

Artículo publicado en el Repositorio Institucional del IMTA

<i>Título</i>	Modelación numérica de la advección y dispersión de solutos en redes de distribución de agua potable.
<i>Autor / Adscripción</i>	Velitchko G. Tzátchkov Álvaro A. Aldama Felipe I. Arreguín Cortés Instituto Mexicano de Tecnología del Agua
<i>Publicación</i>	Ingeniería Hidráulica en México, 15(3): 101-115
<i>Fecha de publicación</i>	2000
<i>Resumen</i>	Este trabajo presenta una solución numérica de tipo euleriano-lagrangiano para la ecuación de la dispersión advectiva de contaminantes en redes de distribución. Se propone un nuevo método que emplea funciones de Green numéricas, desagregando el conjunto de ecuaciones en tres sistemas tridiagonales para cada tubería y otro de menor tamaño para los nodos de la red. El modelo propuesto se aplicó para simular el transporte de flúor en una red de distribución real que sólo considera la advección. La comparación entre los resultados de los dos modelos muestra que el modelo aquí propuesto simula mejor la concentración del contaminante, especialmente en las tuberías que exhiben bajas velocidades del flujo.
<i>Identificador</i>	<a href="http://hdl.handle.net/123456789/741">http://hdl.handle.net/123456789/741</a>

# Modelación numérica de la advección y dispersión de solutos en redes de distribución de agua potable

Velitchko G. Tzátchkov  
Álvaro A. Aldama  
Felipe I. Arreguín Cortés

Instituto Mexicano de Tecnología del Agua

*Este trabajo presenta una solución numérica de tipo euleriano-lagrangiano para la ecuación de la dispersión advectiva de contaminantes en redes de distribución. La aplicación de los esquemas numéricos conocidos para resolver esta ecuación en una red produce grandes sistemas de ecuaciones lineales debido a la presencia del término que considera la dispersión. Para aliviar este problema se propone un nuevo método que emplea funciones de Green numéricas, desagregando el conjunto de ecuaciones en tres sistemas tridiagonales para cada tubería y otro de menor tamaño para los nodos de la red. De esta forma, el sistema de ecuaciones se resuelve eficientemente y el modelo numérico puede ser aplicado a redes grandes sin necesidad de un esfuerzo computacional excesivo. El modelo propuesto se aplicó para simular el transporte de flúor en una red de distribución real, para la cual se tienen publicados datos de mediciones de campo y de simulación con el paquete EPANET de la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA, por sus siglas en inglés), que sólo considera la advección. La comparación entre los resultados de los dos modelos muestra que el modelo aquí propuesto simula mejor la concentración del contaminante, especialmente en las tuberías que exhiben bajas velocidades del flujo.*

**Palabras clave:** redes de distribución, dispersión, modelos de calidad del agua, análisis dinámico, modelos matemáticos, flujo no permanente, modelos numéricos.

## Introducción

La concentración de cualquier sustancia contenida en el agua en una red de distribución está sujeta a cambios espaciales y temporales debidos a la velocidad del flujo, la dispersión, la reacción con el agua y con el material de la pared de los tubos, la mezcla del agua en los nodos comunes de varias tuberías y otros procesos. El objetivo de un modelo de transporte de contaminantes en redes de distribución es calcular estos cambios para los diferentes puntos de la red, dada su concentración en sitios específicos. Un modelo de este tipo puede ser extremadamente útil en el diseño y en la operación de las redes de agua potable, ya que daría la posibilidad de analizar el posible decaimiento de un desinfectante en la red y de definir estrategias para garantizar la concentración requerida del mismo en el sistema de distribución; permitiría también optimizar la ubicación y las dosis de las unidades de desinfección, analizar el resultado de la mezcla del agua

proveniente de diferentes fuentes en la red, optimizar la ubicación de los puntos de muestreo de la calidad del agua, y analizar el comportamiento de sustancias químicas y el tiempo de recuperación del sistema después de un accidente de contaminación, entre otras importantes aplicaciones.

Para representar correctamente las variaciones de la concentración del contaminante, el modelo matemático debe tomar en cuenta los procesos básicos que las originan: *advección*, que representa el transporte del contaminante originado por la velocidad del flujo; b) *difusión*, que representa el movimiento de la sustancia desde puntos de alta hacia otros de baja concentración, y c) la *reacción* del contaminante con el agua, y con las paredes de tuberías y tanques. El efecto conjunto de la difusión y de la no uniformidad de la velocidad en la sección transversal del tubo da lugar a un proceso de mezcla más intensa, llamado *dispersión*. Varios autores han propuesto e implementado modelos numéricos para simular el transporte de contaminantes

en las redes de agua potable que consideran la advección y la reacción, mas no la dispersión. Ejemplos de lo anterior son el *Modelo lagrangiano de transporte*, de Liou y Kroon (1987), el *Enfoque dinámico para modelar la calidad del agua*, de Grayman et al. (1988), el *Método de los elementos discretos*, de Rossman et al. (1993), y varios más. Un resumen y descripción de las diferentes variantes de los modelos de este tipo pueden ser encontrados en las memorias de una conferencia especial sobre el tema (AWWRF y EPA, 1991) y en el informe relativo al mismo (AWWRF, 1990). Modelos similares han sido publicados en México (Tzátchkov y Arreguín, 1996; Tzátchkov, 1996).

En ninguno de ellos se toma en cuenta la dispersión. Algunos de los autores manifiestan que ésta es despreciable en el caso de las redes de agua potable, pero ninguno ha presentado alguna evaluación de su efecto cualitativo y cuantitativo en las diferentes condiciones de flujo, diámetros de las tuberías y otros factores. Biswas et al. (1993) presentan un modelo en el que se considera la difusión, pero sólo en la dirección radial. Entre los paquetes computacionales que consideran solamente advección y reacción destaca el programa EPANET, desarrollado por la Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos (EPA, por sus siglas en inglés) (Rossman, 1993; AWWRF, 1996).

Las mediciones de campo hechas en redes de distribución de varias ciudades, por ejemplo las publicadas por Rossman et al. (1994) y en AWWRF (1996), muestran que los modelos que consideran advección y reacción dan buenos resultados en la mayoría de los casos, pero no en todos. En las tuberías que presentan bajas velocidades del flujo, las predicciones de los modelos de advección-reacción difieren considerablemente de las concentraciones medidas, como se observa en los datos reportados por Rossman et al. (1994), que se presentan más adelante en este trabajo. Las bajas velocidades del flujo son frecuentes en las redes de distribución y se deben a muchos factores, entre los cuales destacan la variación de la demanda durante el día, el requerimiento de un diámetro mínimo en el diseño y el sobredimensionamiento de la red que a veces se practica con vistas a cubrir demandas futuras. Un estudio llevado a cabo en la red de distribución de una unidad habitacional en el estado de Morelos, México, con base en simulaciones hidráulicas y mediciones en campo (Hansen, 1997) reporta que en un 66% de las tuberías se presentaron velocidades muy bajas que tienden a un flujo laminar. Es importante entonces considerar la dispersión en la modelación del transporte de contaminantes en las redes de distribución.

Desde el punto de vista algorítmico y computacional, una solución numérica que toma en cuenta la dis-

persión en una red es mucho más complicada que las soluciones numéricas que sólo consideran advección y reacción. Las ecuaciones de advección pura, o de advección-reacción, se resuelven por métodos lagrangianos (que siguen el movimiento de las partículas en el flujo) explícitos, en los que solamente se calcula el traslado provocado por la velocidad del flujo (o el traslado y decaimiento por reacción) del estado dado en las condiciones iniciales. Estas soluciones numéricas no son adecuadas para tratar la dispersión. Por otro lado, las de tipo euleriano (de malla de cálculo fija) podrían ser usadas para discretizar el término que considera la dispersión, pero los incrementos de espacio y tiempo estarían limitados por condiciones de estabilidad y aproximación del esquema numérico. El problema se agrava considerablemente cuando la advección domina sobre la dispersión. En este caso se producen fuertes gradientes de concentración, que pueden ser considerados en la solución numérica con una exactitud satisfactoria solamente por medio de una discretización extremadamente fina, que no resulta práctica. El problema de la solución numérica de la ecuación de advección-dispersión en una tubería de agua potable pertenece exactamente a este tipo de problemas, dado el pequeño valor del coeficiente de dispersión. Todos estos problemas numéricos son difíciles de solucionar en un solo dominio (en una sola tubería), y lo son mucho más en el caso de una red de tubos, debido al gran número de puntos que se requiere considerar, y a las condiciones de frontera comunes en las uniones entre las tuberías.

En este trabajo se presenta una solución numérica eficiente de tipo euleriano-lagrangiano para la advección-dispersión en redes de tuberías con flujo no permanente. De acuerdo con la técnica de los métodos euleriano-lagrangianos, en cada incremento de tiempo se aplican dos etapas en la solución numérica: una lagrangiana en la que se considera la advección, seguida por una euleriana en la que se considera la dispersión. En la etapa euleriana se obtiene un sistema de ecuaciones que puede tener un gran número de incógnitas si la red tiene muchas tuberías. Para hacer eficiente la solución de este sistema de ecuaciones se propone una nueva técnica que emplea funciones de Green numéricamente calculadas para cada tubería. La solución que se propone se aplicó para simular la propagación no permanente de flúor en una red de distribución real, para la cual se tienen publicados datos de mediciones de campo y de simulaciones con el programa EPANET. La solución propuesta logra una mejor coincidencia entre el modelo y los datos de concentración medidos, especialmente para las tuberías de la red en que prevalecen velocidades del flujo bajas.

