

SOCIEDAD CHILENA DE INGENIERIA HIDRAULICA

XI CONGRESO CHILENO

MODELACION DEL TRANSPORTE DE SOLUTOS EN

REDES DE TUBERIAS A PRESION

RUBEN SALGADO C. (1)

FERNANDO ROBLE V. (2)

RESUMEN

Se presenta una metodología numérica para la modelación del transporte unidimensional advectivo-difusivo de solutos dentro de un sistema de tuberías a presión. El sistema de modelación se basa en el Método del Gradiente para el análisis hidráulico, bajo la modalidad de simulación cuasi-estática. Se utiliza el Método de Diferencias Finitas explícitas para modelar la parte advectiva de la ecuación de transporte, mientras que la parte difusiva se modela con un esquema implícito. Se presenta un ejemplo real de aplicación del sistema de modelación, para la red de distribución de agua potable de Cheshire (USA), en el cual se dispone de mediciones.

- (1) Ingeniero Civil, Ph.D., Profesor Asociado, Departamento de Ingeniería en Obras Civiles, Facultad de Ingeniería, Universidad de La Serena.
- (2) Egresado de Ingeniería Civil, Departamento de Ingeniería en Obras Civiles, Facultad de Ingeniería, Universidad de La Serena.

## 1. Introducción

El agua potable que se distribuye a la población debe cumplir estrictas normas de control de calidad, la que depende de las características del agua en la fuente, del sistema de tratamiento y del sistema de distribución.

Centrándonos en el sistema de distribución, es necesario conocer la trayectoria y concentración de las sustancias disueltas en el agua. El problema bien puede ser el de la adición de cloro, con fines de desinfección o la prevención de problemas de incrustación u oxidación de las tuberías. Se han reportado casos fatales por contaminación del sistema de distribución con coliformes [Clark et al. (1991)]. En los años recién pasados ha habido una gran preocupación por formación de compuestos clorados (trihalometanos), a los que se atribuye efectos cancerígenos, lo que hace necesario estudiar las reacciones químicas asociadas y su evolución dentro de la red de distribución.

En consecuencia, existe la necesidad de contar con herramientas que permitan analizar el transporte de una variedad de sustancias solubles dentro de un sistema de distribución de agua, que incluya reacciones químicas.

El objetivo de este trabajo es mostrar una metodología numérica general para abordar problemas de transporte de solutos en redes a presión de una configuración arbitraria.

## 2. Modelo de transporte unidimensional.

Sin entrar en detalles, los que se encuentran en Crank (1975), Holly (1985), Streeter y Wylie (1986), el transporte de solutos en una tubería se describe mediante la ecuación de transporte unidimensional:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = E_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \pm R \quad (1)$$

donde

C : concentración de soluto (ML<sup>-3</sup>)

Ex : coeficiente de dispersión longitudinal ( $L^2/T$ ).

R : factor que describe las variaciones de concentración por efecto de reacciones químicas, las que en este trabajo se limitan a reacciones de primer orden.

U : velocidad media de escurrimiento

x : variable de posición

t : variable de tiempo

El coeficiente de dispersión se puede estimar según los procedimientos de Taylor (1953), (1954) y de Wen y Fan.

### 3. Solución numérica.

La ecuación diferencia parcial (1) es hiperbólica y, si se supone U y Ex constantes, es también lineal, lo que implica que rige el principio de superposición. Salvo para condiciones de borde sencillas, no tiene solución analítica, por lo que nos concentraremos sólo en soluciones numéricas. Para soluciones analíticas se recomienda consultar a Crank (1975), Franchini (1991) o Li et al. (1992).

La modelación del término advectivo en la ecuación de transporte tiende a producir problemas numéricos. Por esto, y aprovechando que rige la superposición, se prefiere separar la parte advectiva de la difusiva, operando en dos etapas sucesivas por cada intervalo temporal.

$$\text{Modelo advectivo} \quad \frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = R \quad (2)$$

$$\text{Modelo difusivo} \quad \frac{\partial C}{\partial t} = Ex \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3)$$

La cinética de la reacción (factor R) se representa como una ecuación diferencial de primer orden:

$$R = \frac{dC}{dt} = K C \quad (4)$$

donde K es la constante de reacción.

La ecuación (4) se aproxima por diferencias finitas como

$$R \approx -k (C_{i,j+1} + C_{i,j}) / 2 \quad (5)$$

donde los índices "i" y "j" corresponden a las variables de posición y tiempo, respectivamente.

