

MODELACIÓN MATEMÁTICA
DE CALIDAD DE AGUA EN
CONDUCCIONES

La **MODELACIÓN DE LA CALIDAD DEL AGUA** es una extensión directa de la Modelación de la Red.

Se usa fundamentalmente para estudiar los siguientes procesos físicos y químicos:

- el transporte
- la mezcla
- y el incremento o decaimiento de la concentración

de **SUSTANCIAS QUÍMICAS** que transporta el agua.

Ejemplos: → **DESINFECTANTES** (Agua potable)
→ **FERTILIZANTES** (Agua para riego)

Estos **MODELOS** también se utilizan para estudiar otros parámetros relacionados con la calidad del agua:

→ **TIEMPO DE TRASLADO**
→ **TRAZABILIDAD**

MODELACIÓN DE LAS REACCIONES QUÍMICAS

Dentro de la masa del fluido se producen reacciones químicas, que son función de la concentración del producto adicionado, de la tasa de reacción y del número de orden de la reacción:

$$\frac{dC}{dt} = \pm k \cdot C^n$$

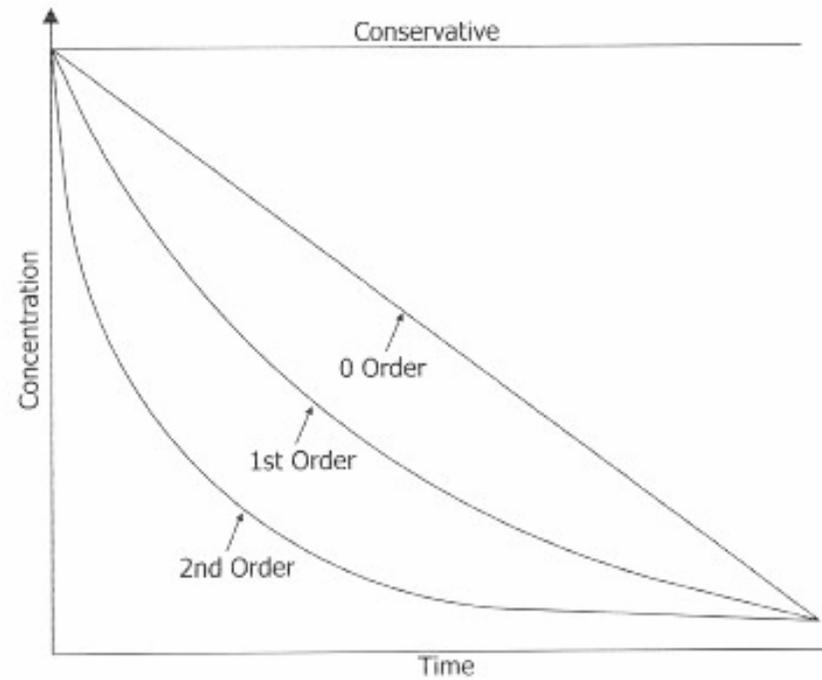
Donde

C	es la concentración (M/L ³)
t	es el tiempo (T)
k	es la tasa de reacción [(L ³ /M) ⁿ⁻¹ /T]
n	es el número de orden de la reacción

Si	k > 0	se trata de una reacción de formación
	k < 0	se trata de una reacción de decaimiento

Ilustración conceptual de la variación de la concentración en el tiempo para reacciones de decaimiento de orden n para:

- n = 0**
- n = 1**
- n = 2**



Se han desarrollado numerosos modelos (Rossman, Clark, Grayman) para tener en cuenta estas reacciones, concluyendo que el modelo de decaimiento de primer orden se ajusta adecuadamente a los desinfectantes que se utilizan en la práctica.

Luego: $\frac{dC}{dt} = \pm k \cdot C^n$ Queda en: $\frac{dC}{dt} = \pm k \cdot C$

Donde **K** es la tasa de reacción global [1/T]

