

### **Capítulo 3 Dinámica de fluidos computacional y aplicación de flujo multifásico para el análisis de gradientes termohalinos en energías marinas renovables**

#### **Chapter 3 Fluid Dynamics and multiphase flow for the analysis of thermohaline gradients in marine renewable energies**

RODRÍGUEZ-OCAMPO, Paola E†., CALLEJAS-JIMÉNEZ, Mariana E\*. y ALCÉRRECA-HUERTA, Juan Carlos

*Instituto de Ingeniería, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, México.*

*El Colegio de la Frontera Sur, Departamento de Observación y Estudio de la Tierra, la Atmósfera y el Océano, Av. del Centenario km 5.5, Chetumal, México.*

*Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología-El Colegio de la Frontera Sur (CONACYT-ECOSUR), Departamento Observación y Estudio de la Tierra, la Atmósfera y el Océano, Av. del Centenario km 5.5, Chetumal, México.*

ID 1<sup>er</sup> Autor: Paola E. Rodríguez-Ocampo / **ORC ID:** 0000-0001-6635-0028; **CVU CONACYT:** 630950

ID 1<sup>er</sup> Coautor: Mariana E. Callejas-Jiménez / **ORC ID:** 0000-0002-9822-4656, **CVU CONACYT:** 164487

ID 2<sup>do</sup> Coautor: Juan Carlos Alcérreca-Huerta / **ORC ID:** 0000-0001-6325-3118, **CVU CONACYT:** 332841

**DOI:** 10.35429/H.2020.8.35.47

P. Rodríguez, M. Callejas y J. Alcérreca

mecallejas@ecosur.mx

A. Marroquín, J. Olivares, L. Cruz y A. Bautista. (Coord) Ciencias ambientales, uso de recursos. Handbooks-©ECORFAN-México, Querétaro, 2020.

## Resumen

La investigación y desarrollo tecnológico dirigido hacia la optimización y aprovechamiento de fuentes de energía renovables ha tomado amplia relevancia dentro del contexto ambiental, económico y geopolítico. Las energías oceánicas, como el caso de la energía por gradiente termohalino se basan en la generación de energía en función de la diferencia de temperatura y salinidad entre las capas de agua del océano para operar sistemas hidrocráticos o membranas. La dinámica de fluidos computacional (CFD) proporciona un enfoque para el análisis de detalle de la interacción de masas de agua con diferentes propiedades termohalinas. Además, soporta el análisis de la dilución de fluidos y su trayectoria dentro de las complejas condiciones de los ecosistemas costeros. No obstante, no existe un modelo CFD capaz de simular la dinámica de fluidos multifásicos para aplicaciones costeras considerando: i) generación, propagación y absorción de olas y corrientes; ii) modelado trifásico con una mezcla de 2 fases y superficie libre, iii) equilibrio térmico y iv) modelado de turbulencia. Por lo tanto, este capítulo muestra el desarrollo y la implementación de las ecuaciones de gobierno para simular estos procesos dentro del marco de trabajo CFD de OpenFoam® dando pie a la generación del nuevo modelo numérico *interMixingTemperatureWaveFoam*. Los resultados muestran la aplicabilidad del modelo al considerar el caso de una laguna arrecifal con un aporte de agua subterránea (SGD).

### CFD, modelación numérica, flujo multifásico, gradiente termohalino, energía renovable

#### Abstract

Research and technological development directed towards the optimization and use of renewable energy sources has taken on wide relevance within the environmental, economic and geopolitical context. Oceanic energies, as in the case of thermohaline gradient energy, are based on the generation of energy based on the difference in temperature and salinity between the layers of ocean water to operate hydrocratic systems or membranes. Computational fluid dynamics (CFD) provides an approach for the detailed analysis of the interaction of water masses with different thermohaline properties. In addition, it supports the analysis of fluid dilution and its trajectory within the complex conditions of coastal ecosystems. However, there is no CFD model capable of simulating multiphase fluid dynamics for coastal applications considering: i) generation, propagation and absorption of waves and currents; ii) three-phase modeling with a mixture of 2 phases and free surface, iii) thermal equilibrium and iv) turbulence modeling. Therefore, this chapter shows the development and implementation of governance equations to simulate these processes within the OpenFoam® CFD framework, leading to the generation of the new *interMixingTemperatureWaveFoam* numerical model. The results show the applicability of the model when considering the case of a reef lagoon with an underground water supply (SGD).

