Asociación Argentina



de Mecánica Computacional

Mecánica Computacional Vol XXX, págs. 3577-3594 (artículo completo) Oscar Möller, Javier W. Signorelli, Mario A. Storti (Eds.) Rosario, Argentina, 1-4 Noviembre 2011

UN ENFOQUE DE OPTIMIZACIÓN PARA EL CONTROL DE VERTIDO DE EFLUENTES URBANOS EN RÍOS

Cecilia I. Stoklas^a y Víctor H. Cortínez^{a,b}

^aCentro de Investigaciones en Mecánica Teórica y Aplicada, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Bahía Blanca, 11 de Abril 461, 8000 Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina, stoklas@frbb.utn.edu.ar, vcortine@frbb.utn.edu.ar, http://www.frbb.utn.edu.ar

^bCONICET

Palabras Clave: Diseño Óptimo, Problema Adjunto, Método de "Recocido Simulado", Modelo Hidrodinámico, Modelo de Transporte, Elementos Finitos

Resumen. Uno de los problemas ambientales de gran importancia en la actualidad es la contaminación hídrica, generada básicamente por la descarga de efluentes urbanos.

El deterioro ambiental que vienen sufriendo estos recursos naturales ha llegado a niveles tan altos que ha puesto de manifiesto la necesidad urgente de instalar plantas de tratamiento adecuadamente diseñadas.

En tal sentido, se propone en este trabajo, un enfoque de diseño óptimo para la determinación de la localización de las tuberías de descargas de efluentes así como también del grado de tratamiento necesario para garantizar un nivel de contaminación tolerable en ciertas zonas de resguardo ambiental tales como playas, reservas naturales, toma de agua potable, etc., buscando simultáneamente minimizar el correspondiente costo económico.

Para ello, se ha desarrollado una herramienta computacional de diseño óptimo integrada con un procedimiento de simulación, basado en el método de los elementos finitos (MEF).

En particular se consideran como indicadores ambientales, adecuados para este tipo de problema, el oxígeno disuelto (OD), la demanda bioquímica de oxígeno (DBO) y los Coliformes fecales (CF).

El problema de optimización es resuelto a partir del método de "Recocido Simulado". Asimismo, a los efectos de minimizar los tiempos de cálculo, las restricciones del problema se determinan mediante el uso de funciones de influencia obtenidas convenientemente a partir del problema adjunto del modelo de transporte.

1 INTRODUCCIÓN

La descarga de efluentes cloacales en cursos de agua es una problemática ambiental que prima en la actualidad. A medida que la población aumenta, sucede lo mismo con los efluentes urbanos, ocasionando un deterioro en el medio acuático al sobreexplotarlo a un ritmo mayor que su propia capacidad de autodepuración natural.

La contaminación provocada por tales efluentes en los cuerpos de agua de destino, alcanza niveles que pueden medirse utilizando diversos indicadores: entre los más importantes pueden mencionarse la concentración de Coliformes fecales (CF), puesto que los efluentes industriales no poseen en general tales bacterias, el oxígeno disuelto (OD) y la materia orgánica, la cual es medida a través de la necesidad de oxígeno para descomponerla, tal indicador es denominado demanda bioquímica de oxígeno (DBO). Si dicha materia orgánica se incrementa mas allá de un valor máximo, el oxígeno disuelto no es suficiente para su descomposición lo que da lugar a procesos anaeróbicos que tienen un alto impacto en el ecosistema. Para evitarlo, la demanda bioquímica de oxígeno no debe exceder cierto valor umbral, mientas que el oxígeno disuelto no debe disminuir más allá de cierto valor crítico.

Por esta razón, resulta imprescindible considerar estos indicadores de calidad de agua y establecer las correspondientes concentraciones máximas (o mínimas) admisibles para garantizar un nivel de contaminación tolerable en zonas predeterminadas de resguardo ambiental tales como zonas de pesca, recreación, reservas naturales, toma de agua potable, riego, etc.

A los efectos de no superar las restricciones ambientales en las zonas aludidas, las aguas residuales deben ser purificadas previamente a su vertido mediante la instalación de plantas de tratamiento adecuadamente diseñadas. Sin embargo la construcción y operación de estas plantas de tratamiento implica un elevado costo que depende básicamente de las variables de diseño de mayor importancia (capacidad de tratamiento y ubicación de la tubería submarina de descarga), debiéndose adoptar una solución de compromiso técnico, económico y ambiental en su diseño (Álvarez-Vazquez et al. 2008; Murty et al. 2006; Yu, L. y Salvador, N.N.B., 2005). En tal sentido se propone un enfoque basado en el diseño óptimo, con el objeto de establecer la mejor localización de las salidas de descargas de los efluentes cloacales, y determinar el nivel de depuración adecuado de tratamiento de los efluentes a los efectos de cumplir con tales restricciones.

En el presente trabajo se desarrolla una herramienta computacional para la obtención del diseño óptimo de las variables aludidas, empleando para ello un proceso integrado de simulación basado en el método de elementos finitos (MEF).

A los efectos de poder establecer el mejor diseño, es necesario en primer lugar calcular una expresión matemática que determine el costo de tratamiento y de construcción en función de las variables de diseño seleccionadas y luego plantear un método adecuado para la estimación de los niveles de concentración de CF, OD y DBO en las zonas protegidas. Tal estimación se logra mediante la solución obtenida con el MEF de las ecuaciones bidimensionales hidrodinámicas para aguas poco profundas y de transporte de sustancias disueltas. En el presente trabajo se considera como ejemplo un caso de descarga de efluentes provenientes de tres ciudades que se encuentran en cercanías a un río con la existencia de dos zonas de resguardo ambiental.