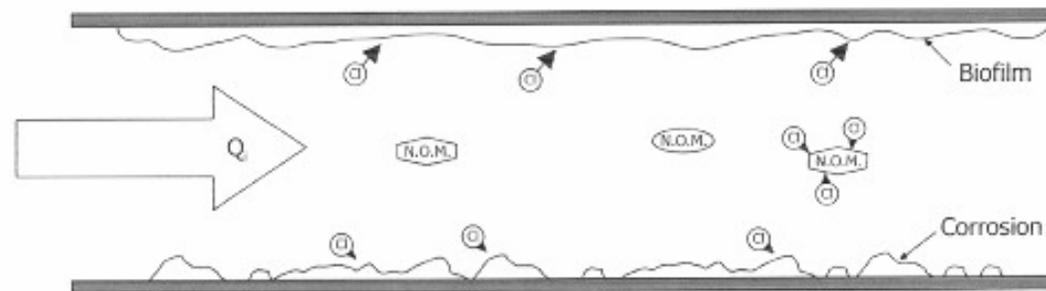
Luego: $\frac{dC}{C} = \pm k \cdot dt$

Integrando: $\int_{C_0}^C \frac{dC}{C} = \pm k \cdot \int_0^t dt$

$$\ln \frac{C}{C_0} = \pm k \cdot t \quad \rightarrow \quad C = C_0 \cdot e^{\pm k \cdot t}$$

Coeficientes de reacción de masa y de pared

Los **DESINFECTANTES** son las sustancias químicas que se agregan al agua que más habitualmente se incorporan a los modelos.



La figura muestra al **CLORO** (desinfectante más difundido) reaccionando dentro de la **MASA** del fluido con Materia Orgánica Natural (NOM) y sobre la **PARED** de la tubería produciendo reacciones de oxidación con el biofilm y/o con el material de la tubería (ocasionando corrosión).

K depende a su vez del coeficiente de reacción de masa (bulk coefficient k_b) y del coeficiente de reacción de pared (wall coefficient k_w):

$$K = k_b + \frac{k_w k_f}{R_H (k_w + k_f)}$$

En esta expresión:

- k_b** es el coeficiente de reacción de masa (1/T)
- k_w** es el coeficiente de reacción de pared (L/T)
- k_f** es el coeficiente de transferencia de masa desde el interior del fluido hacia las paredes (L/T)
- R_H** es el radio hidráulico de la tubería (L)

La velocidad de decaimiento del desinfectante en la tubería depende de qué tan rápidamente llega a las paredes de la misma y de la velocidad de las reacciones que allí ocurren.

El coeficiente de transferencia de masa tiene en cuenta estos fenómenos, y se calcula como:

$$k_f = \frac{S_H d}{D}$$

donde

- S_H** es el número de Sherwood
- d** es la difusividad molecular del reactivo (L²/T)
- D** es el diámetro de la tubería (L)

NÚMERO DE SHERWOOD

En régimen estacionario ($Re < 1$) $\rightarrow S_H = 2$

En régimen turbulento ($Re > 2300$) $\rightarrow S_H = 0,023 Re^{0,83} \left(\frac{v}{d}\right)^{0,333}$

En régimen laminar ($1 < Re < 2300$) $\rightarrow S_H = 3,65 + \frac{0,0668 \left(\frac{D}{L}\right) Re \left(\frac{v}{d}\right)}{1 + 0,04 \left[\left(\frac{D}{L}\right) Re \left(\frac{v}{d}\right)\right]^{2/3}}$

donde

Re es el número de Reynolds

n es la viscosidad cinemática del fluido (L^2/T)

L es la longitud de la tubería (L)

Datos necesarios para la modelación de reacciones químicas

COEFICIENTE DE MASA k_b (Bulk coefficient)

Puede estimarse colocando distintas muestras de agua de concentración inicial C_0 conocida en recipientes de vidrio inertes al cloro.

Midiendo en diferentes instantes la concentración C_t , se puede graficar el logaritmo natural de C_t/C_0 en función del tiempo. Si se trata de una reacción de primer orden, se obtendrá una recta cuya pendiente es k_b .

Valores típicos de referencia

- Cloro residual libre → $-0,1 / \text{día} < k_b < -1,5 / \text{día}$
- Cloro residual combinado → $-0,014 / \text{día} < k_b < -0,019 / \text{día}$

k_b aumenta con el aumento de la temperatura.

COEFICIENTE DE MASA k_b (Continuación)

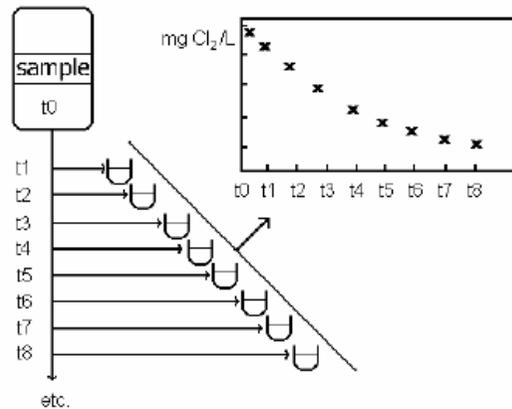
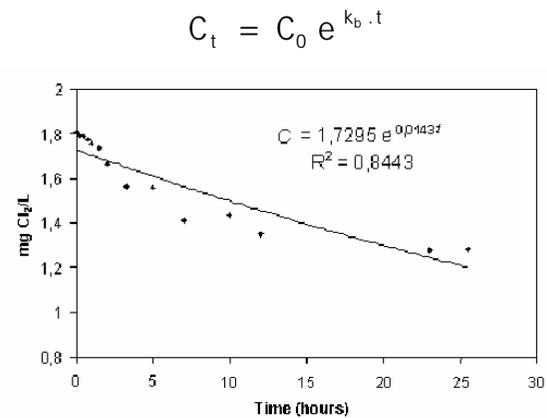