Siguiendo las recomendaciones de diversos autores [Abbott y Basco (1989)], en la ecuación (2) se aproxima la derivada temporal y espacial con diferencias hacia adelante y atrás, respectivamente, lo que conduce al esquema explícito:

$$C_{i,j+1} = \frac{C_{i-1,j} \text{ Cr}}{(1 + k \Delta t/2)} + \frac{C_{i,j} (1 - \text{Cr})}{(1 + k \Delta t/2)} \quad (6)$$

donde el número de Courant (Cr), se define como

$$\text{Cr} = U \Delta t / \Delta x \quad (7)$$

El transporte difusivo (3), se modela mediante un esquema implícito, con aproximaciones por diferencias hacia adelante para la derivada temporal y diferencias centradas para la segunda derivada, produciendo los siguientes sistemas de ecuaciones lineales para cada tubería

$$\begin{bmatrix} (1+2r) & -r & & & & \\ -r & (1+2r) & -r & & & \\ & -r & (1+2r) & -r & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & -r & (1+2r) \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} C_{2,j+1} \\ C_{3,j+1} \\ C_{4,j+1} \\ \cdot \\ C_{N-1,j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ \cdot \\ b_{N-1} \end{bmatrix} \quad (8)$$

donde  $r = E_x \Delta t / \Delta x^2 \quad (9)$

$$b_2 = C_{2,j} + r C_{1,j+1} \quad (10)$$

$$b_{N-1} = C_{N-1,j} + r C_{N,j+1} \quad (11)$$

Para transportar el soluto en una red de tuberías, se debe suponer condiciones de mezcla completa a nivel de cada nudo, de manera que la concentración en el nudo (Cn) es la misma que en las tuberías que salen de él y se calcula como:

$$C_n = \frac{\sum_{i=1}^I Q_i C_i}{\left[ \sum_{j=1}^J Q_j + Q_{ext} \right]} \quad (12)$$

La ecuación (12) constituye una condición de borde interna para cada tubería de la red y debe aplicarse tanto a su nudo inicial como final. Los índices "i" y "j" se usan para las tuberías que aportan o extraen caudal del nudo, respectivamente. La Figura 1 representa gráficamente la mezcla completa.

Para una red compleja de tuberías, el esquema numérico de transporte de solutos está formado por las ecuaciones (6), (8) y (12). Además se debe conocer las condiciones iniciales de concentración en cada nudo y las condiciones de borde externas, que definen la forma como varía la concentración en los puntos de aporte de soluto (normalmente estanques y/o plantas de bombeo). Se configura así un modelo numérico de transporte.

Complementariamente, se debe contar con un modelo hidrodinámico que entregue las velocidades medias en cada tramo de la red. En el presente trabajo se emplea el Método del Gradiente [Salgado (1989)], en una modalidad de simulación cuasi-estática, donde las condiciones de la red se suponen invariantes durante cada intervalo de tiempo (extended period simulation). El modelo de transporte de solutos en redes de tuberías así propuesto ha sido implementado por Roble (1993) y se presenta también en Salgado y Roble (1993) y en Roble y Salgado (1993).

Algunos autores resuelven numéricamente la ecuación de transporte considerando sólo el término advectivo, despreciando el término difusivo. En general esto es válido para escurrimiento marcadamente turbulento, donde la influencia de la difusión no es significativa [Clark et al. (1991)]. Sin embargo, cuando se simula la operación continua de una red de agua potable los escurrimientos no son necesariamente turbulentos, ya que en diferentes horas del día, el flujo en un tramo puede ser laminar, de transición o turbulento. Además, también pudiera tratarse de problemas con solutos altamente difusivos. Esto hace conveniente, si se desea contar con una metodología de uso general, utilizar la ecuación de transporte unidimensional (1) completa (modelo advectivo-difusivo).

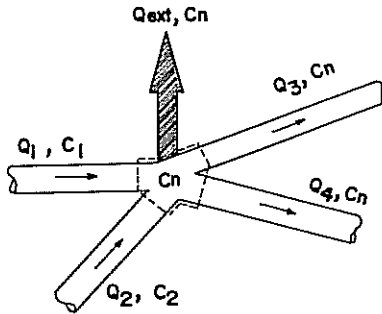


Fig. 1. Mezcla completa a nivel de cada nudo.