## Planteamiento del problema

El transporte no permanente de una sustancia en una tubería con flujo a presión se describe por la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - KC \quad (1)$$

donde  $C$  es la concentración de la sustancia,  $u$  es la velocidad media del flujo,  $D$  es el coeficiente de dispersión,  $K$  es un coeficiente que considera la reacción de la sustancia con el volumen de agua y con la pared del tubo,  $x$  es la distancia longitudinal por el eje de la tubería y  $t$  es el tiempo. La aplicación de un modelo de transporte de sustancias en redes de agua potable consta de dos partes: primero se aplica un modelo hidráulico de flujo no permanente que proporciona, entre otras cosas, la velocidad media del flujo en cada tubería y en cada instante; luego se aplica el modelo basado en la ecuación 1. De esta forma, la velocidad  $u$  en esta ecuación se considera conocida.

Para el cálculo del coeficiente de dispersión  $D$  se conocen las expresiones teóricas obtenidas por G. Taylor (Taylor, 1953; Taylor, 1954) para flujo laminar y turbulento. Para flujo turbulento, Taylor propuso la siguiente expresión:

$$D = 10.06u \frac{d}{2} \sqrt{\frac{f}{8}} \quad (2)$$

donde  $d$  es el diámetro del tubo y  $f$  es el factor de "fricción" (factor de Moody).

Para flujo laminar, G. Taylor obtuvo la expresión:

$$D = \frac{Pe^2}{48} \epsilon \quad (3)$$

donde  $\epsilon$  es la difusividad de la sustancia en el agua y  $Pe$  es el número de Peclet, que se define como:

$$Pe = \frac{aU}{\epsilon} \quad (4)$$

donde  $a$  es el radio del tubo.

El coeficiente de dispersión  $D$  según las ecuaciones 2 y 3 tiende a cero cuando la velocidad  $u$  tiende a cero, lo cual no es realista, dado que aun con una velocidad cero (agua en reposo) siempre existirá la difusión molecular, expresada precisamente por la difusividad  $\epsilon$ . Aris (1956) demostró que la difusividad molecular es aditiva a la debida al flujo laminar y obtuvo la siguiente ecuación para  $D$ , conocida también como ecuación de Taylor-Aris:

$$D = \left(1 + \frac{Pe^2}{48}\right)\epsilon \quad (5)$$

La ecuación 5 proporciona una transición continua para el valor de  $D$  en el límite entre flujo laminar y agua en reposo en una tubería.

La difusividad  $\epsilon$  de diferentes sustancias en el agua tiene valores extremadamente pequeños; por ejemplo, la del cloro en agua tiene un valor de  $1.22 \times 10^{-9}$  m<sup>2</sup>/s. Debido a esto, el valor del coeficiente de dispersión  $D$  calculado con las ecuaciones 3 o 5 puede ser muy alto, mucho mayor que el del mismo coeficiente para flujo turbulento. G. Taylor (1954b) estableció los siguientes límites de validez para la ecuación 3:

$$7 \ll Pe \ll \frac{4L}{a} \quad (6)$$

donde  $L$  es la longitud del tubo dentro de la cual ocurren cambios significativos en la concentración. Esta longitud se determina experimentalmente. Los trabajos de G. Taylor consistían en introducir instantáneamente cierta cantidad de una sustancia en un flujo lento de agua y luego medir la concentración resultante aguas abajo para diferentes instantes. Para este caso, la concentración resultante se aproxima a una curva de Gauss (distribución normal) que se mueve con la velocidad del flujo (Clark, 1996). Este último autor propone tomar:

$$L = 4\sigma \quad (7)$$

donde  $\sigma$  es la desviación estándar de la mancha en movimiento que forma la sustancia en el flujo.

No se conocen expresiones teóricas para calcular el valor del coeficiente de dispersión en la zona de transición entre flujo laminar y turbulento.

En los nodos de una red aplican las siguientes condiciones de frontera:

- En los que representan las fuentes de abastecimiento de agua, o los puntos en que se introduce la sustancia (como las estaciones de rectoración), se conoce el valor de la concentración para cada instante.
- Para los de consumo, la masa de la sustancia que se extrae con el agua en una unidad de tiempo es igual al caudal multiplicado por la concentración en dicho nodo.
- En el caso de los tanques, se aplica el siguiente balance de masa:

$$\sum (QC)_{\text{entra}} - \sum (QC)_{\text{sale}} = \frac{d(VC)}{dt} \quad (8)$$

donde  $Q$  es el gasto en el extremo de una tubería que se une con el tanque,  $C$  es la concentración en el mismo extremo y  $V$  es el volumen del agua en el tanque. Los subíndices *entra* y *sale* señalan que las sumatorias correspondientes se toman sobre las tuberías que introducen y sacan agua del tanque, respectivamente.

**Solución numérica**

Para resolver numéricamente la ecuación 1 para cada tubería, considerando las correspondientes condiciones de frontera en los nodos de la red, se emplea una solución de tipo euleriano-lagrangiano (Aldama *et al.*, 1996). La teoría y numerosas aplicaciones de este tipo de solución para un solo dominio (una sola tubería) están descritas en muchas publicaciones, por ejemplo Baptista (1987) y las referencias que ahí se señalan.

La idea principal de los métodos euleriano-lagrangianos consiste en aplicar la solución numérica en dos etapas consecutivas. En la primera se resuelve la parte advectiva de la ecuación por procedimientos numéricos que se basan en seguir el transporte debido a la velocidad del flujo; en la segunda se considera la parte de dispersión mediante una solución numérica con una malla de cálculo fija. La solución numérica que se presenta en este trabajo es aplicable a la ecuación 1 de advección-dispersión-reacción, como lo demuestran Aldama *et al.* (1996). No obstante, se presenta solamente el caso de advección-dispersión (es decir, se resuelve la ecuación (1) con  $K = 0$ ), dado que las comparaciones con mediciones de campo que se tienen más adelante se refieren al caso de una sustancia conservativa (flúor), es decir, una sustancia que no reacciona con el agua, ni con la pared de los tubos ni de los tanques. Para los fines de la solución euleriana-lagrangiana, la ecuación 1 (para  $K = 0$ ) se discretiza como sigue:

$$\frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t_q} = - \left( u \frac{\partial C}{\partial x} \right)^n + \left( D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)^{n+1} \tag{9}$$

donde los superíndices  $n$  y  $n + 1$  señalan dos instantes consecutivos, y  $\Delta t_q$  es el incremento de tiempo usado en la solución numérica de transporte. Para el instante  $n$  los valores de  $C$  se suponen conocidos, y se busca calcular los mismos para el instante  $n + 1$ . Si se introduce una variable auxiliar intermedia  $C^a$ , la ecuación 9 puede ser desacoplada así:

$$\frac{C^a - C^n}{\Delta t_q} = - \left( u \frac{\partial C}{\partial x} \right)^n \tag{10}$$

$$\frac{C^{n+1} - C^a}{\Delta t_q} = \left( D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)^{n+1} \tag{11}$$

La suma de las ecuaciones 10 y 11 equivale a la ecuación 9, lo que justifica el desacoplamiento. La ecuación 10 representa el transporte por advección pura y puede ser resuelta por el método de las características para obtener los valores de  $C^a$ , que a su vez se usan como condiciones iniciales para la ecuación 11, que se resuelve por un esquema numérico implícito.

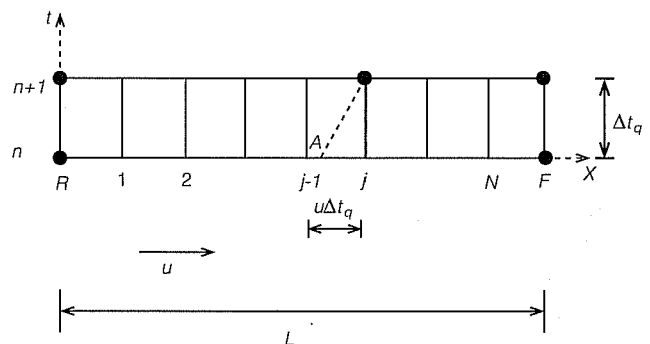
Los métodos euleriano-lagrangianos están bien estudiados y aplicados a diferentes problemas de ingeniería para el caso de un solo dominio. En el caso de varios dominios interconectados, como en el de una red de tuberías, la solución implícita en la etapa euleriana conduce a un sistema de ecuaciones demasiado grande, cuya solución directa no es eficiente. A continuación se describe una solución euleriana-lagrangiana para una red de tuberías que evita resolver un sistema de ecuaciones grande.

*Etapas lagrangiana*

En esta etapa se resuelve la ecuación 10 utilizando el método de las características con proyección hacia atrás en el tiempo (*the backwards method of characteristics*). La longitud de la tubería se discretiza en cierta cantidad de puntos de cálculo equidistantes que son los interiores, numerados de 1 a  $N$ , y los dos extremos de la tubería que pueden ser nombrados como *nodo del frente F*, y *nodo de la retaguardia R* (ilustración 1).

La solución numérica se ejecuta en incrementos de tiempo consecutivos  $\Delta t_q$ . Para el principio de cada uno de estos incrementos de tiempo (para el momento  $t^n$ ) se conocen los valores de  $C$  en todos los puntos de cálculo y se busca obtener los valores de  $C$  para el

**Ilustración 1. Discretización de una tubería en la etapa lagrangiana.**



momento  $t^{n+1}$ . Los puntos de cálculo 1 hasta  $F$  para el momento  $t^{n+1}$  se proyectan por las líneas características hacia atrás en el tiempo, hasta que la línea característica cruce el nivel de tiempo  $t^n$ . Un ejemplo se muestra en la ilustración 1, donde la proyección del punto  $j$  es el punto  $A$ . La ecuación 10 describe una advección pura; entonces, el valor de  $C$  para el punto  $j$  es el mismo que el valor para el punto  $A$ , y puede ser calculado por una interpolación entre los valores conocidos del nivel  $t^n$ . Se pueden emplear diferentes esquemas de interpolación, pero el más sencillo es una interpolación lineal entre los puntos  $j-1$  y  $j$ . Para asegurar la estabilidad de este esquema numérico sencillo, los incrementos de espacio y tiempo deben cumplir con la siguiente condición:

$$Cr = \frac{u\Delta t_q}{x_j - x_{j-1}} \leq 1 \quad (12)$$

donde  $Cr$  es llamado número de Courant.