Sin embargo, considerando la cantidad de alternativas posibles que pueden realizarse en el proceso de diseño, se desarrollan fórmulas analíticas para la evaluación de las concentraciones en las zonas protegidas haciendo uso de coeficientes de influencia, obtenidos a partir de unas pocas simulaciones del modelo hidrodinámico mediante el MEF, como también del denominado problema adjunto de transporte. Con tales fórmulas analíticas el proceso de

diseño óptimo es resuelto convenientemente a través del método conocido como "Recocido Simulado", en inglés Simulated Annealing (SA), por su analogía con el proceso físico de enfriamiento de metales.

El modelo computacional planteado es implementado en el programa de elementos finitos FlexPDE (PDE Solution Inc, 2005).

Finalmente se analizan algunos ejemplos para determinar las ventajas de la presente metodología.

2 DISEÑO ÓPTIMO

El problema ambiental considerado consiste en el diseño de *N* plantas de tratamiento de efluentes urbanos que vierten a un río las aguas servidas en exceso a sus capacidades.

Se pretende obtener las coordenadas de las salidas de tuberías de descarga y las capacidades de tratamiento a los efectos de minimizar el costo total de construcción y operación, procurando que las concentraciones de DBO, OD y CF se encuentren dentro de los valores admisibles en ciertas zonas preseleccionadas dentro del río. El problema planteado corresponde al caso en el cual todas las plantas dependen de la misma organización.

A continuación se definen las expresiones matemáticas de los costos asociados, para luego formular el problema de optimización.

2.1 Determinación de los costos

Los costos están directamente relacionados al sistema de depuración que se pretenda implementar, los cuales dependen de varios factores tales como la magnitud del caudal a tratar, su composición, el financiamiento del proyecto y por supuesto del nivel de depuración final que se desee. De esta forma los costos pueden agruparse en costos de inversión (C_I), relacionados con las actividades necesarias para la construcción de la infraestructura física de la planta de tratamiento, los costos de funcionamiento (C_{MO}) que incluyen mano de obra, energía, entre otros, y los costos de construcción de la tubería de descarga submarina (C_L).

De acuerdo a la referencia (Friedler, E. y Pisanty, E., 2006), los costos de inversión para un tratamiento secundario pueden estimarse como:

$$C_{I_{j}} = \frac{8988}{vu} Q T_{j}^{s} \quad , \tag{1}$$

donde C_I es el costo inicial de inversión [US\$/años] de la planta *j*, *vu* corresponde a la vida útil [años] estimada de la planta de tratamiento, *s* es un parámetro adimensional menor que 1 y QT_j es la capacidad de la planta en [m³/día], entendiéndose como tal el caudal máximo de agua residual que puede depurar la planta de tratamiento.

Por otra parte es posible expresar los costos de mantenimiento y operación C_{MOj} [US\$/año] de la planta mediante una fracción del costo de inversión (Friedler, E. y Pisanty, E., 2006).

El costo por construcción de la tubería de descarga [US\$/año] puede ser considerado proporcional a su longitud (Salas, H. J., 2000). Luego, los costos totales anuales se calculan sumando las contribuciones aludidas:

$$CT_{j} = \frac{8988}{(1-r)vu} QT_{j}^{s} + \frac{k}{vu} \sqrt{\left(x_{j} - Fx_{j}\right)^{2} + \left(y_{j} - Fy_{j}\right)^{2}} \quad , \tag{2}$$

siendo *k* el costo por metro construido de tubería [US\$/m], Fx_j y Fy_j corresponden a las coordenadas de descarga de efluentes, x_j e y_j son las coordenadas de las plantas de tratamiento. Por otra parte *r* es una función (adimensional) de la capacidad de la planta QT_j [m³/día] que puede expresarse de la siguiente manera (Friedler, E. y Pisanty, E., 2006):

$$r = 0.352 + 6.557 \times 10^{-6} QT_i - 6.429 \times 10^{-11} QT_i^2 \quad , \tag{3}$$

2.2 Formulación del problema de diseño óptimo

La capacidad de tratamiento necesaria de cada planta puede expresarse en la forma:

$$QT_j = Q_j \left(1 - \beta_j \right) \quad , \tag{4}$$

donde Q_j corresponde al caudal volumétrico máximo de aguas residuales que arriba a cada planta y $(1-\beta_j)$ indica el grado de purificación de la planta, siendo β_j el factor de reducción en las tasas de vertido y varía entre 0 (reducción máxima) y 1 (reducción mínima). Consecuentemente, las descargas volumétricas residuales (sin purificar) vendrán dadas por $\beta_j Q_j$.

La función objetivo Z a minimizar corresponde al costo total de las N plantas de tratamiento existentes.

Entonces, el problema de diseño óptimo puede ser formulado de la siguiente manera:

minimizar
$$Z = \sum_{j=1}^{N} \left[\frac{8988}{(1-r)vu} QT_{j}^{s} + \frac{k}{vu} \sqrt{\left(x_{j} - Fx_{j}\right)^{2} + \left(y_{j} - Fy_{j}\right)^{2}} \right] , \qquad (5)$$

sujeto a las restricciones:

$$\begin{split} 0 &\leq \beta_{j} \leq 1 \quad , \ \left(Fx_{j}, Fy_{j}\right) \in R_{j} \\ C_{i \ DBO} &\leq C_{adm \ DBO} \quad , \ C_{i \ OD} \geq C_{adm \ OD} \quad , \ C_{i \ CF} \leq C_{adm \ CF} \end{split}$$

donde R_j es el área posible de descarga para la tubería *j-ésima*, C_i_{DBO} , C_i_{OD} y C_i_{CF} son las concentraciones de DBO, OD y CF en la zona protegida *i-ésima*, mientras que $C_{adm \ DBO}$, $C_{adm \ OD}$ y $C_{adm \ CF}$ corresponden a los niveles admisibles permitidos de tales indicadores.

