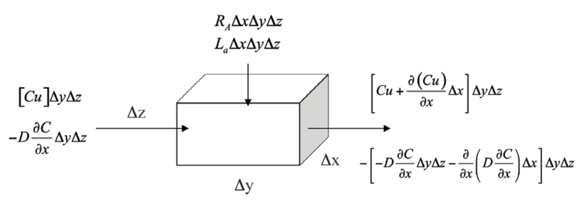

FIGURA 2. BALANCE DE MATERIA GENERAL.

$$\left(\begin{array}{l}\text{Acumulación del}\\ \text{soluto A en la}\\ \text{sección A, } \Delta x\end{array}\right) = \left(\begin{array}{l}\text{Flujo del soluto}\\ \text{A en la entrada}\\ \text{en la dirección x}\end{array}\right) - \left(\begin{array}{l}\text{Flujo del soluto}\\ \text{A que sale en la}\\ \text{dirección x+}\Delta x\end{array}\right) + \left(\begin{array}{l}\text{Velocidad de}\\ \text{generación/consumo}\\ \text{del soluto A por}\\ \text{reacción homogénea}\end{array}\right) + \left(\begin{array}{l}\text{Fuente de descarga}\\ \text{de contaminación}\\ \text{del soluto A}\end{array}\right)$$

$$\Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial C}{\partial t} = -D\frac{\partial C}{\partial x} \Delta y \Delta z - \left[-D\frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C}{\partial x}\right)\Delta x\right]\Delta y \Delta z$$

$$+ Cu \Delta y \Delta z - \left[Cu + \frac{\partial (Cu)}{\partial x}\Delta x\right] \Delta y \Delta z \pm R_A \Delta x \Delta y \Delta z + L_a \Delta x \Delta y \Delta z \qquad (17)$$

Reordenando tenemos:

$$\Delta x \Delta y \Delta z \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D \frac{\partial C}{\partial x}\right) \Delta z \Delta x \Delta y$$

$$- \frac{\partial (Cu)}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \pm R_A \Delta x \Delta y \Delta z + L_a \Delta x \Delta y \Delta z \qquad (18)$$

Dividimos por el elemento de volumen $\Delta x \Delta y \Delta z$ para obtener:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (Cu)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D \frac{\partial C}{\partial x}\right) \pm R_A + L_a \qquad (19)$$

ó

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (Cu)}{\partial x} = \frac{1}{A}\frac{\partial}{\partial x}\left(AD \frac{\partial C}{\partial x}\right) \pm R_A + L_a \qquad (20)$$

Ahora analicemos la descarga de un contaminante en un río, para el caso en el que existe una velocidad de decaimiento de primer orden en estado estacionario. En la Figura 3 se muestra el diagrama conceptual de un río.

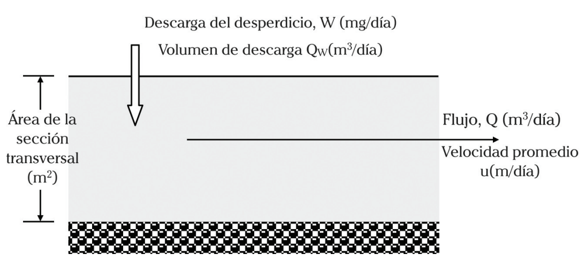

FIGURA 3. MODELO DE DESCARGA DE UN MATERIAL CONTAMINANTE EN UN RÍO.

- Unidimensional
- Área uniforme
- Estado estacionario
- Reacción de primer orden
- Coeficiente de dispersión es constante
- La velocidad es una velocidad promedio
- Si la velocidad de descarga es continúa L_a es despreciable

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 0; \quad R_A = -KC; \quad L_a = \frac{W}{Q+Q_W} \approx 0$$

Partiendo de la ec. (20) y adicionando las consideraciones antes mencionadas tenemos que:

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \frac{\partial (C)}{\partial x} - KC = 0 \qquad (21)$$

Donde:

C Concentración del contaminante.
W Flux de descarga del contaminante.
Q_W Flujo del efluente.
Q Flujo de agua fresca.
K Constante cinética de reacción.