En la modelación del flujo no permanente en redes de distribución de agua potable es común usar modelos *quasi-dinámicos*, también llamados *de periodos extendidos*, en los que los gastos que fluyen en las tuberías se consideran como constantes dentro de cada uno de los segmentos de tiempo que se tienen en la simulación. Los incrementos de tiempo que se emplean en la simulación del transporte de contaminantes son mucho menores que los usados en el modelo hidráulico de periodos extendidos. Cada incremento "hidráulico"  $\Delta t_h$  se divide en cierta cantidad de incrementos de tiempo para la solución numérica de transporte  $\Delta t_q$ . De esta forma, la simulación del transporte de contaminantes considera una velocidad del flujo constante en cada tubería y para cada incremento hidráulico. El número de subtramos  $NX_i$  en una tubería  $i$  se calcula entonces como:

$$NX_i = INT\left(\frac{L_i}{u_i\Delta t_q}\right) \quad (13)$$

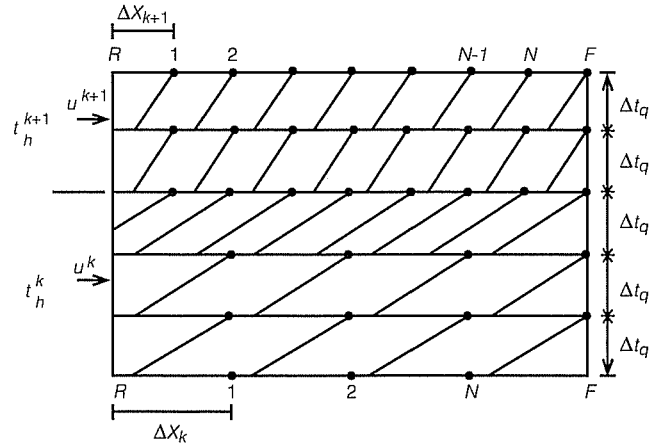
donde  $L_i$  es la longitud de la tubería  $i$ , e  $INT()$  representa "la parte entera de". La longitud de cada subtramo se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$\Delta x_i = \frac{L_i}{NX_i} \quad (14)$$

El valor de  $\Delta x_i$  calculado por las ecuaciones 13 y 14 cumple con la condición de la ecuación 12.

La velocidad del flujo en los diferentes incrementos de tiempo "hidráulicos"  $\Delta t_h$  será diferente; de esta forma, la cantidad de subtramos en una tubería dada de

Ilustración 2. Líneas características en una tubería antes y después de un cambio en la velocidad del flujo.



la red (en otras palabras la discretización resultante) también será diferente. La ilustración 2 muestra el procedimiento que se usará para un nivel de tiempo en el que cambia el valor de la velocidad y con esto la discretización. Cada punto del primer nivel de tiempo que tiene la nueva discretización es proyectado sobre su línea característica, hacia abajo, hasta el nivel de tiempo anterior para obtener luego los valores de  $C^a$  mediante una interpolación lineal entre los puntos correspondientes. Si la línea característica cruza la frontera vertical izquierda, como por ejemplo el punto 1 de la ilustración 2, entonces el valor de  $C_i^a$  se calcula mediante una interpolación sobre esta frontera izquierda vertical.

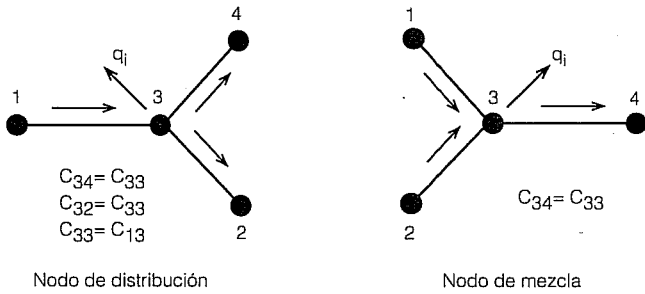
El procedimiento así descrito se aplica para calcular los valores de  $C_i^a$  en los puntos 1 a  $F$  en cada tubería de la red (ilustración 1). Para calcular el valor de  $C^a$  en el punto  $R$  (el nodo de retaguardia para la tubería), es necesario considerar las demás tuberías de la red que se unen en el mismo punto (que a la vez es uno de los nodos de la red). Son posibles tres casos:

a) Una sola tubería introduce agua al nodo (nodo de distribución, ilustración 3). El valor de  $C^a$  calculado para el punto  $F$  de esta tubería se asigna a los nodos de retaguardia  $R$  de las demás tuberías unidas en el nodo.

b) Varias tuberías introducen agua al nodo (nodo de mezcla, ilustración 3). Suponiendo que existe una mezcla completa, primero se calcula la concentración resultante de la mezcla en el nodo que une las tuberías:

$$C_i = \frac{\sum(QC_{F/entra}^a)}{\sum Q_{salto} + q_i} \quad (15)$$

Ilustración 3. Nodos de distribución y de mezcla.



donde  $q_i$  es el gasto que se extrae del nodo (el consumo de agua),  $Q_{entra}$  es el gasto en una tubería que introduce agua al nodo,  $Q_{sale}$  es el gasto en una tubería que recibe agua del nodo,  $(QC^a)_{entra}$  es el gasto  $Q_{entra}$  multiplicado por el valor de la  $C^a$  para el punto  $F$  de la tubería. Este último valor de  $C_i$  se asigna luego a los puntos  $R$  de las tuberías que reciben agua del nodo. Nótese que de esta manera se obtienen valores discontinuos para la concentración en los extremos  $F$  de las tuberías que introducen agua al nodo; es decir, se obtiene un valor en cada extremo  $F$  y otro valor para el nodo calculado por la ecuación 15. Estos valores discontinuos provienen de la naturaleza puramente advectiva de esta etapa lagrangiana de la solución. En la etapa euleriana, que se describe más adelante, se considera un valor único (y por tanto continuo) de la concentración en los nodos de la red.

c) No hay tuberías que introducen agua al nodo. Este es el caso de un nodo que representa una fuente o un tanque. Para las fuentes, el valor de  $C$  es conocido y se asigna directamente a los puntos  $R$  de las tuberías que salen de la fuente. Para simular el efecto de un tanque, en cada incremento de tiempo se usa el siguiente procedimiento basado en la ecuación 8:

1. Una vez calculados los valores de  $C^a$  para los extremos  $F$  de las tuberías que introducen agua al tanque, se calcula la suma de los productos de cada  $C^a_F$  multiplicado por el gasto de la tubería correspondiente. Esta suma da la masa de la sustancia modelada que ingresa al tanque en una unidad de tiempo.

2. Suponiendo una mezcla completa e instantánea dentro del tanque, se calcula el siguiente valor para la concentración dentro del tanque:

$$C_{sale} = \frac{(VC)^n + \Delta t_q \sum (QC)_{entra}}{V^{n+1} + \Delta t_q \sum Q_{sale}} \quad (16)$$

donde  $V$  es el volumen del agua almacenada en el tanque. Este valor se asigna luego al extremo  $R$  de cada tubería que recibe agua del tanque.

Esto completa el procedimiento computacional de la etapa lagrangiana, que se repite en cada uno de los incrementos de tiempo considerados en la simulación. Cabe señalar que los modelos conocidos para la simulación de la calidad del agua en redes de distribución, por ejemplo los publicados por Liou y Kroon (1987), Grayman *et al.* (1988), Rossman *et al.* (1993), AWWRF y EPA (1991) y AWWRF (1996) son diferentes variantes de esta parte lagrangiana de la solución que aquí se propone.

### Etapa euleriana

En esta etapa se resuelve la ecuación 11, en el intervalo de tiempo entre  $t^n$  y  $t^{n+1}$  utilizando los valores de  $C^a$  calculados en la etapa lagrangiana como condiciones iniciales. Existen varios métodos numéricos bien conocidos para la solución de esta ecuación en el caso de un dominio (una sola tubería), pero la solución es mucho más complicada para el caso de una red, donde se presentan principalmente dos problemas:

a) Las condiciones de frontera se formulan para puntos comunes de varias tuberías (para los nodos de la red), y no para los extremos de cada tubería como en el caso de una sola tubería. Se consideran dos tipos de condiciones de frontera. En primer lugar, para cada nodo de la red se formula la siguiente relación, que proviene de la integración espacial de la ecuación 11:

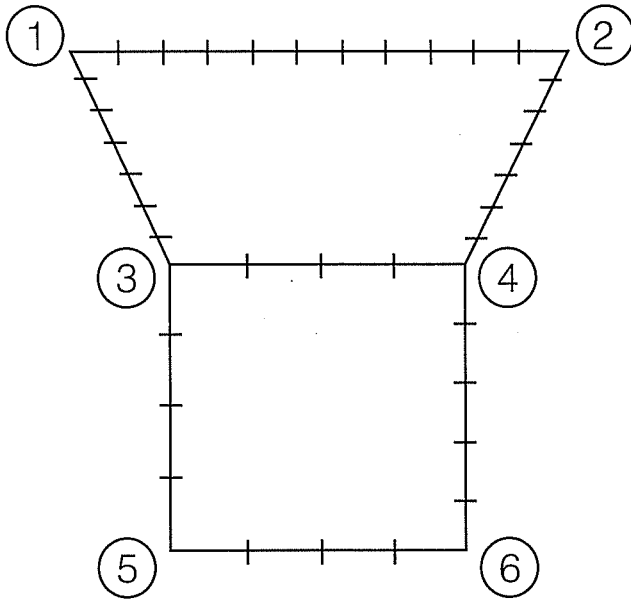
$$V \frac{\partial C}{\partial t} = \sum_{i=1}^m \left( \frac{\partial C}{\partial x} \right)_i D_i A_i \quad (17)$$

donde  $V$  es el volumen de agua que se considera concentrado en el nodo,  $m$  es el número de tuberías que se conectan en el nodo,  $A_i$  es el área de la sección transversal de la tubería  $j$  y  $D_j$  es el coeficiente de dispersión para la tubería  $j$ . El segundo tipo de condición de frontera se expresa en valores prescritos de  $C$ , en los nodos que representan las fuentes u otros puntos con concentración conocida en la red.

b) La aplicación directa del esquema numérico produce un sistema de ecuaciones de gran magnitud y con una estructura que no es conveniente para una solución numérica eficiente. Como un ejemplo, para la pequeña red mostrada en la ilustración 4, y con la discretización señalada en la misma, se obtiene una matriz del sistema de ecuaciones con la estructura que se muestra en la ilustración 5.

Para dar solución a estos dos problemas, Aldama *et al.* (1998) propusieron un nuevo método general para la consideración de las condiciones de frontera y para una solución numérica eficiente de problemas de ecuaciones diferenciales en redes, llamado *Método de*

Ilustración 4. Ejemplo de una pequeña red con discretización aplicada.



las funciones de Green numéricas. Este método se aplica en el presente trabajo para obtener una solución numérica eficiente. Las bases del método se explican en Aldama *et al.* (1998); por esta razón, aquí sólo se presenta el procedimiento computacional correspondiente al presente modelo de transporte en redes.

Para la solución numérica se utiliza la misma discretización empleada en la etapa lagrangiana. Las derivadas se aproximan por diferencias finitas como sigue:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t_q} \quad (18)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{1}{2} \left( \frac{C_{j+1}^{n+1} - 2C_j^{n+1} + C_{j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{C_{j+1}^a - 2C_j^a + C_{j-1}^a}{\Delta x^2} \right) \quad (19)$$

donde el superíndice "a" señala valores obtenidos en la etapa lagrangiana. Las ecuaciones 18 y 19 se sustituyen en la ecuación 11, obteniéndose las siguientes relaciones para los puntos interiores (sin incluir los dos extremos) de una tubería:

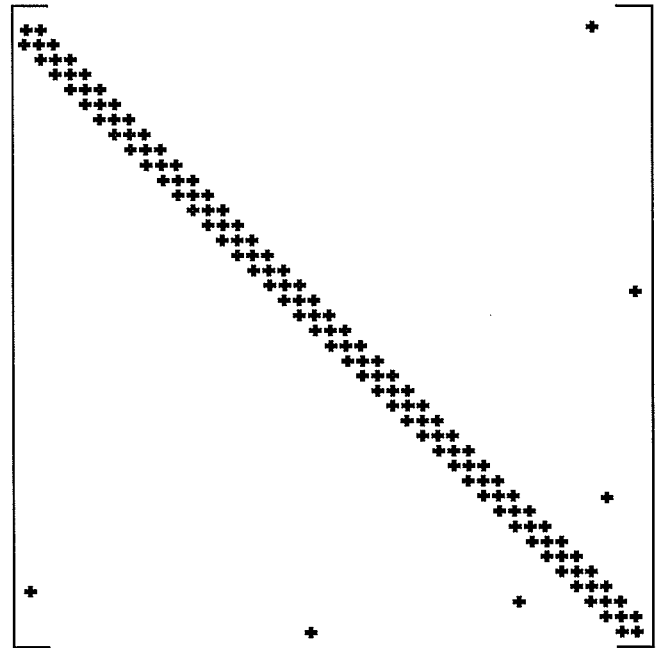
$$-\frac{\lambda}{2} C_{j-1}^{n+1} + (1 + \lambda) C_j^{n+1} - \frac{\lambda}{2} C_{j+1}^{n+1} = b_j, \quad j = 1 \dots N \quad (20)$$

donde

$$\lambda = \frac{K \Delta t_q}{\Delta x^2} \quad (21)$$

$$b_j = \frac{\lambda}{2} C_{j-1}^a + (1 - \lambda) C_j^a + \frac{\lambda}{2} C_{j+1}^a \quad (22)$$

Ilustración 5. Estructura de la matriz resultante para la red de la ilustración 4.



La expresión de la ecuación 20 representa un sistema de  $N$  ecuaciones con  $N+2$  incógnitas, que son los valores de la concentración  $C$  para los puntos 1 a  $N$ ,  $R$  y  $F$ . Este sistema no puede ser solucionado directamente (separadamente) para cada tubería, ya que el número de incógnitas es mayor que el número de ecuaciones. En lugar de eso, se utiliza el siguiente procedimiento (Aldama *et al.*, 1996, Aldama *et al.*, 1998):

Se supone que  $C = 0$  en los dos extremos de la tubería y se resuelve el sistema de ecuaciones para la tubería. La solución resultante se denomina *solución homogénea* y se señala con  $h(x)$ . Luego se propone  $C = 1$  para el extremo de retaguardia  $R$ , y  $C = 0$  para el extremo de frente  $F$ , y se resuelve nuevamente el sistema de ecuaciones. Finalmente se supone  $C = 0$  para el extremo de retaguardia  $R$ , y  $C = 1$  para el extremo de frente  $F$ , por tercera vez, se resuelve el sistema de ecuaciones con estos datos.

Las dos últimas soluciones del sistema de ecuaciones representan en realidad dos *funciones de Green* numéricamente obtenidas,  $GR(x)$  y  $GF(x)$ , correspondientes a una excitación unitaria aplicada en los extremos  $R$  y  $F$ , respectivamente (Aldama *et al.*, 1998). Estas dos funciones son simétricas, es decir:

$$GR(x) = GF(1-x) \quad (23)$$

por lo cual el sistema de ecuaciones necesita ser resuelto sólo para una de estas dos funciones.

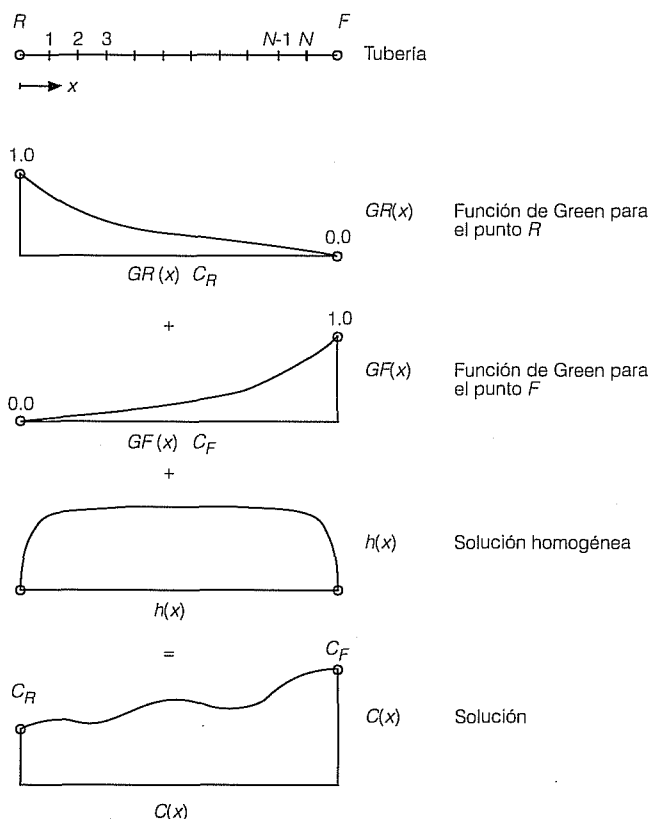


Con la ayuda de estas tres soluciones auxiliares, la concentración  $C$  en una tubería de la red se expresa por una superposición de la solución homogénea y las dos funciones de Green, cada una de ellas multiplicada respectivamente por cada uno de los todavía desconocidos valores  $C_R$  y  $C_F$  de la concentración en los dos extremos  $R$  y  $F$ , es decir:

$$C_j = h_j + GR_j C_R + GF_j C_F \quad j = 1 \dots N \quad (24)$$

donde  $h_j$  es el valor de la solución homogénea para el punto  $j$ ,  $GR_j$  es el valor de la función de Green para el extremo de retaguardia,  $GF_j$  es el valor de la función de Green para el extremo de frente, y  $N$  es el número de puntos dentro de la tubería. De esta manera, la solución numérica se obtiene por una superposición de tres soluciones auxiliares. La primera de éstas toma en cuenta las condiciones iniciales que hay dentro de la tubería con condiciones de frontera homogéneas, y las otras dos consideran los valores de  $C$  en los dos extremos de la tubería. La ilustración 6 muestra esta superposición.