Es posible en forma alternativa, incorporar alguna de las restricciones en la función objetivo mediante un término de penalización. De esta manera el problema anterior es redefinido de la siguiente forma equivalente:

$$Z_{p} = Z + \left(\lambda_{A} + \lambda_{B} + \lambda_{C}\right) \quad , \tag{6}$$

donde Z es la función objetivo definida en (5) y λ_A es el factor de penalización del DBO, λ_B del OD y λ_C del CF, para la *i-ésima* zona protegida, dados por:

$$\lambda_{A} = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad C_{i \,\text{DBO}} < C_{\text{adm} \,\text{DBO}} \\ 10^9 & \text{si} \quad C_{i \,\text{DBO}} \ge C_{\text{adm} \,\text{DBO}} \end{cases}$$
(7)

$$\lambda_{B} = \begin{cases} 0 & \text{si } C_{i \text{ OD}} > C_{adm \text{ OD}} \\ 10^{9} & \text{si } C_{i \text{ OD}} \le C_{adm \text{ OD}} \end{cases}$$
(8)

$$\lambda_{C} = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad C_{i CF} < C_{adm CF} \\ 10^{9} & \text{si} \quad C_{i CF} \ge C_{adm CF} \end{cases}$$
(9)

Así, cuando la restricción ambiental no se cumpla, las expresiones (7, 8 y 9) adoptarán un valor muy grande y se descartarán de las tantas soluciones posibles. Por otra parte las restricciones sobre las variables de diseño β_i , Fx_i y Fy_i no varían.

3 MODELO HIDRODINÁMICO

El modelo hidrodinámico empleado está basado en la teoría de aguas poco profundas, la cual consiste en una ecuación de continuidad y dos de movimiento, formuladas en un dominio

bidimensional (Rubin, H. y Atkinson, J., 2001). Reordenando tales ecuaciones y considerando que el régimen es estacionario, es posible obtener la siguiente ecuación gobernante:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho g H^2}{\alpha} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\rho g H^2}{\alpha} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\varphi W_x H}{\alpha} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\varphi W_y H}{\alpha} \right) \quad , \tag{10}$$

donde ρ es la densidad, g la gravedad, H la profundidad determinada por la diferencia entre las cotas correspondientes a la superficie libre η y el fondo Z_b (ver Figura 1), φ y α son los parámetros de fricción en la superficie y en el fondo, definidas de acuerdo a las siguientes expresiones (Tsanis, I.K. y Saied, U., 2001):

$$\varphi = \rho C_s \sqrt{W_x^2 + W_y^2} \qquad , \qquad (11)$$
$$\alpha = \rho C_b \sqrt{U^2 + V^2} \qquad ,$$

siendo C_b y C_s los coeficientes de fricción adimensionales, W_x y W_y son las componentes x e y de velocidad del viento y U y V las velocidades horizontales de la corriente promediadas en la profundidad que se expresan en función de η de la siguiente manera:

$$U = \frac{-\rho g H}{\alpha} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\varphi W_x}{\alpha},$$

$$V = \frac{-\rho g H}{\alpha} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\varphi W_y}{\alpha},$$
(12)



Figura 1: Sistema de coordenadas y plano de referencia

Las condiciones de borde para este problema se establecen como:

$$q_n = \frac{-\rho g H^2}{\alpha} \frac{\partial \eta}{\partial n} + \frac{\varphi W_n H}{\alpha} \quad , \tag{13}$$

donde q_n representa el flujo normal saliente al borde (conocido). Además debe establecerse el valor de η en algún punto para que dicha variable no sea indeterminada.

4 MODELO DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

La evolución de la concentración de una sustancia en un medio acuático se puede modelar mediante la ecuación de transporte de sustancias disueltas (Rubin, H. y Atkinson, J., 2001) cuya forma bidimensional para el DBO, OD y CF es:

$$UH \frac{\partial C_{DBO}}{\partial x} + VH \frac{\partial C_{DBO}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(KH \frac{\partial C_{DBO}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(KH \frac{\partial C_{DBO}}{\partial y} \right) + H\sigma C_{DBO} =$$

$$\sum_{j=1}^{N} M_{DBO j} \delta(x - x_j) \delta(x - x_j)$$
(14)

$$UH\frac{\partial C_{oD}}{\partial x} + VH\frac{\partial C_{oD}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}\left(KH\frac{\partial C_{OD}}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(KH\frac{\partial C_{OD}}{\partial y}\right) + H\sigma C_{DBO} - \gamma H\left(d_s - C_{OD}\right) = 0, \quad (15)$$

$$UH \frac{\partial C_{CF}}{\partial x} + VH \frac{\partial C_{CF}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(KH \frac{\partial C_{CF}}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(KH \frac{\partial C_{CF}}{\partial y} \right) + H \omega C_{CF} = \sum_{j=1}^{N} M_{CF j} \delta(x - x_j) \delta(x - x_j)$$
(16)

donde $C_{DBO}(x,y)$, $C_{OD}(x,y)$ y $C_{CF}(x,y)$ corresponden a las concentraciones de DBO, OD y CF respectivamente, *K* es el coeficiente de dispersión, σ y ω son las constantes de velocidad de degradación del DBO y CF, γ es la constante de transferencia de OD a través de la superficie, d_s es la saturación de oxígeno disuelto, *N* es el número de fuentes y δ la función Delta de Dirac. Por otro lado, $M_{DBO j}$ y $M_{CF j}$ son los flujos másicos residuales de DBO y CF y se expresan de la siguiente manera:

$$M_{DBOj} = C^0_{DBOj} Q_j \beta_j , \qquad (17)$$

$$M_{\rm CFj} = C_{\rm CFj}^0 Q_j \beta_j \quad , \tag{18}$$

siendo $C^0_{DBO j}$ y $C^0_{CF j}$ las concentraciones de DBO y CF correspondientes al flujo residual saliendo por la tubería de descarga *j-ésima*.

