

Nota técnica

Modelo numérico del decaimiento del cloro en redes de agua potable con flujo no permanente

Velitchko G. Tzatchkov

Instituto Mexicano de Tecnología del Agua

Se presentan las ecuaciones y el esquema numérico de un modelo para calcular las concentraciones no permanentes del cloro en los puntos de una red de agua potable. El modelo se compone de dos partes: modelo hidráulico y modelo fisicoquímico. El modelo considera la reacción del cloro con el agua y con el material del tubo por medio de ecuaciones cinéticas de primer orden. Se obtiene una ecuación diferencial que admite una solución analítica usando el método de las características. Se presenta el esquema de cálculo numérico para el caso de una tubería simple y una red.

Palabras clave: calidad del agua, modelos matemáticos, simulación, redes de distribución, agua potable, programas de cómputo, flujo no permanente

Introducción

Evidencias teóricas y experimentales demuestran que la concentración de cloro residual decae en la red de distribución una vez que el agua sale de la planta de potabilización. En los sitios alejados de la planta, el cloro residual se encuentra, con frecuencia, prácticamente ausente, y los niveles bacterianos son altos.

Para mantener la calidad del agua en la red es necesario garantizar cierta concentración del cloro residual en toda la red de distribución. El conocimiento exacto de la concentración de cloro residual en cualquier punto de la red es un requisito esencial para determinar la dosis óptima de cloro para desinfección, o definir otros puntos de inyección de cloro dentro de la red.

En Tzatchkov y Arreguín (1994) se presenta un modelo que, entre otras opciones, calcula la concentración de una sustancia no conservativa en los nodos de una red con flujo permanente, dada cierta concentración en las fuentes. Este modelo tiene una indiscutible utilidad para evaluar los patrones de concentración del cloro en una red y para revelar zonas críticas con concentraciones insuficientes; sin embargo no modela el flujo y las concentraciones reales.

El flujo en una red de agua potable es no permanente, debido a la variación horaria de la demanda. Las variaciones en el flujo son muy lentas, lo que ha justificado el empleo de modelos *casi-estáticos* o *si-*

mulación de periodos extendidos, para encontrar la distribución de los gastos y presiones en la red. En estos modelos el flujo no permanente se simula como una secuencia de estados de flujo permanente con la demanda correspondiente en cada estado. Para los análisis de periodos extendidos los intervalos suelen ser de una o dos horas.

La simulación de periodos extendidos sin embargo no es aplicable para modelar la dinámica del cloro en los puntos de la red. Una solución de este tipo supondría estados permanentes en la distribución del cloro en la red para cada intervalo del análisis, lo cual no es realizable en las redes reales. Para obtener un estado de equilibrio (un estado permanente) en la concentración del cloro en una red, se requiere un lapso de varios días con flujo permanente, situación que no es posible en la realidad.

En este artículo se presenta un modelo computacional de simulación dinámica que puede predecir las concentraciones de cloro en cualquier punto de una red y para cada intervalo de simulación, dadas ciertas concentraciones en las fuentes. El modelo se compone de dos partes:

- Un modelo de periodos extendidos para modelar el flujo en la red
- Un modelo de transformación fisicoquímica del cloro (modelo de calidad del agua)

La solución que se presenta es válida para otras sustancias no conservativas contenidas en el agua potable, diferentes del cloro, al igual que para diferentes parámetros de la calidad del agua, que se expresan por medio de una concentración.

Modelo del flujo en la red (modelo hidráulico)

El Instituto Mexicano de Tecnología del Agua, IMTA, ha desarrollado los programas de cómputo *Análisis hidráulico*, AH, y *Análisis hidráulico de periodos extendidos*, AHPE, para el cálculo hidráulico de redes en condiciones permanentes y no permanentes respectivamente. Parte de los resultados de estos programas se usan como datos para el modelo de calidad del agua. Los dos programas, que no se tratarán con detalle en este trabajo, se encuentran incluidos en el nuevo *Manual de diseño de agua potable, alcantarillado y saneamiento de la Comisión Nacional del Agua*, (Tzatchkov e Izurita, 1994). Se señalará únicamente la información que manejan y los resultados relevantes que sirven como datos de entrada para el modelo de calidad del agua.