En el sistema (8) los términos  $C_1$  y  $C_N$  son conocidos y provienen de las ecuaciones de borde interna (12) o externa. La solución del sistema lineal es simple y, por su estructura tri-diagonal, no demanda grandes recursos computacionales, ya que se usa el algoritmo de "barrido doble" [Abbott y Basco (1989)].

El algoritmo de transporte en una red, se puede resumir en los siguientes pasos:

- a) Obtener del programa de análisis hidráulico de la red, las direcciones y velocidades de escurrimiento en cada tramo. Esto se requiere para cada intervalo de tiempo y puede ser obtenido de antemano o calcularse en paralelo con el problema de transporte.
- b) A partir de los nudos con condiciones de borde externas conocidas, se transporta el soluto hasta el nudo de aguas abajo, resolviendo primero la ecuación de transporte advectivo y luego la del difusivo (mediante las ecuaciones 6 y 8). Se repite este proceso para cada tramo.
- c) Se aplica la ecuación de borde interna (12) a cada nudo.
- d) Ir al paso a) hasta completar el tiempo máximo de simulación.

#### 4. Verificación y aplicación.

Se procedió a verificar el sistema de modelación propuesto, utilizando tuberías aisladas con condiciones de borde externas simples (impulso, pulso, escalón), para las cuales se cuenta con soluciones analíticas. También se verificaron los resultados entregados por el sistema en redes sencillas, para las cuales se disponía de resultados obtenidos con otros programas.

##### 4.1. Aplicación a la red de Cheshire (USA).

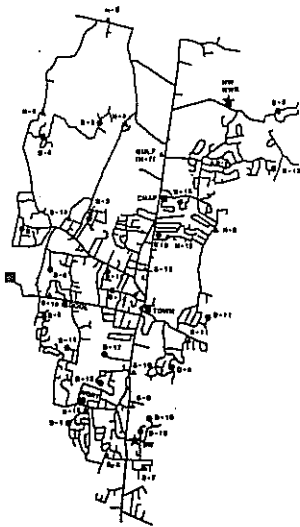
Como parte de la verificación del sistema de modelación, y tratando de realizar la verificación con un sistema lo más real posible, se han modelado las variaciones de concentración de flúor en la red de distribución de Cheshire, perteneciente al sistema de abastecimiento de la Autoridad de Agua del Centro Sur de Connecticut (U.S.A.), en el cual la USEPA (United States Environmental Protection Agency) ha realizado mediciones. Los detalles de la red y de la campaña de mediciones se presentan en Males et al. (1991), Clark et al. (1991)

La ventaja adicional de modelar el sistema de Cheshire es que se dispone de los resultados calculados con un sistema diferente: el modelo DWQM (Dynamic Water Quality Model) de la USEPA, aunque sólo considera transporte advectivo.

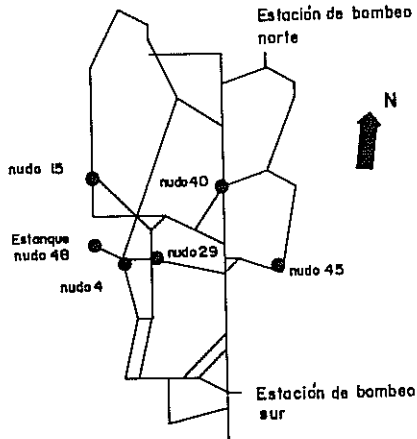
En la Figura 2 a) se presenta la red de Cheshire y en la Figura 2 b) se muestra su esquema reducido. Se indican los nudos en los cuales se han comparado las concentraciones calculadas con el modelo advectivo-difusivo propuesto, con el modelo DWQM de la USEPA y con las mediciones.

La simulación efectuada comprende los 14 días transcurridos entre el 28 de Noviembre y el 12 de Diciembre de 1989, para las condiciones reales de operación del sistema. En cuanto a la adición de flúor, se realizó lo siguiente:

- en los primeros 7 días se suspendió el suministro de flúor y se observó su disipación a través del tiempo, en 6 nudos diferentes.



a) Red completa



b) Red reducida

Fig. 2. Esquema de la red de Cheshire, USA.

- a fines del séptimo día, se reinició la adición de flúor, observándose la recuperación de las concentraciones, en los mismos nudos anteriores.

El estanque y las estaciones de bombeo de la red se operaron según los planes indicados en la Tabla 1.

En la Figura 3 se resume la comparación entre los resultados calculados por el modelo advectivo-difusivo, el advectivo y las observaciones de terreno, para la situación de suspensión y recuperación del flúor, en los nudos 15, 29, 40 y 4.