**Ilustración 6. Superposición para obtener la solución  $C(x)$  en una tubería.**



Para cada nodo  $i$  de la red el modelo supone un valor continuo y único de la concentración  $C_i$ , el mismo para todos los extremos de tubería que se unen en el nodo. Para obtener este valor de la concentración en todos los nodos (y con esto en los extremos de todas las tuberías) se utiliza la ecuación 17. La derivada con respecto al tiempo en esta ecuación se expresa por la ecuación 18 escrita para el nodo  $i$ , y la derivada con respecto al espacio se aproxima con base en los valores de  $C$  en el nodo  $i$  y en el punto de discretización más cercano de la tubería, esto es:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_i = \frac{1}{2} \left( \frac{C_{1,j}^{n+1} - C_i^{n+1}}{\Delta x_j} + \frac{C_{1,j}^a - C_i^a}{\Delta x_j} \right) \quad (25)$$

donde  $i$  señala el nodo de la red, y  $1, j$  señala el punto de discretización dentro de la tubería más cercano al  $i$  (que puede ser el punto 1 o el punto  $N$ , según el sentido de numeración adoptado dentro de la tubería). Después de emplear las ecuaciones 18 y 25, y suponer que el volumen  $V$  está formado por la suma de los volúmenes de segmentos elementales con longitud  $\Delta x$  de las tuberías que se unen en el nodo, la ecuación 17 puede ser escrita como:

$$\left(\sum_{j=1}^m \Delta x_j A_j\right) \frac{C_i^{n+1} - C_i^a}{\Delta t_q} = \sum_{j=1}^m \frac{D_j A_j}{2 \Delta x_j} (C_{1,j}^{n+1} - C_i^{n+1} + C_{1,j}^a - C_i^a) \quad (26)$$

Para cada tubería  $j$ ,  $C_{1,j}^{n+1}$  en la ecuación 26 es una incógnita, y puede expresarse por medio de la relación de la ecuación 24, involucrando de esta manera los valores de  $C$  en los dos extremos de la tubería (que son a la vez dos nodos de la red). De esta forma, la ecuación 26, escrita para cada nodo de la red, proporciona un sistema de ecuaciones lineales para los valores de  $C$  en los nodos de la red. En el proceso de solución de este sistema de ecuaciones hay que considerar los valores prescritos de  $C$  en los nodos que representan fuentes y tanques. Para simular el efecto de un tanque, primero se calcula la concentración resultado de la mezcla del agua que se encuentra en el mismo, con el agua que ingresa por las tuberías. El valor resultante se asigna al extremo de retaguardia  $R$  de las tuberías que reciben agua del tanque.

Una vez obtenidos los valores de  $C$  para los nodos de la red, se calculan los mismos para los puntos interiores de cada tubería con la ecuación 24.

Desde el punto de vista algorítmico y computacional, la composición del sistema de ecuaciones (ecuación 26) puede ser tratada convenientemente dentro del contexto del método de los elementos finitos. Cada tubería puede ser considerada como un elemento que aporta términos a dos ecuaciones del tipo de la rela-

ción de la ecuación 26, correspondientes a sus dos nodos. Para obtener su contribución, la expresión de la ecuación 24 escrita para  $C_{i,j}^{n+1}$  se sustituye en las dos ecuaciones del tipo de la ecuación 26, que corresponden a los nodos  $R$  y  $F$ , respectivamente. Las contribuciones resultantes pueden ser escritas en la siguiente forma matricial:

$$\begin{Bmatrix} F_R \\ F_F \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{11} & k_{12} \\ k_{21} & k_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} C_R \\ C_F \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} g_R \\ g_F \end{Bmatrix} \quad (27)$$

o

$$\{F\}^e = [k]^e \{C\}^e + \{g\}^e \quad (28)$$

donde  $F_R$  es la contribución del elemento (la tubería) a la ecuación 26 para el nodo  $R$ ;  $F_F$  es la contribución del elemento a la ecuación (26) para el nodo  $F$ , y:

$$k_{11} = -\frac{DA}{2\Delta X} (1 - GR_1) \quad (29)$$

$$k_{12} = \frac{DA}{2\Delta X} (1 - GF_1) \quad (30)$$

$$k_{21} = \frac{DA}{2\Delta X} (1 - GR_1) \quad (31)$$

$$k_{22} = -\frac{DA}{2\Delta X} (1 - GF_N) \quad (32)$$

$$g_R = \frac{DA}{2\Delta X} (h_1 + C_{1,j}^a - C_R^a) \quad (33)$$

$$g_F = \frac{DA}{2\Delta X} (h_N + C_{N,j}^a - C_F^a) \quad (34)$$

En la terminología usada en el método de los elementos finitos,  $[k]^e$  y  $\{g\}^e$  son las matrices de un elemento. La adición de las matrices  $[k]^e$  y  $\{g\}^e$  de todos los elementos a matrices globales  $[K]$  y  $\{G\}$ , considerando los números de los dos nodos de cada elemento, produce el siguiente sistema de ecuaciones para la red:

$$[K]\{C\} + \{G\} = 0 \quad (35)$$

donde  $\{C\}$  es el vector de las concentraciones en los nodos de la red. Cabe señalar que las contribuciones de los elementos consideran solamente la parte derecha de la ecuación 26. Para considerar la parte izquierda se resta el término  $\Sigma \Delta x_i A_j / \Delta t_q$  de cada elemento diagonal en  $[K]$  y se suma el término  $C_i^a \Sigma \Delta x_i A_j / \Delta t_q$  a cada elemento en  $\{G\}$ .

La matriz  $[K]$  del sistema de la ecuación 35 es simétrica y porosa (contiene muchos elementos igua-

les a cero), y refleja la estructura de la red: para cada nodo existe un renglón en la matriz, cuyos elementos diferentes de cero corresponden a la diagonal y a los nodos con los cuales se conecta el nodo en consideración. Existen algoritmos matriciales especiales que pueden usarse para almacenar y resolver eficientemente sistemas de ecuaciones con este tipo de matriz.

#### Algoritmo computacional

Desde el punto de vista computacional, la solución numérica que se propone se realiza en la siguiente secuencia:

1. Se aplica un modelo hidráulico de periodos extendidos para calcular la variación del flujo en la red durante el día. De los resultados obtenidos se toman los gastos y las velocidades del flujo en cada tubería, que se consideran constantes para cada incremento de tiempo "hidráulico" considerado.

2. Cada incremento de tiempo hidráulico se divide en un cierto número de incrementos de tiempo que se usarán en la solución numérica de transporte de sustancias; cada tubería se discretiza luego en un número dado de puntos de cálculo usando las ecuaciones 13 y 14. El número de puntos en cada tubería puede ser diferente entre un incremento de tiempo hidráulico y otro, ya que depende de la velocidad del flujo.

3. Se estima el valor del coeficiente de dispersión  $D$ .

4. Los restantes pasos del procedimiento se repiten para cada incremento de tiempo.

5. Se aplica la etapa lagrangiana (la parte de advección pura) de la solución. Al cambiar la discretización entre un incremento de tiempo hidráulico y otro, se aplica la interpolación mostrada en la ilustración 2.

6. Para cada tubería se obtienen la solución homogénea y las dos funciones de Green numéricas, resolviendo el sistema de ecuaciones lineales (ecuación 20) para cada una de ellas con las correspondientes condiciones de frontera. La matriz del sistema de ecuaciones (ecuación 20) es tridiagonal y se tiene una misma matriz para los tres sistemas de ecuaciones, con cambios en la parte derecha del sistema solamente, por lo cual la solución se obtiene eficientemente por el algoritmo de Thomas. Las dos funciones de Green son simétricas, así que es suficiente obtener una de ellas de la solución del sistema de ecuaciones (ecuación 20).

7. Se compone la matriz del sistema de ecuaciones (ecuación 35). La estructura especial que tiene esta matriz permite usar algoritmos eficientes de manejo de matrices porosas, como los que se usan en el método de los elementos finitos, para componer, almacenar y solucionar el sistema de ecuaciones.

8. Se resuelve el sistema de ecuaciones (ecuación 35), considerando los valores prescritos de  $C$  en los nodos que representan fuentes y tanques.

9. Se calculan los valores de  $C$  para los puntos interiores de cada tubería por medio de la ecuación 24.

De esta forma, el sistema de ecuaciones que produce la aplicación directa del esquema en diferencias finitas para toda la red se desagrega en tres sistemas tri diagonales para cada tubería y en un sistema de menor tamaño para la concentración en los nodos de la red, todos ellos de estructura especial que admite una solución numérica eficiente, lo cual es una ventaja de la solución que se propone, especialmente cuando se quieren modelar redes con gran número de nodos y tramos.

Una especial atención requiere la consideración del coeficiente de dispersión  $D$ . Para flujo turbulento ( $Re > 4,000$ ) se usa la ecuación 2. En el caso general, el valor del factor  $f$  debe obtenerse resolviendo la ecuación implícita de Colebrook-White por algún método numérico, pero para los fines del cálculo de  $D$  sería suficiente, no obstante alguna aproximación explícita. En el programa de cómputo preparado por los autores para implementar el modelo se utiliza la siguiente ecuación explícita propuesta por Guerrero (1995) como una aproximación de la ecuación de Colebrook-White:

$$f = \frac{0.25}{\log^2 \left( \frac{e/d}{3.71} + \frac{G}{Re^T} \right)} \quad (36)$$

donde  $d$  es el diámetro de la tubería,  $e$  es la rugosidad,  $Re$  es el número de Reynolds, y  $G$  y  $T$  son coeficientes cuyos valores dependen del número de Reynolds, como sigue:

$$\begin{aligned} G = 4.555 \quad T = 0.8764 & \quad \text{para } 4,000 \leq Re \leq 10^5 \\ G = 6.732 \quad T = 0.9104 & \quad \text{para } 10^5 \leq Re \leq 3 \times 10^6 \\ G = 8.982 \quad T = 0.93 & \quad \text{para } 3 \times 10^6 \leq Re \leq 10^9 \end{aligned}$$

Según Guerrero (1995), la ecuación 36 proporciona una mejor aproximación para  $f$  que la ecuación de Swamee-Jain (Swamee y Jain, 1976) y otras ecuaciones conocidas.