### CFD, numerical modeling, multiphase flow, thermohaline gradient, renewable energy

#### 3. Introducción

Factores ambientales, económicos y geopolíticos han motivado la investigación y desarrollo tecnológico para a aceleración y optimización en la obtención y recolección de energía de fuentes renovables (Bhattacharya et al., 2016; Olabi, 2017; Burke y Stephens, 2018). Los avances tecnológicos en la captación, transformación y almacenamiento de la energía oceánica han tomado una mayor relevancia en las últimas décadas (Magagna y Uihlein, 2015). No obstante, diversos estudios han señalado la necesidad de mejores herramientas numéricas para estudiar el flujo multifásico en aplicaciones marinas particularmente de descargas de agua dulce y mezcla con aguas marinas (e.g. McCoy y Corbett, 2009; Ma et al., 2014; Luijendijk et al., 2020), térmicas por parte de plantas de conversión de energía térmica oceánica (e.g. Kim y Kim, 2014; Lee et al., 2016; Wang y Tabeta, 2017), o en procesos hidrodinámicos turbulentos y laminares (e.g. Dávalos-Fassler, 2020; Robles-Hernández, 2020), así como sus métodos de solución (e.g. Escalante, 2020).

El desarrollo de métodos numéricos para la solución de sistemas fundamentales de ecuaciones diferenciales parciales es requerido dado que no existen métodos analíticos para estudiar la naturaleza compleja del flujo multifásico (Kolev, 2011). Por ello, los métodos de dinámica de fluidos computacional (CFD) son una de las herramientas más extendidas para estudiar los flujos multifásicos.

Las herramientas CFD de acceso abierto (e.g. OpenFOAM®) han permitido una mayor popularidad entre los usuarios no sólo por la eliminación de tarifas de licencia, sino también por la posibilidad de extender y modificar los códigos nativos del software y, por tanto, de sus potenciales aplicaciones (Tomislav et al., 2014).

Estos métodos se basan en soluciones numéricas generadas por computadora de las ecuaciones de dinámica de fluidos, pero requieren de un proceso de validación a fin de determinar el grado en que el modelo o simulación y sus datos asociados representan de forma precisa y exacta al mundo real (Eça y Hoekstra, 2008; Eca et al., 2016; ITTC, 2008; Stern et al., 2006; Stern et al., 2001). Entre las diversas aproximaciones para validar modelos multifásicos se han logrado validaciones parciales mediante la reproducción numérica de resultados *in-situ* o de laboratorio (Rodríguez-Ocampo et al., 2020; Hernández-Fontes et al., 2018; Mohseni et al., 2018; Higuera et al., 2013; Jacobsen et al., 2012; Greco et al., 2005, 2007). A pesar de dichos desarrollos, no se dispone de un modelo que simule el equilibrio térmico y la mezcla de dos fases líquidas con una condición de superficie libre dentro de una plataforma CFD de acceso libre.

Por tanto, el presente trabajo presenta el desarrollo e implementación de un modelo basado en la plataforma CFD de OpenFOAM® que considera la inclusión de la ecuación de energía, y de la conservación de cantidades escalares para la difusión de dos fases miscibles. La aplicabilidad del modelo se realiza mediante un caso de referencia para estimar el comportamiento hidrodinámico de una descarga de agua submarina en un cuerpo costero (i.e. una laguna arrecifal). Esto busca proveer un antecedente como una potencial aplicación en el análisis de problemas de energía renovable oceánica por medio del aprovechamiento de gradientes termohalinos y así contribuir a la evaluación de viabilidad de la futura implementación de esta tecnología en México.