Las ecuaciones (14 y 16) están sujetas a las siguientes condiciones de frontera:

$$-KH\frac{\partial C_{DBO}}{\partial n} + \varepsilon HV_n C_{DBO} = 0 , \qquad (19)$$

$$-KH \frac{\partial C_{CF}}{\partial n} + \varepsilon HV_n C_{CF} = 0 \quad , \tag{20}$$

donde V_n es la velocidad normal al borde del dominio, $\varepsilon = 1$ en bordes impermeables y en puntos de la superficie de entrada de flujo, mientras que $\varepsilon = 0$ en puntos de la superficie de salida de flujo (Parra-Guevara, D. y Skiba, Y. N., 2000). Para la ecuación (15) se asume un valor conocido, C⁰_{OD} aguas arriba, de concentración de OD en puntos de la superficie de entrada de flujo donde:

$$C_{OD} = C_{OD}^0 , \qquad (21)$$

mientras que para bordes impermeables (con $\varepsilon = 1$) y para puntos de la superficie de salida de flujo (con $\varepsilon = 0$), las condiciones de borde para C_{OD} se expresan como:

$$-KH \frac{\partial C_{OD}}{\partial n} + \varepsilon HV_n C_{OD} = 0 \quad , \tag{22}$$

5 DETERMINACIÓN DE LOS COEFICIENTES DE INFLUENCIA: PROBLEMA ADJUNTO

Es posible obtener fórmulas analíticas para la determinación de las concentraciones de DBO, OD y CF en las zonas protegidas, mediante la aplicación de los llamados coeficientes de influencia G_{ij} asociados a las expresiones (14, 15 y 16). Tales coeficientes miden el efecto

que tiene un flujo unitario de contaminante de la tubería de descarga j sobre cada área protegida i.

Multiplicando tales coeficientes por las descargas másicas de cada tubería y sumando luego todas las contribuciones, se llega a las siguientes fórmulas para determinar las concentraciones en dichas áreas:

$$C_{DBO}(x_i, y_i) = \sum_{j=1}^{N} C_{DBO j}^0 Q_j \beta_j G1a_{ij} , \qquad i = 1, 2, \dots NZ$$
(23)

$$C_{OD}(x_i, y_i) = C_{OD}^0 + \int_{\Omega} GIb_{ij} \ \gamma H(d_s - C_{OD}^0) dx dy + \sum_{j=1}^N C_{DBO \ j}^0 \ Q_j \ \beta_j \ G2b_{ij} \ , \ i = 1, 2, \dots NZ$$
(24)

$$C_{CF}(x_i, y_i) = \sum_{j=1}^{N} C_{CF j}^0 Q_j \beta_j G c_{ij} , \qquad i = 1, 2, \dots, NZ$$
 (25)

donde NZ es el número de zonas protegidas.

Para obtener los coeficientes de influencia $G1a_{ij}$, $G1b_{ij}$, $G2b_{ij}$ y Gc_{ij} se hace uso del problema adjunto asociado a las ecuaciones (14, 15 y 16) y (19, 20, 21 y 22) (Marchuk, G. I, 1986).

En particular, para en el caso de la ecuación (16) correspondiente a CF, se multiplica dicha expresión por una función arbitraria Gc_i y luego se integra por partes, obteniendo así:

$$\int_{\Omega} C_{CF} \left(-UH \frac{\partial Gc_i}{\partial x} - VH \frac{\partial Gc_i}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left(KH \frac{\partial Gc_i}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(KH \frac{\partial Gc_i}{\partial y} \right) + H \omega Gc_i \right) dxdy = \sum_{j=1}^{N} C_{CF}^0 g_j \beta_j Gc_i \left(x_j, y_j \right) + \oint_{\Gamma} \left(Gc_i HC_{CF} V_n + KH \frac{\partial Gc_i}{\partial n} C_{CF} - Gc_i KH \frac{\partial C_{CF}}{\partial n} \right) ds$$
(26)

A partir de esta última expresión, se obtiene la fórmula (25) si se definen los coeficientes de influencia como:

$$Gc_{ij} = Gc_i(x_j, y_j) \quad , \tag{27}$$

se consideran las condiciones de borde (20) y se selecciona la función $Gc_i(x,y)$ de tal manera que verifique la siguiente ecuación diferencial:

$$-UH\frac{\partial Gc_i}{\partial x} - VH\frac{\partial Gc_i}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}\left(KH\frac{\partial Gc_i}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(KH\frac{\partial Gc_i}{\partial y}\right) + H \ \omega \ Gc_i = \delta\left(x - x_i\right)\delta\left(y - y_i\right) \quad , \tag{28}$$

con las condiciones de borde:

$$KH \frac{\partial Gc_i}{\partial n} + \tau HV_n Gc_i = 0 \quad , \tag{29}$$

donde $\tau = 0$ en bordes impermeables y en puntos de la superficie de entrada de flujo, mientras que $\tau = 1$ en puntos de la superficie de salida de flujo. Las expresiones (28) y (29) corresponden al problema adjunto del sistema (16) y (20).