Los autores de este trabajo exploraron diferentes posibilidades para estimar el valor de  $D$  para flujo laminar y en transición de laminar a turbulento, es decir, para  $Re < 4,000$ . En cada una de estas posibilidades los resultados del modelo se compararon con las mediciones de campo que se describen más adelante, y con un modelo que no considera la dispersión (advección pura). Algunas de las posibilidades exploradas y las conclusiones correspondientes se comentan a continuación:

a) Calcular  $D$  por medio de la ecuación 2, independientemente del régimen del flujo. Los resultados que se obtienen para este caso prácticamente coinciden con los del modelo de advección pura, lo que se explica debido a que en las tuberías que presentan velocidades muy bajas el valor de  $D$  calculado con la ecuación 2 es muy pequeño, y la influencia del término de dispersión en la relación de la ecuación 1 es insignificante. En las tuberías que presentan velocidades medias y altas el valor de  $D$  no es bajo, pero en estas tuberías la advección predomina sobre la dispersión precisamente por las velocidades altas y nuevamente el término de dispersión resulta insignificante. Una conclusión de esta experiencia inicial es que si en la red no se presentan velocidades muy bajas (si  $Re > 4,000$  en todas las tuberías) es suficiente usar un modelo de advección pura.

b) Calcular  $D$  con la ecuación 2 cuando  $Re \geq 4,000$ , con la relación de la ecuación 5 cuando  $Re \leq 2,000$ , y cuando  $2,000 < Re < 4,000$ , calcular  $D$  para  $Re = 2,000$  con la ecuación 5 y para  $Re = 4,000$  con la ecuación 2, y luego interpolar para el valor de  $Re$  dado. Los resultados de las simulaciones efectuadas para este caso mostraron una dispersión excesiva, mucho mayor que la medida en campo, lo cual se debe a que los valores de  $D$  para  $Re < 4,000$  obtenidos son demasiado grandes. Para tener una idea del orden de estos valores, puede aplicarse el siguiente análisis:

De la definición del número de Reynolds  $Re$ :

$$Re = \frac{ud}{\nu} \quad (37)$$

despejando la velocidad  $u$  que daría un  $Re = 2,000$ :

$$u_{Re=2000} = \frac{2000 \nu}{d} \quad (38)$$

El número de Peclet correspondiente a esta velocidad sería:

$$Pe_{Re=2000} = \frac{2000 \nu}{d} \frac{d}{2 \varepsilon} = 1000 \frac{\nu}{\varepsilon} \quad (39)$$

donde  $\nu$  es la viscosidad cinemática del agua, que es del orden de  $10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ . Dado que el valor de  $\varepsilon$  es del orden de  $10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $Pe$  calculado por medio de la ecuación 39 sería del orden de  $10^6 \text{ m}^2/\text{s}$ , y la ecuación 5 daría un valor para  $D$  del orden de los  $20 \text{ m}^2/\text{s}$ , que es mucho mayor (de dos mil a diez mil veces) que los valores de  $D$  para flujo turbulento, calculados por la ecuación 2 para el mismo valor de la velocidad  $u$ .

c) Utilizar la ecuación 2 cuando  $Re \geq 4,000$  y la ecuación 5 para el intervalo en que se cumple la condición de la ecuación 6 (solamente se considera el miembro derecho de esta ecuación, ya que el izquier-

do,  $Pe \gg 7$ , no tiene importancia práctica), e interpolar para valores intermedios. Tomando en cuenta la ecuación 4, con la relación de la ecuación 6 puede despejarse el valor límite de la velocidad:

$$u \leq \frac{4L}{a^2} \varepsilon \quad (40)$$

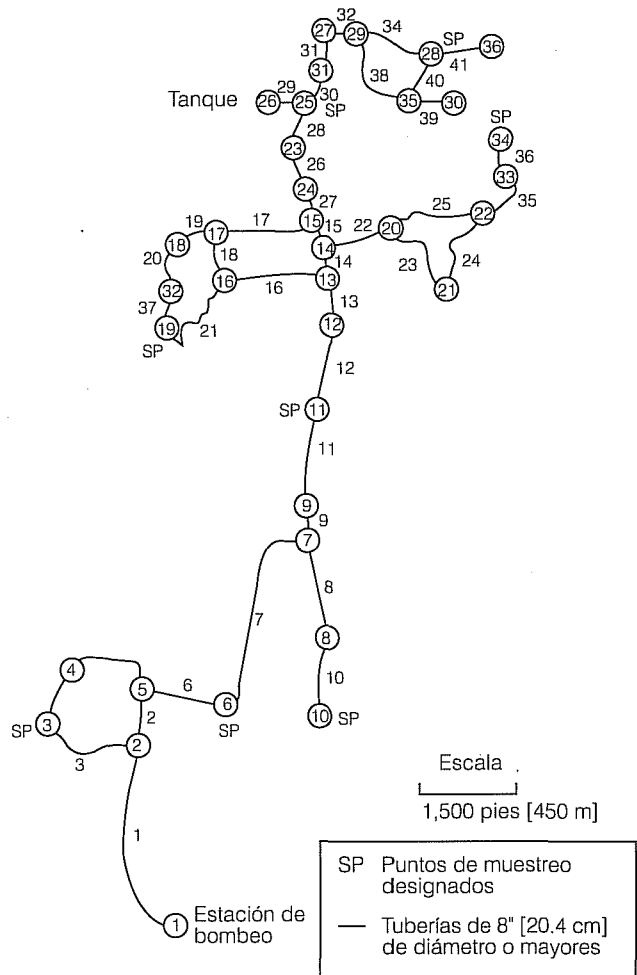
Se aplica entonces la ecuación 5 cuando se cumple la ecuación 40. Como se mencionó anteriormente, de acuerdo con G. Taylor (1954b) el valor de  $L$  debe obtenerse experimentalmente. Para que la velocidad obtenida por la ecuación 6 no sea extremadamente pequeña, se requiere que el valor de  $L$  sea lo suficientemente grande. Se realizaron varios intentos de deducir el valor de  $L$  con base en los resultados de las mediciones de campo que se comentan más adelante en este artículo, pero no se pudieron obtener resultados satisfactorios, dada la limitada información experimental que se tiene. Se procedió entonces a efectuar corridas del modelo con diferentes valores de  $L$  y comparar los resultados con las mediciones de campo, tratando de esta manera de *calibrar* el modelo por medio del valor de  $L$ . Se obtuvo una coincidencia satisfactoria para  $L = 2,400$  m. Esta longitud es varias veces mayor que la longitud de las tuberías de la red en que se midió.

d) Se procedió finalmente a efectuar corridas del modelo con diferentes valores de  $D$  en las tuberías que presentan velocidades bajas y se compararon los resultados con las mediciones de campo, tratando al coeficiente  $D$  como un coeficiente de calibración. Para ciertos valores de  $D$ , por ejemplo para  $0.20$  m<sup>2</sup>/s, se obtuvo una coincidencia bastante satisfactoria, como se comenta más adelante.

### Comparación con el modelo EPANET y con mediciones de campo

El programa de cómputo EPANET, desarrollado por la USEPA, es de dominio público y puede ser copiado de una página de *Internet* junto con los datos necesarios para correr tres ejemplos de diferentes redes de agua potable. Uno de éstos se refiere a la red de distribución de Cherry Hill Brushy Plains, una localidad en los Estados Unidos, en la cual la USEPA efectuó una serie de mediciones de la concentración no permanente de cloro y flúor, con el objeto de validar las predicciones del modelo EPANET (Rossman *et al.*, 1994). El modelo que aquí se propone se aplicó para simular el transporte de flúor en la misma red y con los mismos datos que se usaron en el modelo EPANET. Se prestó especial atención en usar los mismos datos hidráulicos, condiciones de frontera, algoritmo para simular el

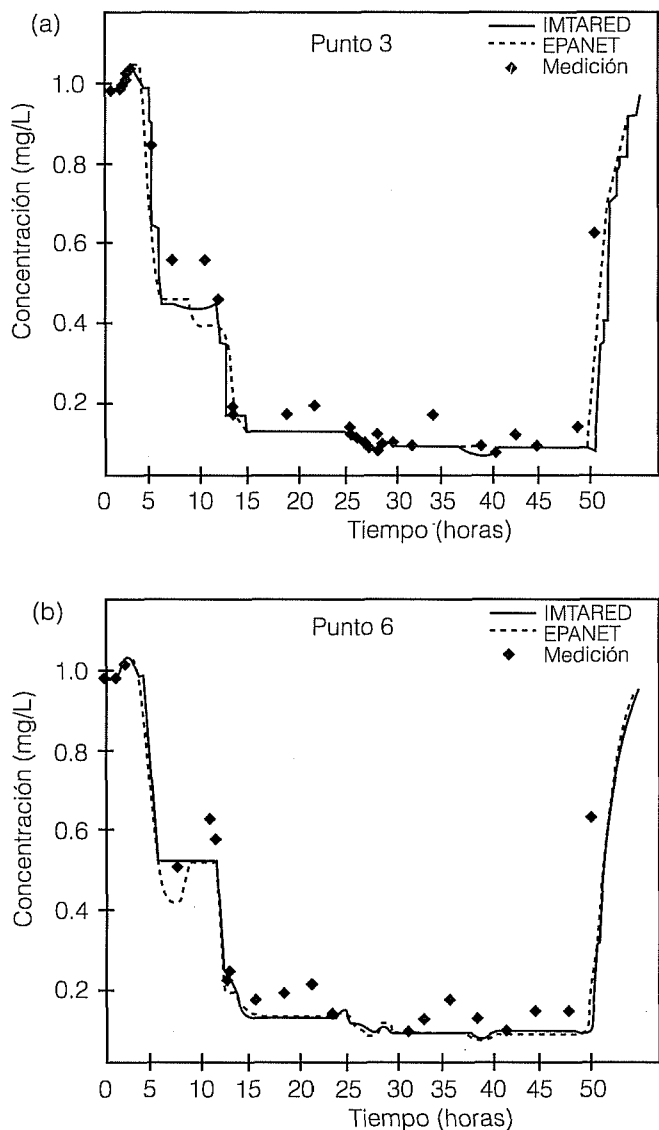
Ilustración 7. Representación esquemática de la red de Cherry Hill/BrushPlains (Rossman *et al.*, 1994).



efecto del tanque, número de puntos de cálculo e incrementos de tiempo, y otros, de forma que se pueda apreciar precisamente la importancia relativa del término de dispersión que se considera en el presente modelo y que no toma en cuenta el EPANET. Por la misma razón se simuló solamente el caso de transporte de flúor, que puede ser considerado como una sustancia conservativa en el agua, para eliminar de esta manera la influencia de la reacción, que es importante en el caso del transporte de cloro. La ilustración 7, tomada de Rossman *et al.* (1994) muestra la esquematización de la red que se usó en la simulación.