Modelo de flujo permanente

El programa pide los datos siguientes:

- Tuberías (tramos de la red): diámetro, longitud, coeficiente de pérdidas de carga por fricción
- Nodos: elevación, demanda de agua
- Tanques: nivel de agua (se considera constante en un análisis de flujo permanente)
- Bombas: curvas gasto-carga, nivel de succión, pérdidas de carga menores

Con base en estos datos se forma un sistema de ecuaciones de balance de los gastos, considerando incógnitas las cargas en los nodos. La solución numérica de este sistema da las cargas en los nodos. Posteriormente se calculan los gastos en los tramos.

El programa da una serie de resultados de los que, en el modelo de calidad de agua, se utilizan los siguientes: los gastos en los tramos y su sentido, así como la velocidad.

Modelo cuasi-dinámico de flujo no permanente

Se piden los datos del modelo de flujo permanente además de los siguientes:

- Dimensiones de los tanques
- Variación de la demanda dentro de las 24 horas del día

El modelo se basa en soluciones consecutivas de flujo permanente para cada hora del día con la demanda correspondiente y el balance del volumen de agua en los tanques. Se trata entonces de un modelo *cuasi-dinámico*, o *de periodos extendidos*.

El programa da una serie de resultados de los que, en el modelo de calidad de agua, se usan los siguientes: los gastos en los tramos y su sentido así como la velocidad. Estos resultados cambian con el tiempo y se presentan para cada intervalo considerado en el análisis. Normalmente los análisis se efectúan para cada hora del día.

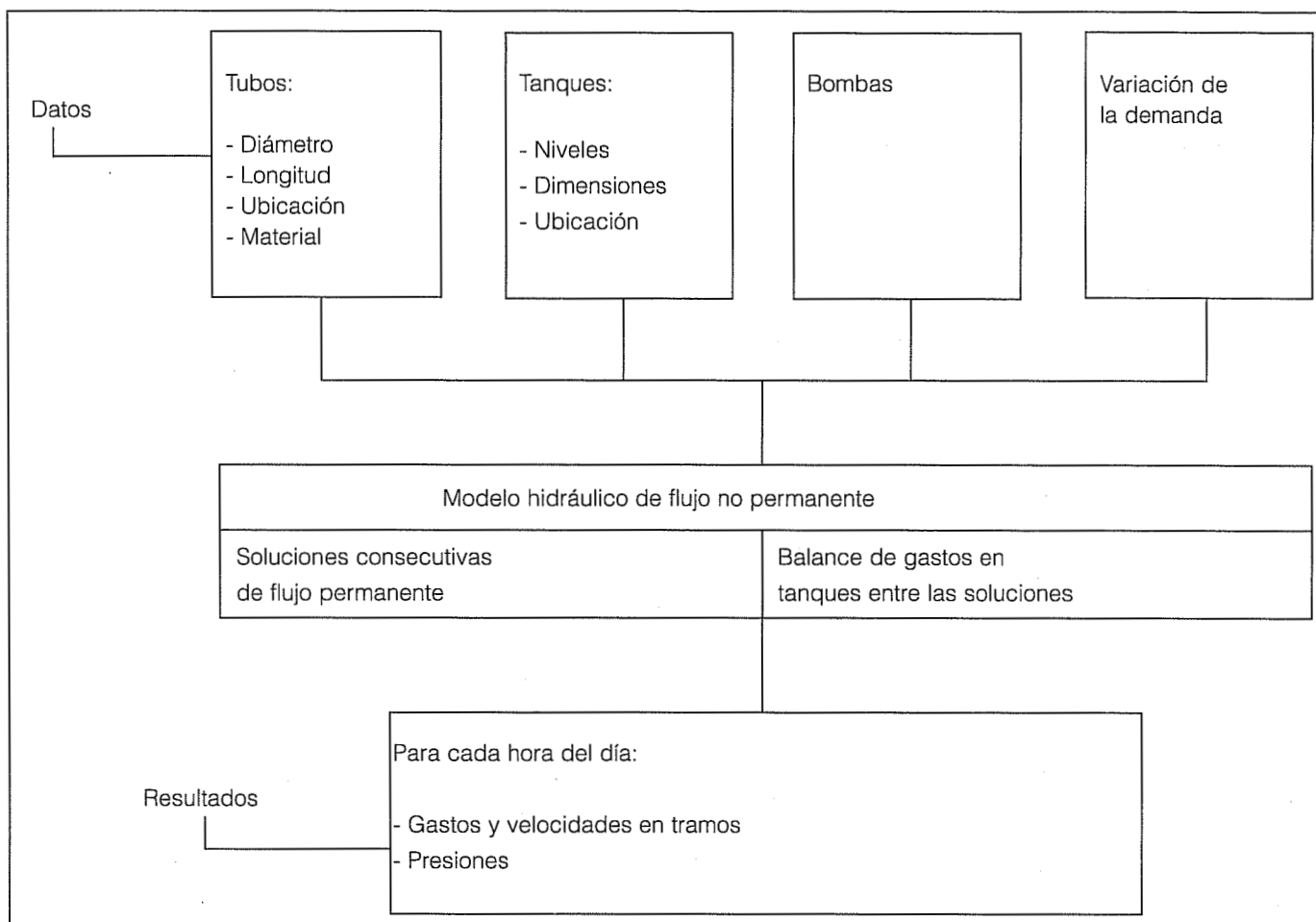
En la ilustración 1 se muestra un diagrama del modelo hidráulico de flujo no permanente.