Para la fase de suspensión del flúor (primeros 7 días), los resultados obtenidos tanto de los modelos advectivo-difusivo y advectivo concuerdan aceptablemente con los observados, a excepción de algunas diferencias en los nudos 4 y 29, probablemente debido a la cercanía del estanque.



**Tabla 1. Plan de operación de la red de Cheshire.**

Plan No.	Estanque	Estaciones de Bombeo		Fecha y Duración
		Norte	Sur	
1	abierto	abierta	cerrada	28/Nov. de 16-18 hrs
2	abierto	cerrada	cerrada	30/Nov. de 13-15 hrs
3	abierto	abierta	abierta	29/Nov. de 7-9 hrs
4	cerrado	abierta	abierta	1/Dic. de 1-3 hrs

Para la recuperación de flúor (segundos 7 días), la concordancia es también aceptable. La excepción es la del estanque de regulación (nudo 48), donde la suposición de mezcla completa pudiera no estar cumpliéndose, lo que se presenta en la Figura 4.

Posiblemente debido a que las condiciones de escurrimiento son predominantemente turbulentas, ambos modelos (advectivo-difusivo y advectivo) entregan resultados muy similares. Sin embargo, la Fig. 3 también revela que el sistema de modelación propuesto entrega resultados que, para el período completo de simulación, concuerdan con las observaciones de terreno y con las predicciones de otro modelo, como el DWQM de la USEPA, por lo que el sistema de modelación propuesto podría considerarse razonablemente verificado.

#### **4.2. Otras aplicaciones posibles.**

Se esbozan a continuación algunas aplicaciones adicionales factibles de llevar a cabo con la metodología desarrollada.

a) Diseño y operación de un sistema de desinfección (p.e. cloración) en redes de agua potable, incluyendo:

- determinación de la ubicación más conveniente para las nuevas plantas de desinfección
- determinación de las dosificaciones óptimas en las plantas de desinfección.

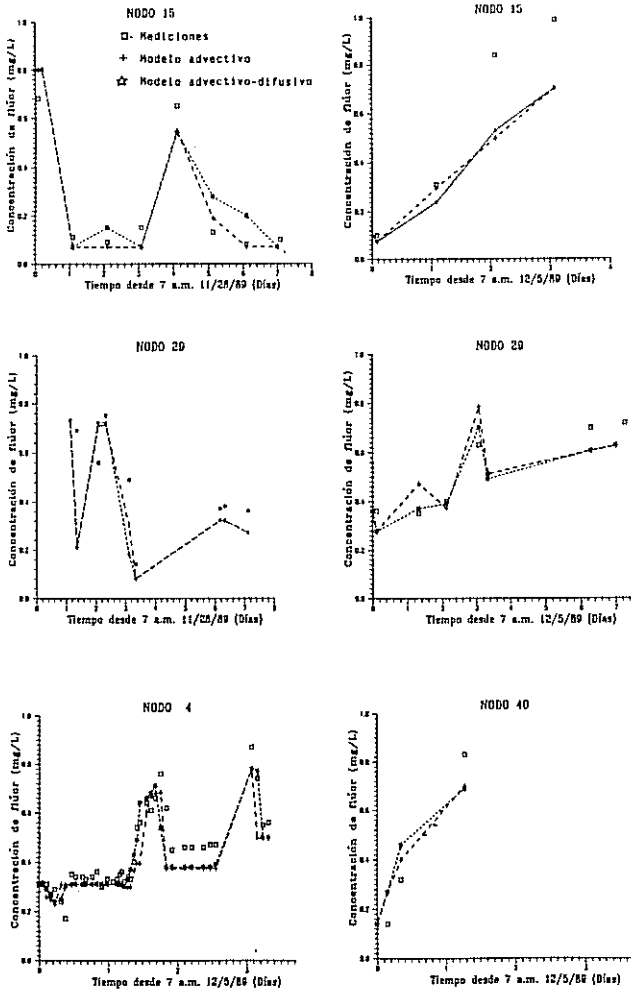
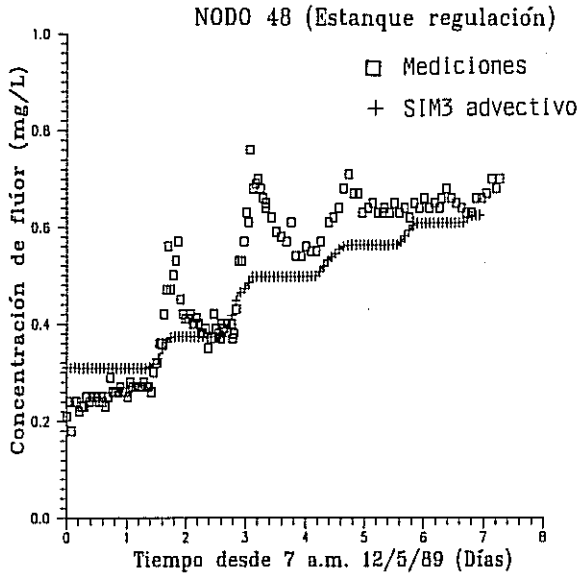