Diagrama del método utilizado en laboratorio para calibrar k_b



Ajuste de primer orden para la curva de decaimiento de cloro en la masa de agua

Datos necesarios para la modelación de reacciones químicas

COEFICIENTE DE PARED k_w (Wall coefficient)

La determinación de k_w es más complicada que la de k_b .

k_w depende de la temperatura y de las características de la tubería, especialmente del material y de la antigüedad.

En las tuberías metálicas la rugosidad aumenta con la antigüedad, debido a incrustaciones y a los efectos de agentes corrosivos.

Algunas investigaciones sugieren que el mismo proceso que incrementa la rugosidad de las tuberías tendería a aumentar también la capacidad de reacción de las paredes, especialmente con el cloro y otros desinfectantes.

Valores típicos de referencia

- Cloro residual libre → $-0,06 \text{ m/día} < k_w < -1,52 \text{ m/día}$
- Cloro residual combinado → $k_w \cong -0,006 \text{ m/día}$

Datos necesarios para la modelación de reacciones químicas

DIFUSIVIDAD MOLECULAR DEL CLORO (d)

$$1,2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{seg} < d_{\text{CLORO}} < 1,4 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{seg}$$

IMPORTANTE



LA CONDICIÓN **MÁS DESFAVORABLE** PARA UNA RED DE DISTRIBUCIÓN O UN ACUEDUCTO CUYA **CALIDAD DE AGUA** SE QUIERA ESTUDIAR SE DA GENERALMENTE EN LOS **PRIMEROS AÑOS** DE FUNCIONAMIENTO (MAYORES TIEMPOS DE PERMANENCIA, MENORES VELOCIDADES)

MODELACIÓN DEL TIEMPO DE TRASLADO (Age)

El **TIEMPO DE TRASLADO** brinda una idea general de la calidad del agua en cualquier punto del sistema.

Normalmente se lo mide desde que el agua ingresa al sistema (desde un tanque o reservorio) hasta que llega al nodo en estudio.

$$A_j = A_{j-1} + \frac{x}{v}$$

Donde

- A_j** es el tiempo de traslado (age) del agua en el nodo **j**
- x** es la distancia entre el nodo **j-1** y el nodo **j**
- v** es la velocidad entre el nodo **j-1** y el nodo **j**

Si hay varios caminos posibles para que el agua llegue al nodo **j** , se calcula el tiempo de traslado como promedio ponderado:

$$AA_j = \frac{\sum Q_i \left[AA_i + \left(\frac{x}{v} \right)_i \right]}{\sum Q_i}$$

Donde

AA_j es el tiempo de traslado (age) promedio ponderado en el nodo **j**

Q_i es el caudal que llega al nodo **j** desde el nodo **i**

MODELACIÓN DE LA TRAZABILIDAD (Trace)

Llamamos **TRAZABILIDAD** o **SEGUIMIENTO DEL FLUJO DE AGUA** a la identificación del origen del agua en cualquier punto del sistema.

En sistemas que tienen más de una fuente de agua, se utiliza para:

- Determinar qué porcentaje de caudal viene de cada fuente en cada nodo
- Determinar el área de influencia de cada fuente individual, y su variación a través del tiempo.

EL ANÁLISIS DE LA CALIDAD DEL AGUA SÓLO PUEDE REALIZARSE EN
MODELACIONES DE TIEMPO EXTENDIDO.

REFERENCIAS

- *Water Distribution Modeling, Haestad Methods, 2001*
- *Epanet 2 Users Manual, Lewis Rossman, EPA, 2000*
- *Chlorine Decay in Water Distribution Systems Case Study – Lousada Network, Pedro Castro y Mario Neves, Universidad de Porto, Portugal, 2003*
- *Influence of Corrosion on Chlorine Decay Rates, Francis DiGiano, University of North Carolina*
- *Chlorine Decay in Pipes, Civil & Environmental Engineering, WPI.*