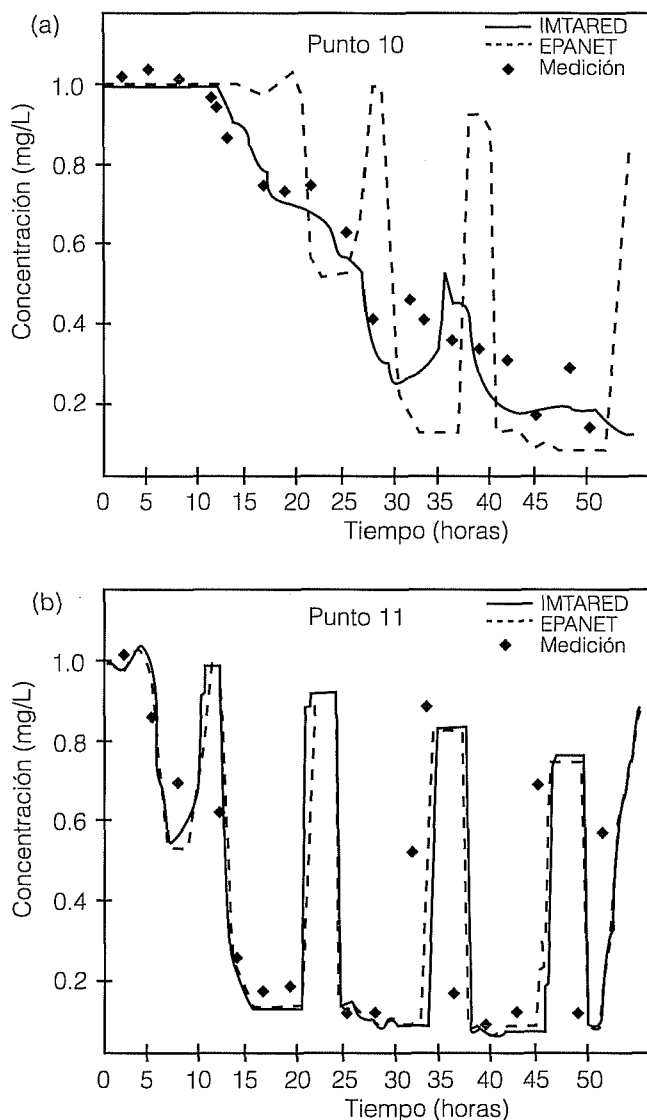
Las ilustraciones 8 a 11 muestran la concentración de flúor obtenida por el EPANET y por el modelo de advección-dispersión propuesto, junto con la concentración observada en campo para los ocho puntos de medición que se consideran en el estudio de Rossman *et al.* (1994). Como se puede observar en estas ilustra-

**Ilustración 8.** Comparación entre las concentraciones de flúor obtenidas por el modelo de advección-dispersión propuesto (IMTARED, línea continua), el modelo EPANET (línea de puntos) y valores medidos en campo (rombo) para: a) punto 3, y b) punto 6.



baja: menor de 0.02 m/s para las tuberías 8 y 10, que abastecen al nodo 10 (ilustración 7), y menor de 0.01 m/s para las tuberías 35 y 36, que abastecen al nodo 34 (ilustración 7), y para las tuberías 34, 40 y 41, que abastecen al nodo 28. En estas condiciones de velocidad baja, la dispersión es importante y el modelo de advección-dispersión propuesto proporciona una mejor coincidencia con la concentración medida. Los restantes cinco puntos de muestreo se ubican en tuberías que presentan velocidades medias y altas. En este caso, la influencia de la advección es mucho más fuer-

**Ilustración 9.** Comparación entre las concentraciones de flúor obtenidas por el modelo de advección-dispersión propuesto (IMTARED, línea continua), el modelo EPANET (línea de puntos) y valores medidos en campo (rombo) para: a) punto 10, y b) punto 11.



ciones, para los puntos de muestreo 3, 6, 11, 19 y 25, los resultados de EPANET muestran una coincidencia bastante buena con las mediciones, pero para los puntos de muestreo 10, 28 y 34 EPANET no simula bien la evolución de la concentración. El modelo de advección-dispersión propuesto modela la evolución de la concentración de una manera más realista, gracias a la consideración de la dispersión. Para todo el intervalo de 55 horas considerado en las mediciones (Rossman *et al.*, 1994) la velocidad del flujo en las tuberías que se conectan con los nodos 10, 28 y 34 es muy

Ilustración 10. Comparación entre las concentraciones de flúor obtenidas por el modelo de advección-dispersión propuesto (IMTARED, línea continua), el modelo EPANET (línea de puntos) y valores medidos en campo (rombo) para: a) punto 19, y b) punto 25.

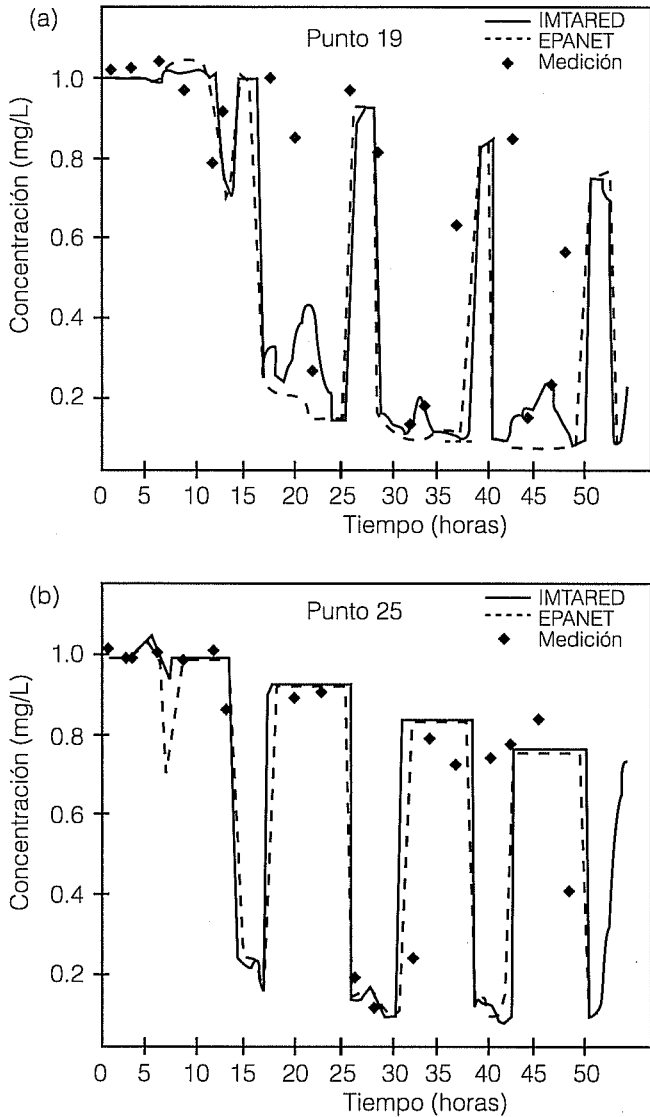
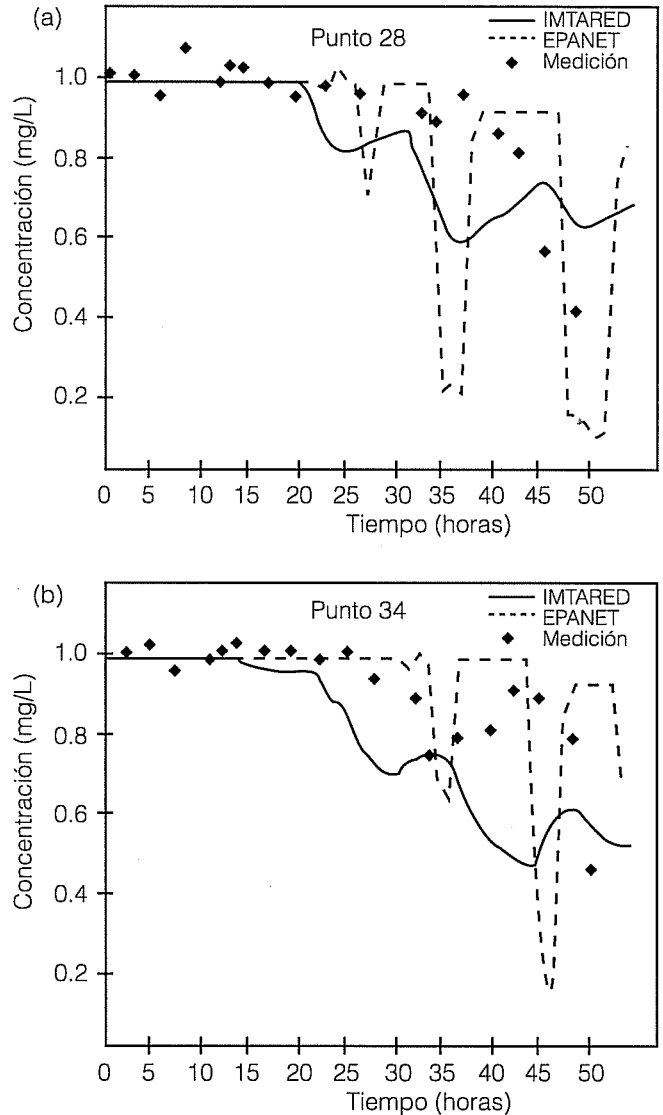