Modelo de transformación de sustancias no conservativas

La concentración de sustancias contenidas en un flujo de agua está sometida a una serie de transformaciones generadas por los siguientes procesos:

- Convección. Considera los cambios de concentración generados por la velocidad del flujo.
- Difusión molecular. Las sustancias contenidas en el agua se encuentran en constante movimiento molecular, aún cuando el agua esté en reposo. Como resultado de este movimiento molecular se genera un flujo del material contenido en el agua, desde los puntos de alta hacia los de baja concentración, lo que tiende a igualar la concentración dentro del volumen de agua. Este proceso de movimiento molecular se conoce como difusión.
- Difusión turbulenta. El flujo en las tuberías de agua potable normalmente es turbulento. La velocidad en un punto varía arbitrariamente en sentido y magnitud. En la teoría de flujo turbulento es común representar el flujo en una tubería mediante remolinos de diferente tamaño que interactúan entre sí en la sección transversal y se mueven en el sentido general del flujo. Las partículas del fluido son movidas por los remolinos de una manera similar al movimiento molecular, mezclando continuamente las sustancias contenidas en el agua y transportándolas desde las zonas de mayor a menor concentración. Este proceso se conoce como difusión turbulenta debido a su similitud con la difusión molecular. Como se verá más adelante, en las tuberías de agua potable la difusión molecular es insignificante en comparación con la difusión turbulenta y, por lo tanto, normalmente no se considera.
- Reacción. Cada sustancia contenida en el agua puede entrar en reacción con otras sustancias, con

1. Diagrama del modelo hidráulico de flujo no permanente



las paredes del tubo, con la propia agua o con microorganismos y como resultado de diferentes procesos químicos o bioquímicos puede variar su concentración. Según la forma de reacción, las sustancias en el agua se pueden dividir en tres grupos:

– Conservativas. No reaccionan con el agua ni con los tubos. El flúor, que a veces se introduce al agua potable por cuestiones de salud dental, pertenece a este grupo.