### 3.1 Ecuaciones de gobierno en modelos numéricos CFD

Dentro del modelado CFD, existen tres leyes fundamentales que funcionan como principales ecuaciones de gobierno en la resolución de problemas termodinámicos de fluidos y descritas por i) conservación de la masa (ecuación de continuidad), ii) conservación del momento (2ª. ley de Newton), y iii) conservación de la energía (1ª. ley de la termodinámica). Además, la ley de conservación de cantidades escalares es requerida para el cálculo de soluciones ante condiciones multifásicas.

En la dinámica de fluidos, se suele considerar el flujo al interior de un volumen de control (VC) en lugar de una cantidad de sustancia dada o masa de control (MC). No obstante, la ley de conservación de masas relaciona la tasa de cambio en el tiempo ( $t$ ) de una propiedad extensiva en una masa de control dada, por lo que para la conservación de la masa ( $m$ ), la ecuación se puede escribir como en la Ecuación 1. Mientras tanto, la segunda ley de movimiento de Newton conduce a la ecuación de conservación de momento (Ecuación 2), donde  $t$  es el tiempo,  $U$  la velocidad y  $f$  las fuerzas que actúan sobre la masa de control.

$$\frac{dm}{dt} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{d(mU)}{dt} = \sum f \quad (2)$$

En las Ecuaciones 1 y 2, la masa y el momento son propiedades extensivas; sin embargo, si  $\phi$  es una propiedad intensiva conservada por unidad de masa, la propiedad extensiva correspondiente  $\Phi$  puede expresarse conforme a la Ecuación 3, donde  $\Omega_{MC}$  es el volumen ocupado por la MC y  $\rho$  la densidad.

$$\Phi = \int_{\Omega_{MC}} \rho \phi \, d\Omega \quad (3)$$

Al considerar la definición de la Ecuación 3, es posible desarrollar las ecuaciones de gobierno en función de un volumen de control. Así, la tasa de cambio de la propiedad  $\Phi$  en la masa de control es igual a la tasa de cambio de la propiedad dentro del VC más el flujo neto de la misma a través del del VC (Ferziger y Peric, 2002).

Por lo tanto, para un VC fijo determinado, la ecuación de volumen de control (en función de la propiedad intensiva  $\phi$ ) se puede expresar como se muestra en la Ecuación 4, donde  $\Omega_{CV}$  representa el volumen de control,  $S_{VC}$  es la superficie que encierra el VC,  $n$  es el vector unitario ortogonal a  $S_{VC}$  y se dirige hacia afuera. El primer y segundo término en el lado derecho de la Ecuación 4 son los términos temporal y convectivo, respectivamente.

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_{MC}} \rho \phi \, d\Omega = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega_{VC}} \rho \phi \, d\Omega + \int_{S_{VC}} \rho \phi U \cdot n \, dS \quad (4)$$

### 3.2 Ecuación de conservación de masa

Para la ecuación de continuidad, la propiedad  $\Phi$  es constante por conservación de la masa, por lo que la Ecuación 4 se reduce a la Ecuación 5 (i.e. si  $\Phi = m$ ,  $\phi = 1$ ). A través del teorema de Gauss, el término convectivo se transforma de una integral de superficie en una integral de volumen. Asimismo, al considerar que el VC es infinitesimalmente pequeño, la forma diferencial libre de coordenadas de la ecuación de continuidad se puede expresar conforme en la Ecuación 6. Finalmente, para flujo incompresible (i.e.  $\rho = \text{cte.}$ ) la ecuación de conservación de masa se puede expresar como en la Ecuación 7.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \, d\Omega + \int_S \rho U \cdot n \, dS = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) = 0 \quad (\text{forma conservativa}) \quad \text{ó} \quad \frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot (U) = 0 \quad (\text{forma no conservativa}) \quad (6)$$