Para la obtención de los coeficientes de influencia $G1a_{ij}$, $G1b_{ij}$ y $G2b_{ij}$, se opera de manera similar a la desarrollada para CF con las ecuaciones (14) y (15) de DBO y OD respectivamente considerando sus correspondientes condiciones de borde (19), (21) y (22). Los detalles pueden ser consultados en el trabajo de (Stoklas, C., 2011). De esta forma, se obtienen las expresiones (23) y (24) definiendo los coeficientes de influencia como:

$$G1a_{ij} = G1a_i(x_j, y_j) ,$$

$$G1b_{ij} = G1b_i(x_j, y_j) ,$$

$$G2b_{ij} = G2b_i(x_j, y_j) ,$$

$$(30)$$

y seleccionando las funciones $G1a_i(x,y)$, $G1b_i(x,y)$ y $G2b_i(x,y)$ de tal manera que verifiquen las siguientes ecuaciones diferenciales:

$$-UH\frac{\partial GIa_{i}}{\partial x} - VH\frac{\partial GIa_{i}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}\left(KH\frac{\partial GIa_{i}}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(KH\frac{\partial GIa_{i}}{\partial y}\right) + H \sigma GIa_{i} = \delta(x - x_{i})\delta(y - y_{i}), \quad (31)$$

$$-UH\frac{\partial GIb_{i}}{\partial x}-VH\frac{\partial GIb_{i}}{\partial y}-\frac{\partial}{\partial x}\left(KH\frac{\partial GIb_{i}}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial y}\left(KH\frac{\partial GIb_{i}}{\partial y}\right)+H\gamma GIb_{i}=\delta(x-x_{i})\delta(y-y_{i}) \quad , \quad (32)$$

$$-UH\frac{\partial G2b_i}{\partial x} - VH\frac{\partial G2b_i}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x}\left(KH\frac{\partial G2b_i}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial y}\left(KH\frac{\partial G2b_i}{\partial y}\right) + H \sigma G2b_i + H\sigma G1b_i = 0 \quad , \quad (33)$$

con las siguientes condiciones de borde:

$$KH \frac{\partial Gla_i}{\partial n} + \tau_A HV_n Gla_i = 0 \quad , \tag{34}$$

$$G1b_i = 0 \quad , \tag{35}$$

$$G2b_i = 0 \quad , \tag{36}$$

$$KH \frac{\partial Glb_i}{\partial n} + \tau_B HV_n Glb_i = 0 \quad , \tag{37}$$

$$KH \frac{\partial G2b_i}{\partial n} + \tau_B HV_n G2b_i = 0 \quad , \tag{38}$$

donde para la expresión (34), $\tau_A = 0$ en bordes impermeables y en puntos de la superficie de entrada de flujo, mientras que $\tau_A = 1$ en puntos de la superficie de salida de flujo. Por otra parte las expresiones (35) y (36) valen en puntos de la superficie de entrada de flujo, mientras que las expresiones (37) y (38) se aplican para bordes impermeables (con $\tau_B = 0$) y en puntos de superficie de salida de flujo (con $\tau_B = 1$)

Debe observarse que para obtener los coeficientes de influencia es necesario resolver el problema de contorno dado por las ecuaciones (28), (29), (31-38) tantas veces como zonas protegidas se consideren (independientemente de la ubicación de las salidas de tuberías o de su cantidad). Como estas zonas son limitadas en número, tal estrategia presupone un notable ahorro de tiempo computacional.

6 MÉTODO DE SOLUCIÓN

A efectos de resolver el problema de diseño óptimo planteado, es necesario en primer lugar obtener las velocidades hidrodinámicas. Para ello se resuelven las ecuaciones (10) y (13) mediante el MEF.

Conociendo la velocidad de la corriente es posible resolver, también mediante el MEF, los problemas de transporte adjuntos (28), (29) y (31-38) para cada una de las zonas protegidas consideradas, determinando así los coeficientes de influencia mediante las expresiones (27) y (30). Finalmente, las concentraciones en las áreas de resguardo ambiental son calculadas con las expresiones (23), (24) y (25). De esta manera el problema se reduce a un proceso de búsqueda de las variables de diseño β_j , Fx_j y Fy_j , mediante el método de SA evaluando en

3584

cada caso la función objetivo generalizada, dada por (6). Es claro que las variables óptimas serán aquellas que minimicen tal función.

6.1. Implementación computacional

El procedimiento mencionado en el apartado anterior ha sido implementado en el programa de elementos finitos FlexPDE (FlexPDE 5.08, User Manual, 2005). Este programa resuelve ecuaciones diferenciales a derivadas parciales de 1° y 2° orden en una, dos y tres dimensiones tanto para problemas estacionarios como dependientes del tiempo gobernadas mediante sistemas de ecuaciones lineales y no lineales.

Como aspecto específico, tal sistema no está basado en una librería de modelos predefinida, sino que la elección de las ecuaciones diferenciales a derivadas parciales y la geometría del dominio deben ser definidas por el usuario en una interfaz amigable. Además permite la definición de regiones con distintas propiedades, por lo que muchos problemas diferentes pueden ser resueltos con el mismo software.

Básicamente se trata de un ambiente computacional para la resolución de problemas iniciales y de contorno, que comprende las diversas etapas necesarias para el análisis: un generador de malla, un simulador basado en elementos finitos, y un sistema gráfico para presentar los resultados.

Además, posee un estimador de error relativo que gobierna automáticamente el remallado del dominio hasta alcanzarse un error (rms) estimado del orden de la tolerancia solicitada por el usuario.