– No conservativas y decrecientes. Su concentración decrece con el tiempo de permanencia en el agua. El cloro que se usa como desinfectante pertenece a este grupo.

– No conservativas y crecientes. Son compuestos químicos que se forman en el agua y su concentración crece con el tiempo de permanencia. Un ejemplo son los trihalometanos que se forman por el contacto del cloro con la materia orgánica contenida en el agua.

Difusión del cloro en el agua potable

Se rige por la primera ley de Fick que establece que el flujo de masa causado por difusión, de una sustancia en un líquido, es proporcional al gradiente de la sustancia; en el caso unidimensional se tiene que:

$$\text{Flujo de masa} = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1)$$

donde C es la concentración de la sustancia y D es el coeficiente de proporcionalidad, conocido como coeficiente de difusión. Las unidades de D son (m^2s^{-1}) . El signo negativo significa que la sustancia fluye de las áreas de alta hacia las de baja concentración.

Es evidente la analogía con la transferencia de calor y con el flujo del agua en medios porosos (ley de Darcy), los cuales se describen por una ecuación del mismo tipo.

El coeficiente de difusión molecular D es proporcional a la temperatura absoluta e inversamente proporcional al peso molecular de la fase difusiva y de la viscosidad del líquido. Para la difusión de cloro en agua con una temperatura de 25°C el valor del coeficiente D es de $1.25 \times 10^{-5} \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$.

El coeficiente de difusión turbulenta depende de las condiciones del flujo, en particular de la velocidad media, y puede ser calculado por la bien conocida fórmula de Taylor:

$$D_{\text{turb}} = 10.1 V \frac{d}{2} \sqrt{\frac{f}{8}} \quad (2)$$

donde:

V – la velocidad media (m/s)

d – el diámetro del tubo (m)

f – el factor de fricción (factor de Moody)

Obviamente, el coeficiente de difusión molecular es mucho menor y se puede despreciar, en el caso de tuberías de agua potable.

Reacción con el agua

Se asume como válida una ecuación cinética de primer orden para la reacción del cloro con el agua, del siguiente tipo:

$$\frac{dC}{dt} = K_a \cdot C \quad (3)$$

donde C es la concentración (g/m^3), y K_a la constante cinética (s^{-1}).

Reacción con la pared del tubo

Para el modelo de reacción con la pared de los tubos se tienen las siguientes consideraciones:

- En la pared se tiene cierta concentración C_p de la sustancia. Por lo general la sustancia se encuentra en la biocapa del tubo
- La concentración C_p es diferente a la concentración C que se tiene en el flujo de agua, y es una de las incógnitas que se calculan con el modelo.
- La concentración C_p está sujeta a una reacción, igual que la concentración C que se tiene dentro del volumen de agua en el tubo. Es común considerar una reacción de primer orden, es decir,

$$\frac{dC_p}{dt} = K_p C_p \quad (4)$$

donde K_p es la constante cinética de la reacción con la pared del tubo en s^{-1} , y C_p es la concentración de la sustancia contenida en la pared en gramos sobre metro cúbico.

- Existe una transferencia de masa entre la sustancia contenida en el agua y la de la pared, generada por la diferencia entre las concentraciones en los dos sitios. La teoría de transferencia de masa (Bird *et al.*, 1960) maneja la siguiente ecuación para el flujo de masa [$\text{g}/(\text{m}^2\text{s})$] de la sustancia en este tipo de transferencia:

$$\text{Flujo de masa} = K_{tr} (C - C_p) \quad (5)$$

donde K_{tr} es el coeficiente de transferencia de masa entre el flujo de agua y la pared, en metros sobre segundo.