La condición de frontera a la que está sujeta la ec. (21) es que en x=0 el flux es igual al flux de descarga y matemáticamente se expresa como:

$$\text{En } x=0 \quad 2DA \frac{dC}{dx} = W \qquad (22)$$

La ec. (21) es una ecuación lineal homogénea de coeficientes constantes la cual puede resolverse de la siguiente manera:

$$Dm^2 - um + K = 0 \qquad (23)$$

Si tiene dos raíces distintas ($m_1 \neq m_2$) y reales la solución es del tipo:

$$C = c_1 e^{m_1 x} + c_2 e^{m_2 x} \qquad (24)$$

Las raíces se calculan de la forma

$$m = \frac{-(-u) \pm \sqrt{(-u)^2 - 4DK}}{2D} \; ; \; m = \frac{u \pm \sqrt{u^2 - 4DK}}{2D}$$

Factorizamos u^2 $\qquad m = \dfrac{u \pm \sqrt{u^2\left(1 - \frac{4DK}{u^2}\right)}}{2D}$

reordenando $\qquad m = \dfrac{u}{2D}\left[1 \pm \sqrt{\left(1 - \frac{4DK}{u^2}\right)}\right]$

simplificando $\qquad m = \dfrac{u}{2D}[1 \pm \beta]; \quad \beta = \sqrt{\left(1 \quad \frac{4DK}{u^2}\right)}.$

Por simplicidad la ec. (24) se reduce a $C = c_0 e^{mx}$. Ahora evaluemos la condición de frontera. Pero primero se obtiene la derivada de la concentración con respecto a la dimensión x; $\frac{dC}{dx} = c_0 m e^{mx}$,

después se tiene que: $2DAC_0 m \left[\frac{u}{2D} (1 \pm \beta) \right] = W$,

reordenando $C_0 = \frac{W}{Aum(1 \pm \beta)}$.

La solución completa de la ec. (21) es:

$$C(x) \quad \frac{W}{uAm} \exp \left[\frac{u}{2D} (1 \pm m) x \right] \tag{25}$$

Para el caso no estacionario se discretiza la ec. (22) en forma de diferencias finitas como:

$$\frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{\Delta t} = - \frac{u}{\Delta x} \left(C_{i-1,j} - C_{i,j} \right) +$$

$$\frac{D}{(\Delta x)^2} \left(C_{i-1,j} - 2C_{i,j} + C_{i+1,j} \right) - k_1 C_{i-1,j} + L_a \tag{26}$$

La discretización de su condición de frontera es:

$$\text{En } x=0 \;\; 2DA \frac{\left(C_{i-1,j} - C_{i,j} \right)}{\Delta x} = W \tag{27}$$

Para satisfacer la ec. (26) es necesario que: $u\Delta t = \Delta x$ y sustituyéndola en la ec. (26) para reducir términos se tiene:

$$C_{i,j+1} = -C_{i-1,j} +$$

$$\frac{\Delta t D}{(\Delta x)^2} \left(C_{i-1,j} - 2C_{i,j} + C_{i+1,j} \right) - k_1 C_{i-1,j} \Delta t + L_a \Delta t \tag{28}$$

Es necesario tener un criterio de estabilidad de la solución numérica, el cual se representa por $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2}$

Si se sustituye en la ec. (28) para reducir se obtiene:

$$C_{i,j+1} = -C_{i-1,j} +$$

$$\frac{D \left(C_{i-1,j} - 2C_{i,j} + C_{i+1,j} \right)}{2} - k_1 C_{i-1,j} \Delta t + L_a \Delta t \tag{29}$$

El modelo de Streeter-Phelps dado por la ec. (10) fue complementado por la ec. (21) sin embargo no está en su totalidad completo, a continuación se da un modelo más real de la descarga de un contaminante en un río como se muestra en la Figura 4, en este modelo se anexan los términos de convección y dispersión del contaminante. La forma de deducción es semejante a la forma en que se obtuvo la ec. (20). En este caso sólo daremos las consideraciones pertinentes y las ecuaciones diferenciales parciales no-homogéneas que representas el modelo de la descarga del contaminante en un río, la cual está en términos de la cantidad de materia orgánica y la cantidad de oxígeno disuelto.

Suposiciones:

- Unidimensional
- Área uniforme
- Estado transitorio
- Existen los términos de *desoxigenación, reaireación*
- Coeficiente de dispersión D es constante
- La velocidad es uniforme, es decir u = cte.
- Si la velocidad de descarga L_a es cte.

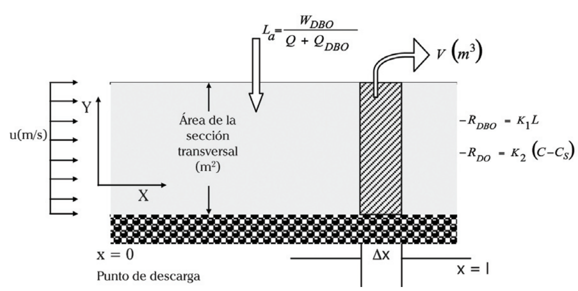

FIGURA 4. MODELO COMPLETO DE DESCARGA DE UN MATERIAL CONTAMINANTE EN UN RÍO.

$$\frac{\partial L}{\partial t} = -u \frac{\partial L}{\partial x} + D \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} - K_1 L + L_a$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - K_1 L + K_2 (C_s - C) \tag{30}$$

Donde:

C Concentración de OD

L Concentración de DBO

W_{DBO} Flux de descarga del contaminante

Q_{DBO} Flujo del efluente

Q Flujo de agua fresca

K_1 Constante cinética de reacción para la desoxigenación

K_2 Constante cinética de reacción para la reaireación

Las ec. (30) están sujetas a las siguientes condiciones iniciales y de frontera:

$$
\begin{array}{llll}
\mathrm{A}t=0 & \mathrm{L}=k_1\mathrm{L}_0 & \forall & x>0 \\
\mathrm{En}\ x=0 & \mathrm{L}=\mathrm{L}_0 & \forall & t>0 \\
\mathrm{En}\ x=\mathrm{L} & \mathrm{L}\longrightarrow \mathrm{L}^{eq} & \forall & t>0 \\
\mathrm{A}t=0 & C=C_0 & \forall & x>0 \\
\mathrm{En}\ x=0 & 2AD\dfrac{\partial C}{\partial x}=W_{DBO} & \forall & t>0 \\
\mathrm{En}\ x=\mathrm{L} & C\longrightarrow C^{eq} & \forall & t>0
\end{array}
\tag{31}
$$

La solución de este sistema de ecuaciones diferenciales parciales lineales no-homogéneas es bastante complejo, de manera que una solución algebraica es prácticamente imposible obtenerla, una de las formas de resolver el problema, es usando el método de diferencias finitas.

Discretizando el modelo completo de descarga de un material contaminante en un río, dado por:

$$
\mathrm{L}_{i,j+1}=-\mathrm{L}_{i,j-1}+\frac{D\left(\mathrm{L}_{i-1,j}-2\mathrm{L}_{i,j}+\mathrm{L}_{i+1,j}\right)}{2}-k_1\mathrm{L}_{i-1,j}\Delta t+\mathrm{L}_a\Delta t
$$

$$
C_{i,j+1}=-C_{i,j-1}+D\frac{\left(C_{i-1,j}-2C_{i,j}+C_{i+1,j}\right)}{2}\Delta t-
k_1\mathrm{L}_{i-1,j}\Delta t-k_2(C_s-C_{i-1,j})\Delta t \tag{32}
$$

Hasta aquí queda la discretización de las ec. Diferenciales parciales del modelo completo de descarga de un contaminante en un río. Ahora sólo falta hacer la evaluación de las ecuaciones diferenciales, para ello se necesita hacer un programa.

Conclusiones

En el desarrollo de este trabajo se derivaron distintos modelos matemáticos, en su mayoría resultaron ecuaciones diferenciales, algunas ordinarias y pocas parciales. Los modelos matemáticos desarrollados tratan de representar la realidad y si se observa conforme se desarrolla el tema fue aumentando el grado de dificultad de los modelos, es decir la solución cada vez fue más difícil de obtener.

Los modelos completos y sencillos de la descarga de un contaminante en un río no tienen solución analítica a menos que se reduzca la ecuación con base a ciertas suposiciones. La forma de solución de dichos modelos se planteó en términos del método de diferencias finitas.

Aquí se muestra la importancia del conocimiento y manejo avanzado de las matemáticas, así como la práctica en el desarrollo de programas computacionales. En especial se debería tener un conocimiento sólido en el manejo de Fortran ya que es un software poderoso debido a su exactitud e integración de librerías que éste contiene en su estructura interna como una herramienta para facilitar la programación y solución de problemas de distintos grados de dificultad.

Otro software que se puede emplear es el Mathematica, ya que este contiene una serie de comandos que facilita la programación y la solución de problemas de distintos grados de dificultad.

Bibliografía

Aris Rutherford

1976 How to Get the Most Out of an Equation Without Really Trying, Chemical Engineering Education, 24(2), páginas.

A. James.

1993 An Introduction to Water Quality Modelling, John Wiley & Sons.

Gerard Kiely

1999 Ingeniería Ambiental. Fundamentos, Entornos Tecnologías y Sistemas de Gestión, McGraw-Hill.

G. D. Smith.

1990 Numerical Solutions of Partial Differential Equations (Finite Difference Methods), Oxford Applied Mathematics and Computing Science series.

Jesús Alberto Ochoa

2001 Notas de Matemáticas. UAM-I.

Dennis G. Zill, Michael R. Cullen

2002 Ecuaciones Diferenciales con Problemas en la Frontera, Thomson Learning.

Schnoor J.L.

1996 Environmental Modelling Fate and transport of pollutants in water, air and soil. John Wiley & Sons, INC.

Ne-Zheng, Sun

1996 Mathematical Modelling of Groundwater Pollution, Springer.

RICH L.G.
1996 Environmental Systems Engineering, McGraw-Hill.

MASTERS G.M.
1991 Introduction to Environmental Engineering and science, Prentice Hall.