$$\nabla \cdot U = 0 \quad (7)$$

### 3.3 Ecuación de conservación de momento

La ecuación de conservación de momento se obtiene considerando la propiedad intensiva  $\phi = U$ , expresándose como se señala en la Ecuación 8. Considerando la Ecuación 2, y que la propiedad extensiva resultaría  $\Phi = mU$ , es posible introducir el efecto de las fuerzas de superficie y cuerpo por unidad de masa (Ecuación 9), donde  $\mathbf{T}$  es el tensor de estrés para fluidos newtonianos (Ecuación 10), y  $b$  es un término fuente / sumidero (fuerzas corporales por unidad de masa):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho U \, d\Omega + \int_S \rho U U \cdot n \, dS = \Sigma f \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho U \, d\Omega + \int_S \rho U U \cdot n \, dS = \int_S \mathbf{T} \cdot n \, dS + \int_{\Omega} \rho b \, d\Omega \quad (9)$$

$$\mathbf{T} = -\left(p + \frac{2}{3}\mu \nabla \cdot U\right) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{S} \quad (10)$$

donde  $\mu$  es la viscosidad dinámica,  $\mathbf{I}$  el tensor unitario,  $p$  es la presión estática y  $\mathbf{S}$  es la tasa de tensor de deformación ( $\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\nabla U + (\nabla U)^T)$ ).

La forma vectorial libre de coordenadas de la Ecuación 9 se obtiene aplicando el teorema de divergencia de Gauss a los términos de flujo convectivo y difusivo (Ecuación 11).

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho b \quad (11)$$

$$\text{si } \nabla \cdot U = 0, \text{ entonces} \quad \mathbf{T} = -p\mathbf{I} + 2\mu \left(\frac{1}{2}(\nabla U + (\nabla U)^T)\right) = -p\mathbf{I} + \mu(\nabla U + (\nabla U)^T) \quad (12)$$

$$\text{donde } \nabla \cdot \mathbf{T} = \nabla \cdot (-p\mathbf{I} + \mu(\nabla U + (\nabla U)^T)) = -\nabla \cdot (p\mathbf{I}) + \nabla \cdot \mu \nabla U = -\nabla p + \mu \nabla^2 U$$

La Ecuación 12 se sustituye en la Ecuación 11 y, considerando la gravedad  $g$  como la única fuerza de cuerpo se obtiene la Ecuación 13):

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = \nabla \cdot (\mu \nabla U) - \nabla p + \rho g \quad (13)$$

donde  $\nu$  es una viscosidad cinemática constante,  $p$  es la presión. Para flujos incompresibles, es conveniente y más eficiente para la solución numérica, definir  $p^* = p - \rho g z$  como la presión dinámica. Esta forma permite ignorar el efecto de la aceleración gravitacional cuando se calcula el movimiento del fluido bajo condiciones de densidad constante (Ecuación 14). Si no hay velocidad del fluido, entonces  $p^* = 0$  y  $p$  corresponde sólo a la presión hidrostática. En flujos de densidad constante, la gravedad no juega un papel determinante en la obtención del campo de flujo (Ten y Edwards, 2006).

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = \nabla \cdot (\mu \nabla U) - \nabla(p^*) \quad (14)$$

### 3.4 Conservación de cantidades escalares

El tercer principio de conservación es la conservación de ecuaciones de cantidades escalares. La cual se deriva de la ecuación de volumen de control (Ecuación 4) considerando que la variación de la propiedad extensiva  $\Phi$  en el tiempo es igual al transporte neto de la cantidad escalar  $\phi$ . Así, la forma integral también se puede expresar como en la Ecuación 15, donde  $\sum f_\phi$  es resultado de la suma del transporte de la cantidad escalar  $\phi$  por mecanismos distintos ( $f$ ) a la convección y cualquier fuente o sumidero del escalar. La forma integrada de la ecuación de conservación de cantidades escalares se puede escribir como en la Ecuación 16 para flujo incompresible (forma conservativa), donde  $D$  es la difusividad para la cantidad  $\phi$ , y  $q_\phi$  es un término fuente / sumidero de  $\phi$ . El término difusivo es importante para definir la mezcla entre fases líquidas (Ferziger y Peric, 2002).