Ecuación diferencial

La ecuación se obtiene al efectuar el balance de los flujos de masa que entran y salen de un volumen de control contenido en el flujo con longitud dx y una sección A igual a la de la tubería, y está expresada mediante:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{\text{turb}} \frac{\partial C}{\partial x} \right) - V \frac{\partial C}{\partial x} \\ - K_a C - \frac{K_{tr}}{R} (C - C_p) \end{aligned} \quad (6)$$

donde:

D_{turb} – Coeficiente de difusión turbulenta (m^2/s)

V – La velocidad media del flujo (m/s)

R – Radio hidráulico (m), $R = A/P$

P – Perímetro mojado (m)

x – La coordenada longitudinal de la tubería (m)

t – El tiempo (s)

La ecuación (6) se conoce como la ecuación diferencial de difusión convectiva, en el caso unidimensional. El primer miembro en la parte derecha considera la difusión longitudinal, el segundo el transporte de la sustancia por convección, y los últimos dos términos la reacción.

La influencia del término difusivo se determina por el número de Peclet, que se define con la siguiente expresión:

$$Pe = \frac{L V}{D} \quad (7)$$

donde:

L – Longitud de la tubería (m)

V – La velocidad media (m/s)

D – Coeficiente de difusión turbulenta (m^2/s)

Mientras mayor sea el número de Peclet, menor es la importancia del término difusivo en la ecuación y viceversa.

Considerando los valores que tienen L , V y D , en el caso de tuberías de agua potable, el número de Peclet tiene valores muy altos, y el término difusivo se puede despreciar.

El último término en la ecuación (6) expresa la masa de la sustancia que se transfiere del flujo en la tubería hacia la pared. La parte derecha de la ecuación (4) expresa la masa que se consume en la pared por reacción. Se asume que no hay acumulación de la sustancia en la pared; entonces la masa que se transfiere es igual a la que se consume, y,

$$\frac{K_{tr}}{R} (C - C_p) = K_p C_p \quad (8)$$

De la ecuación (8), la concentración en la pared está dada por:

$$C_p = \frac{K_{tr} C}{R K_p + K_{tr}} \quad (9)$$

Sustituyendo la ecuación (9) en (6), y despreciando el término de difusión se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -V \frac{\partial C}{\partial x} - K C \quad (10)$$

con una constante cinética K integral que considera las reacciones con el agua y con la pared, dada por:

$$K = K_a + \frac{K_p K_{tr}}{R K_p + K_{tr}} \quad (11)$$

Una ecuación similar a (11) se presenta en Rossman, 1993. En Biswas *et al.*, (1993) se deduce una ecuación más completa, bidimensional con simetría axial, para el caso de flujo y concentración permanentes.

Las constantes cinéticas K y K_a pueden ser obtenidas de mediciones en campo. El coeficiente de transferencia K_{tr} se calcula por fórmulas conocidas de la teoría de transferencia de masa. No se conoce un procedimiento para medir K_p , pero éste puede ser despedido de la ecuación (11).

Solución analítica de la ecuación diferencial

La ecuación (10) es una ecuación en derivadas parciales de tipo hiperbólico que puede transformarse en una ecuación diferencial ordinaria válida sobre una línea característica. Tiene la siguiente solución analítica:

$$C = C_0 e^{-Kt} \quad (12)$$

que es válida en los puntos de la línea característica definida por:

$$\frac{dx}{dt} = V \quad (13)$$

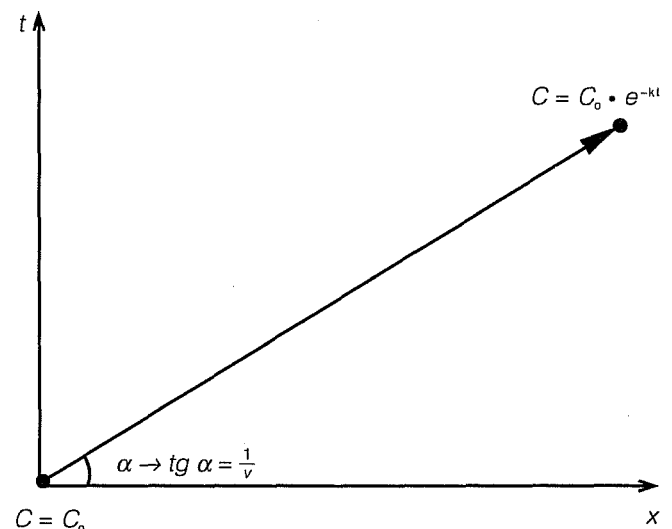
donde V es la velocidad del flujo (m/s), y C_0 es la concentración inicial para $t = 0$ (g/m^3).