Se han realizado varios experimentos numéricos, no mostrados en el presente artículo, con el propósito de estudiar la efectividad de este programa para resolver el tipo de ecuaciones involucradas en este trabajo. En particular para el problema hidrodinámico se han comparado los resultados numéricos con otros determinados con un modelo diferente aunque equivalente basado en funciones de corriente. Tales comparaciones arrojaron soluciones prácticamente coincidentes entre sí, con errores máximos del mismo orden que el error tolerable solicitado. Para el problema de transporte (y sus correspondientes ecuaciones adjuntas), se han efectuado comparaciones para varios casos particulares con soluciones analíticas exactas provistas por la literatura. También en tales casos, los resultados fueron muy cercanos a los analíticos con errores máximos del orden de los tolerables solicitados. Es un hecho conocido que las ecuaciones de transporte, es decir advectivas-difusivas, suelen presentar dificultades en su resolución numérica mediante elementos finitos o diferencias finitas para velocidades elevadas. El éxito del presente programa se basa en parte en la utilización de funciones de forma tipo "contra corriente". Más detalles al respecto pueden ser consultados en el trabajo de (Stoklas, C., 2011).

El sistema FlexPDE permite además realizar varias operaciones algebraicas como así también operaciones lógicas. Es factible también efectuar diversas formulaciones de manera secuencial (tipo BATCH) transfiriendo información entre tales subprogramas. Esto hizo posible la programación del modelo de optimización, integrando dentro del mismo sistema las soluciones mediante el MEF con la técnica de optimización SA que se explica en la próxima sección. Esta aplicación puede tener alguna originalidad ya que en principio el programa FlexPDE no fue pensado como un optimizador.

Tal estrategia no es la única posible, por ejemplo una alternativa interesante es la programación del método de optimización en un programa de álgebra computacional tal como MATLAB, desde el cual se invoca FlexPDE para realizar las simulaciones numéricas. Un ejemplo de tal estrategia puede ser encontrado en el artículo de (Cortínez, V.H. y Sequeira, M.E., 2010).

6.2. Método de "Recocido Simulado" (Simulated Annealing)

Se trata de una técnica heurística de optimización (Cortínez, V.H. y Sequeira, M.E, 2009) basada en una generación aleatoria de soluciones factibles, cuya principal característica es la de encontrar una buena aproximación al valor óptimo global de una función evitando la convergencia local en problemas de gran escala. En la Figura 2 se muestra el correspondiente algoritmo, donde *X* es el conjunto de variables de diseño β_j , Fx_j y Fy_j , E_f es la tolerancia de error de la función *Zp*, definida en (6). Por otra parte el parámetro \bar{a} se calcula en la forma:

$$\overline{a} = \left(\frac{T_i}{T_{\text{max}}}\right)^s \quad , \tag{39}$$

donde T_i es el número de iteración *i-ésima*, $T_{máx}$ es el número total de iteraciones y \overline{s} corresponde a un parámetro de ajuste mayor a 1. A medida que el algoritmo avanza, \overline{a} va aumentando de manera tal que la probabilidad de aceptar aquellas soluciones factibles que no mejoren la función objetivo va disminuyendo.

Paso 1. Inicializar Variables de Diseño:						
$X_{min} = X_0, X_{corriente} = X_0, Zp_{min} = Zp(X_0), Zp_{corriente} = Zp(X_0)$						
Paso 2. Repetir <i>iter</i> veces						
2.1 Calcular $X' \in N(X)$ (entorno de X) y evaluar el cambio en la función objetivo						
$\Delta = Zp(X') - Zp_{corriente}$						
2.2 Decidir si X' es aceptada						
si $\Delta < 0$ ir a 2.3						
si no generar una variable aleatoria $p \in (0,1)$						
si $p < \exp\left(-\frac{\overline{a}\Delta}{ Zp_{corriente} E_f }\right)$ ir a 2.3						
si no ir a 2.1						
2.3 Actualizar $X_{corriente} = X' y Z p_{corriente} = Z p(X')$.						
Decidir si corresponde al valor mínimo:						
Si $Zp(X') < Zp_{min}$ ir a 2.4						
Si no, ir a 2.1						
2.4 Actualizar $X_{min} = X' y Z p_{min} = Z p(X')$ ir a 2.1						

Figura 2: Algoritmo de "recocido simulado".

7 RESULTADOS NUMÉRICOS

Se presenta, a modo de ejemplo, un tramo de un río de 20 kilómetros de largo con cuatro islas en su interior y una profundidad media de 6 metros.

En el mismo se encuentran dos zonas de resguardo ambiental, una ubicada en la costa de una de las islas y la otra en la costa del margen superior del río, donde los niveles de concentración de los indicadores pertinentes no cumplen con los valores admisibles, a causa de las descargas directas de efluentes urbanos provenientes de tres ciudades aledañas. Se adoptaron como valores de descargas másicas de DBO generadas en cada ciudad, 0.300 kg/s para la primera (ubicada en la costa inferior) y 0.250 kg/s para la segunda y tercera, y para CF se consideraron concentraciones de $10x10^6$ NMP/100ml para la primera y $7x10^6$ NMP/100ml para las otras dos ciudades, siendo el caudal de agua residual de cada una de 0.59 m³/s. Asimismo se asume que aguas arriba la concentración de OD es de 8.08e-3 kg/ m³.

Es importante mencionar que el presente diseño se realizó para la condición de aguas bajas, ya que los niveles de concentración de los indicadores pueden exceder los valores límites debido a la menor dilución (escenario más desfavorable). Por otra parte se desprecia el efecto del viento.

Para el coeficiente de fricción C_b se adopta un valor adimensional igual a 0.0025 y para el coeficiente de dispersión *K* un valor de 9 m²/s.

En el presente trabajo, a modo indicativo, los valores de admisibilidad adoptados para el DBO, OD y CF son $5.241 \times 10^{-4} \text{ kg/m}^3$, $8.038 \times 10^{-3} \text{ kg/m}^3$ y 1000 NMP/100ml, respectivamente.

De acuerdo al procedimiento explicado en el apartado anterior, mediante el cálculo del modelo hidrodinámico en el programa de elementos finitos FlexPDE, se obtuvo el régimen de corrientes en el cuerpo de agua obteniendo el campo de velocidades indicado en la Figura 3a.