Fig. 3. Variación de concentraciones en los nudos seleccionados para las situaciones de suspensión y recuperación de flúor. Cheshire, USA



**Fig. 4. Variaciones de concentración en el estanque (nudo 48), para la recuperación de flúor, obtenidas con SIM3 considerando sólo advección. Cheshire, USA**

b) Predicción del potencial incrustante o corrosivo del agua a través de la red de distribución.

c) Detección de fugas en redes, correlacionándolas con variaciones inesperadas de la concentración de algunos trazadores inofensivos para la salud pública.

d) Calibración de modelos hidrodinámicos de redes, permitiendo conocer (indirectamente) los caudales reales y su fuente de origen.

e) Extensión del sistema de modelación a redes de ríos y canales, la que es más o menos inmediata.

## 5. Requerimientos computacionales.

El sistema de modelación propuesto se ha implementado y operado tanto en computadores personales (PC 386) y estaciones de trabajo (workstation SUN SPARC II).

La Tabla 2 incluye una comparación de los tiempos de CPU requeridos por los sistemas DWQM y WADISO, correspondientes a los modelos de transporte advectivo e hidrodinámico utilizados por la USEPA. Además, se indican los tiempos del modelo advectivo-difusivo desarrollado por Roble (1993), denominado CONTA3, el que utiliza como base hidrodinámica un programa de simulación cuasi permanente basado en el Método del Gradiente (SIM2). Los programas CONTA3 y SIM2 están integrados en un programa único, aunque para fines comparativos se reporta el tiempo consumido por cada uno de ellos por separado.

Se aprecia de la Tabla 2 que no hay diferencias significativas en términos de tiempo de CPU para los sistemas DWQM y CONTA3, para pasos de tiempo de 15 a 30 minutos. El programa WADISO (hidrodinámico) utilizado con el DWQM es casi 5 veces más lento en comparación con el SIM2, aunque esto es factible de mejorar en ambos casos y no es el punto central de esta discusión.

Tabla 2. Tiempos de CPU en PC 386 (minutos). Sólo transporte advectivo, para la red de Cheshire.

Modelo	P a s o d e t i e m p o (minutos)			
	30	15	10	6
DWQM (transporte)	6,8	8,1	9,4	12,2
WADISO (hidrodinámico)	180,0	180,0	180,0	180,0
CONTA3 (transporte)	6,1	9,4	13,1	21,3
SIM2 (hidrodinámico)	31,8	31,8	31,8	31,8

(\*) CONTA3 considera transporte advectivo solamente

Por otro lado, al incorporar el proceso difusivo se ha observado (para la misma red de Cheshire) que aproximadamente se duplica el tiempo de computación, en relación al modelo exclusivamente advectivo. Como los tiempos de CPU obtenidos en PC's con el modelo advectivo-difusivo pueden considerarse excesivos (entre 50 y 80 minutos de CPU para una simulación de 14 días), se optó por correr el mismo problema en un equipo más potente, como es una estación de trabajo SUN SPARC II. Los resultados se obtienen ahora en tiempos de CPU que van de 35 segundos (para un paso de tiempo de 30 min) a 84 segundos (para un paso de 6 minutos), llegándose hasta un consumo de CPU de unos 470 segundos (aproximadamente 8 minutos) para un paso de tiempo de 1 minuto.

## **6. Resumen y Conclusiones.**

Se ha presentado una metodología numérica desarrollada para producir modelos de calidad de agua en redes de tuberías con una configuración arbitraria, la que puede constituirse en una herramienta eficaz para evaluar cuantitativamente la evolución espacial y temporal de algunas sustancias solubles dentro de una red de tuberías a presión.