La ecuación (13) representa una línea recta en el plano de coordenadas ($x - t$); ver ilustración 2. Teniendo en cuenta que $x = V \cdot t$, la ecuación (12) puede representarse como:

$$C = C_0 e^{-K \frac{x}{V}} \quad (14)$$

La ecuación (12) y su forma alternativa (14) tienen un claro significado físico: la concentración C_0 se transmite por la tubería con velocidad V reduciendo su valor por una ley exponencial. Este significado físico se utiliza en la solución numérica.

2. Línea característica para la ecuación de convección



Solución numérica en una tubería

Como se indicó anteriormente, las condiciones hidráulicas de flujo no permanente en la red de agua potable se simulan por medio de soluciones consecutivas de flujo permanente. Los resultados para los parámetros hidráulicos obtenidos (gastos, velocidades, etc.) se suponen constantes dentro del intervalo de tiempo entre dos soluciones. Estos resultados hidráulicos se utilizan en el modelo de simulación de la calidad del agua.

Para calcular las concentraciones con flujo no permanente se utiliza una discretización en el tiempo y en el espacio. Los incrementos de tiempo que se usan en el modelo de calidad de agua, Δt_{ca} , son más pequeños que el intervalo entre dos soluciones hidráulicas consecutivas, Δt_h .

El intervalo Δt_h se divide en varios subintervalos Δt_{ca} , y la longitud de la tubería L se divide en varios subtramos con longitud Δx , ilustración 3, de forma tal que el tiempo de viaje en un subtramo sea igual a Δt_{ca} , es decir:

$$\Delta t_{ca} = \frac{\Delta x}{V} \quad (15)$$

La cantidad de subtramos NX se calcula con:

$$NX = \frac{L}{V \Delta t} \quad (16)$$

y la longitud de un subtramo Δx como:

$$\Delta x = \frac{L}{NX} \quad (17)$$

Para aplicar esta discretización se requiere que la parte derecha de la ecuación (16) dé un valor entero, que no siempre será el caso. Una solución a este problema es ajustar (en ciertos límites) los valores de la longitud L o de la velocidad V . En la aplicación de modelos matemáticos de redes de agua potable, muchas veces la longitud de las tuberías no se conoce con mucha precisión y ciertas modificaciones en su valor pueden ser admisibles. Un ajuste en la velocidad V parece menos adecuado, ya que modificaría el valor del gasto en la tubería y con esto violaría la condición de continuidad en los dos extremos donde la tubería se une con otras tuberías de la red.

Otra posibilidad consiste en usar los valores originales de L y V , e interpolar entre las líneas características correspondientes, para obtener los valores en la malla de cálculo. En todo caso, mientras mayor sea NX , menor será el error debido a las aproximaciones.

Durante los intervalos hidráulicos Δt_h la velocidad del flujo puede ser diferente, y con esto también los incrementos Δt_{ca} y Δx , como se muestra en la ilustración 3 para el caso de dos incrementos hidráulicos.