Ilustración 11. Comparación entre las concentraciones de flúor obtenidas por el modelo de advección-dispersión propuesto (IMTARED, línea continua), el modelo EPANET (línea de puntos) y valores medidos en campo (rombo) para: a) punto 28, y b) punto 34.



te que la de la dispersión, y los dos modelos (EPANET y el modelo propuesto) dan casi el mismo resultado, como puede observarse en las ilustraciones 8 a 11.

### Conclusiones

En este trabajo se propone una solución numérica eficiente de tipo euleriano-lagrangiano para la simulación del transporte advectivo-dispersivo no permanente de contaminantes en redes de distribución de agua potable. Para lograr una eficiencia computacional en la so-

lución del sistema de ecuaciones producido por el esquema numérico en diferencias finitas, la solución emplea funciones de Green numéricamente obtenidas para cada tubería. Gracias al empleo de la solución propuesta, el sistema de ecuaciones grande de toda la red se desagrega en tres sistemas tridiagonales para cada tubería, y un sistema de menor dimensión para la concentración en las uniones de los tubos. La solución propuesta se aplicó para simular la evolución de la concentración de flúor en una red de distribución real, para la cual se tienen resultados de simulaciones con

el modelo EPANET, y datos de mediciones de campo. Las comparaciones muestran que para las tuberías de la red que se caracterizan por velocidades del flujo medias y altas, los dos modelos (EPANET y el modelo propuesto) proporcionan resultados muy similares. En cambio, para las tuberías con velocidades bajas, EPANET no logra modelar bien la evolución de la concentración, mientras que el modelo propuesto sí lo hace, gracias a la consideración de la dispersión, siempre y cuando se trabaje con un valor adecuado para el coeficiente de dispersión.

Recibido: 02/06/99  
Aprobado: 17/11/99

## Referencias

- Aldama, A.A., V.G. Tzátchkov, F.I. Arreguín y L.R. Puente, "An efficient numerical solution for advection-diffusion transport in pipe networks", *Computational Methods in Water Resources XI*, Cancún 1996, vol. 2, *Computational Methods in Surface Flow and Transport Problems*, Computational Mechanics Publications, Southampton, 1996, pp. 119-127.
- Aldama, A.A., V.G. Tzátchkov y F.I. Arreguín, *The numerical Green's function technique for boundary value problems in networks*, Seventh International Conference HYDROSOFT 98. Hydraulic Engineering Software, del 16 al 18 de septiembre, Como, Italia, 1998, Computational Mechanics Publications, Southampton, pp. 121-130.
- American Water Works Research Foundation (AWWRF), *Characterization and modeling of chlorine decay in distribution systems*, Denver, 1996.
- American Water Works Research Foundation (AWWRF) y Environmental Protection Agency (EPA). "Water quality modeling in distribution systems", *Conference proceedings*, Cincinnati, febrero de 1991, pp. 4-5.
- Aris, R., "On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube", *Proceedings Royal Society*, Londres, 1956, A235, pp. 67-77.
- Baptista, A.E. de Melo, *Solution of advection-dominated transport by eulerian-lagrangian methods using the backwards methods of characteristics*, PhD, Tesis, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, 1987.
- Biswas, P., C. Lu y R.M. Clark, "A model for chlorine concentration decay in pipes", *Water Research*, vol. 27, núm. 12, Pergamon, Londres, 1993, pp. 1715-1724.
- Clark, M.M., *Transport modeling for environmental engineers and scientists*, John Wiley & Sons, Nueva York, 1996.
- Guerrero A., J.O. "Ecuación modificada de Colebrook-White", *Ingeniería Hidráulica en México*, vol. 10, núm. 1, México, 1995, pp. 43-48.
- Grayman, W.M., R.M. Clark y R.M. Males, "Modeling distribution system water quality: dynamic approach", *J. Water Resources, Plng. and Mgmt.*, ASCE, vol. 114, núm. 3, Nueva York, 1988, pp. 295-312.
- Hansen-Rodríguez, M.P. *Simulación de flujo laminar y crítico en redes de distribución: aplicación al modelo integral de redes de agua potable*, tesis de maestría, Universidad Nacional Autónoma de México, Jiutepec, 1997.
- Liou, C.P., y J.R. Kroon, "Modeling the propagation of waterborne substances in distribution networks", *J. American Water Works Association*, vol. 79, núm. 11, Denver, 1987, pp. 54-58.
- Roach, G.F., *Green's functions*, segunda edición, Cambridge University Press, Cambridge, 1982.
- Rossman, L.A., "The EPANET water quality model", *Integrated Computer Applications in Water Supply*, vol. 2, John Wiley & Sons Inc., Nueva York, 1993, pp. 79-93.
- Rossman, L.A., P.F. Boulos y T. Altman, "Discrete volume-element method for network water quality models", *J. Water Resour. Plng. and Mgmt.*, ASCE, 119(5), Nueva York, 1993, pp. 505-517.
- Rossman, L.A., R.M. Clark y W.M. Grayman, "Modeling chlorine residuals in drinking-water distribution systems", *J. Envir. Engrg.*, ASCE, vol. 120, núm. 4, Nueva York, 1994, pp. 803-820.
- Stackgold, I., *Green's functions and boundary value problems*, John Wiley & Sons, Nueva York, Chichester, Brisbane y Toronto, 1979.
- Swamee, P.K. y A.K. Jain, "Explicit equations for pipe flow problems", *J. Hydr. Div.*, ASCE, vol. 102, núm. 5, Nueva York, 1976, pp. 657-664.
- Taylor, G.I., "Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube", *Proceedings Royal Society*, Londres, 1953, A219, pp. 186-203.
- Taylor, G.I., "The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe", *Proceedings Royal Society*, Londres, 1954a, A223, pp. 446-468.
- Taylor, G.I. "Conditions under which dispersion of a solute in a stream of solvent can be used to measure molecular diffusion", *Proceedings Royal Society*, Londres, 1954b, A255, pp. 473-477.
- Tzátchkov, V.G. y F.I. Arreguín, "Modelo de la calidad del agua en redes de distribución con flujo permanente", *Ingeniería Hidráulica en México*, vol. XI, núm. 1, enero-abril, México, 1996, pp. 61-70,
- Tzátchkov, V.G., "Modelo numérico del decaimiento del cloro en redes de agua potable con flujo no permanente", *Ingeniería Hidráulica en México*, vol. XI, núm. 3, septiembre-diciembre, México, 1996, pp. 53-60.
- Tzátchkov, V.G., F.I. Arreguín y A.A. Aldama, *An application of the numerical Green's function technique to advection-diffusion contaminant transport in water supply networks*, Seventh International Conference HYDROSOFT 98, Hydraulic Engineering Software, del 16 al 18 de septiembre, Como, Italia, 1998, Computational Mechanics Publications, Southampton, pp. 587-596.

### Abstract

Tzátchkov, V. G., A.A. Aldama y F.I. Arreguín Cortés, "Advection-dispersion transport modeling in water distribution networks", *Hydraulic Engineering in Mexico (in Spanish)*, vol. XV, num. 3, pp. 101-115, September-December, 2000.

An eulerian-lagrangian numerical solution for the advection-dispersion equation in water supply networks is presented. Because of the dispersion term, the numerical scheme produces a large linear system of equations. A technique that uses numerically computed Green's functions is proposed to decompose this large system in three tri-diagonal systems for each pipe and one (much smaller) system for the concentration at the pipe junctions. The resulting system is thus efficiently solved and the model can be applied to large networks at a reasonable computer cost. The proposed model is applied to simulate fluoride propagation in a real network for which published data of field measurements and simulation with the USEPA EPANET pure advection model are available. Comparisons are presented that show that while for high and medium pipe flow velocities the two models give very similar results, for low pipe velocities the new advection-dispersion model predicts more closely the concentration evolution, provided an appropriate value for the dispersion coefficient is used.

**Key words:** distribution networks, dispersion, water quality models, dynamic analysis, mathematical models, non-steady flow, numerical models.

#### Dirección institucional de los autores:

Velichtko G. Tzátchkov  
Correo electrónico: vellitchk@tlaloc.imta.mx

Álvaro A. Aldama  
Correo electrónico: aaldama@tlaloc.imta.mx

Felipe I. Arreguín Cortés  
Correo electrónico: arreguin@tlaloc.imta.mx

Paseo Cuauhnáhuac 8532  
Colonia Progreso  
62550 Jiutepec, Morelos, México  
Teléfono: (7) 3 19 40 00