Aunque la presentación se ha centrado en redes de agua potable, su aplicación a otras redes, como las de regadío o redes industriales es evidente. Inclusive su extensión a redes de canales abiertos es casi directa.

El sistema de modelación del transporte de solutos en redes de tuberías a presión ha sido desarrollado e implementado a nivel de computadores personales y estaciones de trabajo.

El sistema de modelación propuesto ha sido probado con diversas aplicaciones, incluyendo una red compleja para la cual se cuenta con resultados entregados por otro sistema alternativo y con observaciones reales, demostrando que es capaz de entregar resultados concordantes con los esperados y, por consiguiente, puede ser recomendado para iniciar aplicaciones ingenieriles en sistemas reales.

Algunos aspectos son factibles de mejorar a futuro. Por ejemplo, sería conveniente mejorar la modelación de la mezcla en los estanques, donde a veces la suposición de mezcla completa no es la correcta, como se ha comprobado en la red de Cheshire.

#### Agradecimientos.

Se agradece a la Dirección de Investigación y Desarrollo de la Universidad de La Serena (DIULS) por el financiamiento de instalaciones de laboratorio utilizadas en este proyecto y una beca parcial para Fernando Roble.

Se agradece al Dr. Robert Clark, Director de la USEPA (Drinking Water Research Division), por facilitar los modelos DWQM y WADISO y los datos de la red y de la campaña de mediciones realizada en el sistema de Cheshire (USA).

Finalmente, se agradece también a los revisores, por su contribución en pro de mejorar la presentación de este trabajo.

#### 7. Referencias.

- ABBOTT M.B. y BASCO D.R. (1989), "Computational fluid dynamics. An introduction for engineers", Longman.
- CLARK R.M., GRAYMAN W.M., GOODRICH J.A., DEININGER R.A. y HESS A.F. (1991), "Field-testing distribution water quality models", J. AWWA, July, pp. 67-75.
- CRANK J. (1975), "The mathematics of diffusion", Oxford University Press, Londres.
- CUNGE J.A., HOLLY F.M. y VERWEY A. (1980), "Practical aspects of computational river hydraulics", Pitman, Londres.
- FRANCHINI M. (1991), "Studio per via analitica dei transitori del sistema BOD-DO", Idrotecnica, n. 6, Novembre-Dicembre.
- HOLLY F.M. (1985), "Dispersion in rivers and coastal waters- 1. Physical principles and dispersion equations", en Novak P. (Editor), "Developements in hydraulic engineering-3", Elsevier, Londres.

- LI S.-G., RUAN F. y McLAUGHLIN D. (1992), "A space-time accurate method for solving solute transport problems", Water Resources Research, Vol. 28, No. 9, pp. 2297-2306.
- MALES R.M., CLARK R.M., WEHRMAN P.J. y GATES W.E., (1985), "Algorithms for mixing problems in water systems", J. Hydraulic Eng., ASCE, Vol. 111, No. 2.
- ROBLE F. (1993), "Modelación computacional del transporte de solutos en sistemas de distribución de agua a presión", Memoria para optar al título de Ingeniero Civil, Universidad de La Serena, Departamento de Obras Civiles.
- ROBLE F. y SALGADO R. (1993), "Transporte de solutos en redes de tuberías a presión. II. Validación y Aplicación de sistema de modelación", X Congreso Chileno de Ingeniería Sanitaria y Ambiental, Valdivia, 5-7 Noviembre de 1993.
- SALGADO R. : (1989), "El método del gradiente para el análisis de redes de distribución de agua a presión", VIII Congreso Chileno de Ingeniería Sanitaria y Ambiental, La Serena, 18-20 Octubre de 1989.
- SALGADO R. y ROBLE F. (1993), "Transporte de solutos en redes de tuberías a presión. I. Teoría y modelación numérica", X Congreso Chileno de Ingeniería Sanitaria y Ambiental, Valdivia, 5-7 Noviembre de 1993.
- STREETER V.L. y WYLIE E.B. (1986), "Mecánica de los Fluidos", 8ª Edición, McGraw Hill.
- TAYLOR G. (1953), "Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube", Proc. Royal Society London Ser. A, 219, pp. 186-203.
- TAYLOR G. (1954), "The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe", Proc. Royal Society London Ser. A, 223, pp. 446-468.
- WEN C.Y. y FAN L.T. (sin fecha), "Models for flow systems and chemical reactors", Vol. III "Chemical processing and Engineering", editado por L.F. Albright, R.N. Maddox y J.J. Ketta, USA.