La solución numérica requiere de condiciones iniciales y de frontera. Las condiciones iniciales en este caso están dadas por los valores de la concentración en todos los puntos de la tubería para el momento $t = 0$ que se suponen conocidos o se determinan para una solución de estado permanente. La condición de frontera se aplica a la frontera izquierda y consiste en tener los valores de la concentración para $x = 0$ durante el periodo de tiempo que se va a considerar. Si la tubería parte de una fuente estos mismos serán los valores de la concentración en la fuente. Si la tubería parte de la unión de varias tuberías, las concentraciones para $x = 0$ se calculan por las contribuciones de las tuberías que confluyen en la unión, como se explica más adelante en el algoritmo de solución para una red.

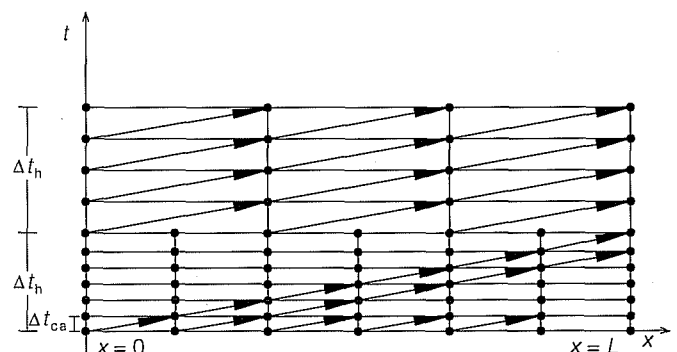
La solución avanza en el tiempo en incrementos consecutivos Δt_{ca} . En cada incremento se calcula la concentración en todos los puntos de la tubería por el esquema mostrado en la ilustración 4. Este esquema proviene del método de las características y de la solución analítica de la ecuación (10).

Cuando la división de subtramos cambia de un periodo hidráulico a otro, se aplica una interpolación para obtener los valores de concentración en los puntos de la nueva división; ver ilustración 3.

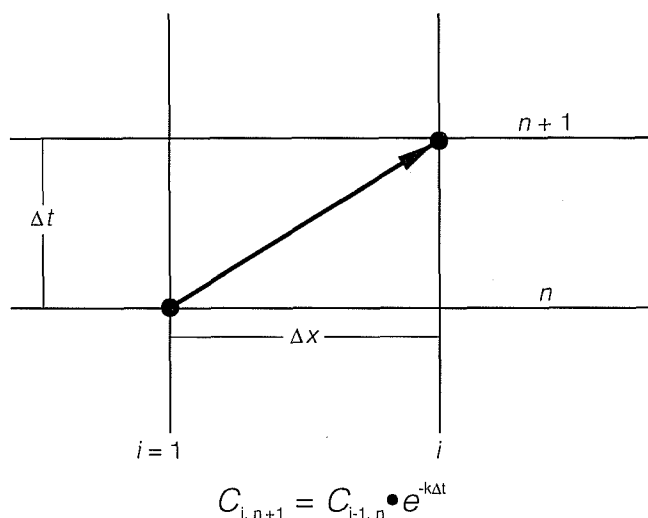
Solución para una red

Se asume una *mezcla completa* del agua en los nodos de la red. El concepto de mezcla completa en un nodo de la red asume que el agua que ingresa con diferente concentración por parte de las tuberías que confluyen en el nodo, se mezcla en éste, obteniéndose una nueva concentración que será igual para todas las tu-

3. Solución numérica de la ecuación de convección



4. Esquema de diferencias finitas para la ecuación diferencial de convección



berías cuyos caudales salen del nodo. La condición de continuidad de masa en el nodo se expresa entonces como,

$$(\sum QC)_{entra} = C_i (\sum Q)_{sale} \quad (18)$$

donde Q y C en la parte izquierda son respectivamente el gasto y la concentración para el último punto de las tuberías que confluyen en el nodo, C_i es la concentración en el nodo, y Q en la parte derecha señala el gasto en las tuberías que salen. Los subíndices *entra* y *sale* indican que se deben incluir en la sumatoria únicamente las tuberías que respectivamente entran (introducen gastos) o salen (extraen gastos) del nodo. En la suma de gastos que salen se incluye también el gasto del consumo de agua concentrado en el nodo.