Una vez conocidos tales valores, se determinó la distribución espacial de DBO, OD y CF en el río a partir de la solución mediante el MEF del modelo de transporte de sustancias disueltas dado por las ecuaciones (14-16) y sus correspondientes condiciones de borde. Los resultados obtenidos ponen de manifiesto la necesidad de implementar plantas de tratamiento adecuadamente diseñadas. Así, por ejemplo, la Figura 3b se muestra la distribución de CF generada por la descarga de efluentes indicados con círculos negros, donde es posible observar que los niveles de concentración en las dos zonas protegidas (1500 y 2000 NMP/100ml respectivamente), indicadas con cruces negras, no cumplen con los valores de admisibilidad. En la Figura 3c se observa la distribución de CF en cercanías de las zonas de resguardo ambiental.



Figura 3a: Velocidades Hidrodinámicas



Figura 3b: Distribución de CF



Figura 3c: Distribución de CF. Vista ampliada de las zonas de descarga.

En tal sentido se analiza la construcción de tres plantas de tratamiento considerando dos problemas de diseño. En el primero de ellos (A) se supone que las ubicaciones de las tuberías de descarga son prefijadas, de tal manera que las variables de diseño corresponden a los valores de β_j , para cada planta. El problema (B) es más general siendo las variables de diseño tanto los β_j como las coordenadas de salida de cada una de las tuberías de descarga Fx_j y Fy_j .

Para el problema (A) se realizan y comparan cuatro enfoques alternativos:

- 1. Diseño de referencia,
- 2. Método de SA (empleando 300 iteraciones),

- 3. Búsqueda aleatoria (empleando 300 iteraciones), y
- 4. Fórmula analítica.

Cabe aclarar que el diseño de referencia es arbitrario y factible, ya que verifica las restricciones ambientales del problema y se lo utiliza a los efectos de ser comparado con los enfoques de optimización. En tal sentido se supone la construcción de tales plantas de tratamiento con un coeficiente de reducción β_j igual a 0.4 y las siguientes coordenadas [m] de descarga Fx_j y Fy_j : (9500; 8900), (6300; 8700) y (9000; 9200).

Las variables de diseño determinadas mediante el enfoque 3 corresponden a un simple método de prueba y error. Por otra parte la fórmula analítica utilizada en el enfoque 4 permite asegurar el cumplimiento de las restricciones ambientales considerando que la depuración depende de la suma de todas las contribuciones de las descargas *j*, multiplicado por el mayor coeficiente de influencia para la zona protegida *i*, como se demuestra en (Parra-Guevara, D. y Skiba, Y. N., 2000). Su expresión viene dada por:

$$\beta_{j} \leq \frac{C_{adm}}{\left(\sum_{j=1}^{N} C_{j}^{0} \mathcal{Q}_{j}\right) Max_{i}\left(G_{ij}\right)} \quad , \tag{40}$$

donde C_{adm} y C_{j}^{0} corresponden a los valores de admisibilidad y concentración de la descarga j-ésima, respectivamente, del indicador que se desee evaluar (DBO, OD, CF), mientras que G_{ij} es el coeficiente de influencia asociado al indicador en cuestión, en la zona *i-ésima* debido a la descarga *j-ésima*.

El resultado de tal comparación se presenta en la Tabla 1.

Puede observarse que todos los diseños propuestos cumplen con las restricciones ambientales. Sin embargo, el desarrollo de acuerdo al método de SA (enfoque 2) implica el menor costo, siendo aproximadamente del orden del 50% de las opciones 1 y 4 y del 75% de la opción 3. El tiempo de cómputo del método de SA es aproximadamente de 20 minutos.

		Enfoque 1	Enfoque 2	Enfoque 3	Enfoque 4
Nivel de	DBO (kg/m^3)	3.8423E-05	7.7913E-05	7.0139E-05	6.7667E-05
concentración en zona protegida (isla)	OD (kg/m^3)	8.1207E-03	8.0782E-03	8.0787E-03	8.0792E-03
	CF (NMP/100ml)	609	960	885	912
Nivel de concentración en zona protegida (costa)	DBO (kg/m^3)	4.7179E-05	5.9722E-06	5.9883E-05	3.5526E-05
	OD (kg/m^3)	8.0748E-03	8.0702E-03	8.0712E-03	8.0762E-03
	CF (NMP/100ml)	514	684	619	370
Factor de reducción de las tres plantas	β1	0.4	0.14	0.17	0.27
	β2	0.4	1	0.94	0.49
	β3	0.4	1	0.81	0.62
Longitud de tuberías de descarga	L1 (m)	550	522	522	522
	L2 (<i>m</i>)	715	1069	1069	1069
	L3 (m)	850	1346	1346	1346
Costo Total Anual	CT (US\$/año)	3 670 411	1 994 730	2 625 825	3 566 350

Tabla 1: Comparación de valores de los enfoques calculados, problema (A)

En la Tabla 2 se comparan diseños para el problema (B) obtenidos mediante los siguientes enfoques:

- 1. Diseño de referencia (el mismo del problema A),
- 2. Método de SA (empleando 300 iteraciones), y
- 3. Búsqueda aleatoria (empleando 300 iteraciones).