Teniendo en cuenta la condición de continuidad de los gastos, la concentración en el nodo i se puede expresar de la ecuación (18) como,

$$C_i = \frac{(\sum QC)_{entra}}{(\sum Q)_{entra}} \quad (19)$$

Las concentraciones que intervienen en la ecuación (19) se toman de la solución para el último punto de cada tramo que introduce agua al nodo. Para realizar la solución primero se determina una secuencia del cálculo definida por la ubicación de las fuentes y los sentidos de gastos, de forma tal que al llegar el cálculo

lo a un nodo se tengan los datos de las concentraciones en todos los tramos anteriores a éste en la trayectoria del agua desde la fuente hasta el nodo. Puesto que el sentido de los gastos en los tramos puede cambiar entre un intervalo de cálculo hidráulico y otro, esta secuencia se determina para cada periodo hidráulico.

Una consideración especial merecen los tramos en los cuales en algunos periodos, el gasto es igual a cero. No hay transporte por convección en estos tramos y las concentraciones en todos los puntos para un momento de tiempo, se calculan multiplicando las concentraciones en los puntos para el momento de tiempo anterior por el término de decaimiento, es decir,

$$C_{i,n+1} = C_{i,n} e^{-k\Delta t} \quad (20)$$

Conclusiones

La concentración del cloro en las redes de distribución de agua potable cambia en la red después de salir de la planta potabilizadora. Los cambios son resultado de la convección y la reacción del cloro con el agua y con la pared de los tubos. La difusión molecular y turbulenta en una red de agua potable es insignificante y se puede despreciar. El proceso en una tubería se describe por una ecuación diferencial de convección con reacción, cuyos parámetros y solución numérica se presentan en este artículo. La solución es aplicable en una red, asumiendo mezcla completa en los nodos.

Recibido: febrero, 1995

Aprobado: noviembre, 1995

Referencias

- Bird, R. B.; W. E. Stewart y E. N. Lightfoot. 1960. *Transport phenomena*, New York: John Wiley & Sons Inc. (4)
- Biswas P.; C. Lu y R. M. Clark. 1993. A model for chlorine concentration decay in pipes. *Water Research*, 27(12): 1715-1724. (5)
- Rossman, L. A. 1993. The EPANET Water Quality Model. *Integrated Computer Applications in Water Supply*, Vol.2. England: Research Studies Press Ltd. and John Wiley & Sons Inc. pp. 79-93. (3.)
- Tzatchkov, V.G. y F. I. Arreguín C. 1994. Calidad del agua en redes de distribución de agua potable con flujo permanente. *Memorias del XVI Congreso Latinoamericano de Hidráulica*. Santiago, Chile, 7 al 11 de Noviembre de 1994, vol. 6, p. 373 - 384. (1)
- Tzatchkov, V.G. y J. Izurieta D. 1994. *Manual de Diseño de Agua Potable, Alcantarillado y Saneamiento*. Libro II: Proyecto. 1ª Sección: Agua Potable, Tema: Redes de Distribución. México: Comisión Nacional del Agua. (2)

Abstract

Tzatchkov, V.G. "Numerical Model of Chlorine Decay in Drinking Water Networks with Unsteady Flow". *Hydraulic Engineering in Mexico* (in Spanish). Vol XI. Num. 3, pages 53-60, September-December, 1996.

This article presents the equations and numerical scheme of a model of non-steady chlorine concentrations at locations along a drinking water distribution network. The model has two parts: the hydraulic model and the physio-chemical model. It takes into account the chlorine reaction with bulk water and the pipe wall using first order kinetic equations. A differential equation is obtained that admits a closed form solution by the method of characteristics. A numerical solution scheme is presented for a single pipe and a network. [Water quality model].

Key words: *Water quality, mathematical models, simulation, distribution networks, drinking water, computer programs, unsteady flow, chlorine decay*