		Enfoque 1	Enfoque 2	Enfoque 3
Nivel de concentración en zona protegida (isla)	DBO (kg/m^3)	3.8423E-05	5.9692E-05	4.4354E-05
	OD (kg/m^3)	8.1207E-03	8.0801E-03	8.0806E-03
	CF (<i>NMP/100ml</i>)	609	953	554
Nivel de concentración en zona protegida (costa)	DBO (kg/m^3)	4.7179E-05	8.8375E-05	5.8350E-05
	OD (kg/m^3)	8.0748E-03	8.0666E-03	8.0746E-03
	CF (<i>NMP/100ml</i>)	514	990	750
Factor de	β1	0.4	1	0.8
reducción de las	β2	0.4	1	0.07
plantas	β3	0.4	0.08	0.97
Longitud de	L1 (m)	550	632	819
tuberías de descarga	L2 (m)	715	772	435
	L3 (m)	850	569	1095
Costo Total Anual	CT (US\$/año)	3 670 411	1 874 705	2 542 477

Tabla 2: Comparación de valores de los enfoques calculados, problema (B)

De igual manera que en el caso anterior, se aprecia que la solución más económica se obtiene mediante el método SA (enfoque 2).

Finalmente, si se comparan entre sí los resultados correspondientes a los problemas (A) y (B), Tablas 1 y 2, puede observarse que el diseño óptimo obtenido (enfoque 2) en el último de los problemas es el más eficiente, como era de esperar. En las Figuras 4a, 4b, 5a, 5b, 6a y 6b se muestra la salida gráfica de la distribución espacial de concentración de los indicadores DBO, OD y CF, correspondiente a la opción de diseño óptimo obtenido, donde los cuadrados blancos indican la ubicación de las plantas de tratamiento, los círculos negros corresponden a las localizaciones óptimas de las tuberías de descarga de los efluentes y las cruces negras marcan las zonas de resguardo ambiental.



Figura 4a: Distribución de CF y localización óptima de las descargas.



Figura 4b: Distribución de CF en cercanías de las zonas protegidas.



Figura 5a: Distribución de DBO y localización óptima de las descargas.



Figura 5b: Distribución de DBO en cercanías de las zonas protegidas.



Figura 6a: Distribución de OD y localización óptima de las descargas.



Figura 6b: Distribución de OD en cercanías de las zonas protegidas.

8 CONCLUSIONES

Se ha desarrollado un modelo computacional para el diseño óptimo de las ubicaciones de las salidas de las tuberías de descarga de efluentes urbanos provenientes de plantas de tratamiento, así como para la determinación del grado de depuración necesario.

La metodología se basa en el cálculo de coeficientes de influencia a partir del problema adjunto de transporte de sustancias disueltas, el cual se ha resuelto mediante el método de elementos finitos. Tal enfoque ha sido combinado con la técnica de "recocido simulado" a los efectos de establecer las variables de diseño óptimas.

Se ha demostrado que tal metodología se comporta muy eficientemente.

Tal enfoque puede ser fácilmente extendido para la consideración de un mayor número de zonas protegidas, de descargas e indicadores ambientales. Asimismo se puede generalizar a situaciones hidrodinámicas no estacionarias.

AGRADECIMIENTOS

La presente investigación se ha realizado en el marco del proyecto "Modelos matemáticos en Ingeniería Ambiental: Problemas Directos e Inversos" (CIMTA, Universidad Tecnológica Nacional). Asimismo forma parte del trabajo de tesis desarrollado por C.I. Stoklas, bajo la dirección del Dr. V.H. Cortínez, para obtener el título de Dr. en Ingeniería en la Facultad Regional de Bahía Blanca de la Universidad Tecnológica Nacional.

REFERENCIAS

- Álvarez-Vázquez, L.J., Balsa- Canto, E. y Martínez, A. Optimal design and operation of a wastewater purification system. *Mathematics and Computers in Simulation*, Vol. 79, p. 668-682, 2008.
- Cortínez, V.H. y Sequeira, M.E. Un enfoque híbrido para el rediseño acústico óptimo de recintos industriales. *Mecánica Computacional*. Vol. 28, p.39-61, 2009.
- Cortínez, V.H. y Sequeira, M.E. Identificación de las condiciones acústicas en recintos industriales. *Mecánica Computacional*. Vol. 29, p.2155-2172, 2010.
- FlexPDE 5.08 User Manual, Copyright ©, PDE Solutions Inc, (<u>www.pdesolutions.com</u>), 2005.
- Friedler, E. y Pisanty, E. Effects of design flow and treatment level on construction and operation costs of municipal wastewater treatment plants and their implications on policy marking. *Water Research*. Vol. 40, pp. 3751-3758, 2006.
- Marchuk, G. I. Mathematical Models in Environmental Problems. North Holland, 1986.
- Murty Yandamuri, S.R., Srinivasan, K. y Murty Bhallamudi, S. Multiobjective optimal waste load allocation models for rivers using nondominated sorting genetic algorithm-II. *Journal of Water Planning and Management*. Vol.132, p.133-143, 2006.
- Parra-Guevara, D. y Skiba, Y. N. "Industrial pollution transport. Part 2. Control of industrial emissions". Environmental Modeling and Assessment. Vol.5, p. 177-184 (2000)
- Rubin, H. y Atkinson, J. Environmental Fluid Mechanics. Ed. Marcel Dekker Inc., 2001.
- Salas, H. J. Emisarios submarinos, enfoque general, conceptos básicos de diseño. *OPS/CEPIS/PUB/ 00.52*, 2000.
- Stoklas, C.I. Un enfoque de optimización para el control de vertido de efluentes urbanos en aguas poco profundas. Tesis presentada para obtener el título de Magister en Ingeniería Ambiental, Facultad Regional Bahía Blanca, Universidad Tecnológica Nacional, 2011.
- Tsanis, I.K. y Saied, U. A wind-driven hydrodynamic and pollutant transport model. *Global NEST Journal*. Vol. 9, N°2, p.117-131, 2007.
- Yu, L. y Salvador, N.N.B. Modeling water quality in rivers, American Journal of Applied Sciences. Vol. 2, 4, p. 881-886, 2005.