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho \phi d\Omega + \int_S \rho \phi U \cdot n dS = \sum f_\phi \quad (15)$$

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi U) = \nabla \cdot (D \nabla \phi) + q_\phi \quad (16)$$

### 3.5 Conservación de energía

La ecuación de energía, se puede escribir como en la Ecuación 17, donde  $h$  es la entalpía,  $T$  es la temperatura absoluta,  $K$  es la conductividad térmica  $K = \mu c_p / Pr$ ,  $\mathbf{S}_0$  es la parte viscosa del tensor de tensión  $\mathbf{T}$ ,  $\mathbf{S}_0 = \mathbf{T} + p\mathbf{I}$  es el número de Prandtl,  $\mu$  es la viscosidad dinámica, y  $c_p$  es la capacidad calorífica específica a presión constante. En esta ecuación, no se consideran efectos de transferencia de calor radioactivo y la generación interna de calor debido a una posible reacción química.

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho h d\Omega + \int_S \rho h U \cdot n dS = \int_S K \nabla T \cdot n dS + \int_{\Omega} (U \cdot \nabla p + \mathbf{S} \cdot \nabla U) d\Omega + \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho d\Omega \quad (18)$$

Una forma vectorial libre de coordenadas de la ecuación de energía para flujos incompresibles (i.e.  $\nabla \cdot U = 0$ ) está dada por la Ecuación 18, donde  $h$  es la entalpía específica que está relacionada con la energía interna específica,  $h = e + p/\rho$ , y  $q_\phi$  es la función de disipación, que representa el trabajo realizado contra las fuerzas viscosas y que se convierte irreversiblemente en energía interna,  $q_\phi = (\tau \cdot \nabla)U$ .

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h U) = \nabla \cdot (K \nabla T) - \frac{Dp}{Dt} + q_\phi \quad (19)$$

Al considerar incompresibilidad de los flujos ( $\rho = \text{cte.}$ ) y capacidad calorífica específica constante ( $c_p = \text{cte.}$ ), la relación  $dh = c_p dT$  y la ecuación de energía se pueden escribir como en la Ecuación 19, donde se puede despreciar el término de presión.

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c_p T U) = \nabla \cdot (K \nabla T) + q_\phi \quad (19)$$

Los flujos compresibles e incompresibles se suelen manejar por códigos CFD particularmente desarrollados para alguna modalidad, lo que conlleva a que el sistema debe considerarse compresible o incompresible para su análisis.

### 3.6 Transferencia de calor

Dentro de los flujos acompañados de transferencia de calor, las propiedades del fluido son típicamente una función de la temperatura  $T$ . Las propiedades generalmente se calculan por medio de un proceso iterativo partiendo de una temperatura inicial. Asimismo, la conducción del calor se describe mediante la ecuación de Laplace (Ecuación 20), mientras que la conducción inestable se rige por la ecuación del calor al agregarle una derivada del tiempo (Ecuación 21), donde  $\nabla^2$  es el operador de Laplace.

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (20)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - K \nabla^2 \phi = 0 \quad (21)$$

### 3.7 Integración del modelo *interMixingTemperatureWaveFoam*

El código y configuración completa del nuevo modelo implementado y denominado *interMixingTemperatureWaveFoam*, fue desarrollado considerando la plataforma CFD de OpenFOAM®, e incluye la capacidad de resolver tres fluidos incompresibles, dos de los cuales son miscibles (“*interMixing...*”-código nativo ya existente) pero con la adición de la ecuación de energía para análisis del equilibrio térmico (“*...Temperature...*”) y la generación/absorción de forzamientos de oleaje y corrientes (“*...waveFoam*”), éste último considerando la aproximación proporcionada y descrita por Jacobsen (2012). Los modelos de turbulencia, esquemas de generación de mallas y otras utilidades genéricas de OpenFOAM® están disponibles como parte del paquete de herramientas para la configuración y ejecución del caso.

Dentro del modelo, la dinámica de fluidos multifásica consta de tres fases con diferentes densidades y temperaturas. En aplicaciones marinas y de energías oceánicas, dos de las fases se pueden considerar líquidas y miscibles (e.g. agua dulce y agua salada), y la tercera quedar representada por aire permitiendo la existencia de una condición de superficie libre.

Las ecuaciones de gobierno utilizadas en el modelo *interMixingTemperatureWaveFoam*, se derivaron de una simplificación de las ecuaciones de continuidad y momentum expresadas en la Ecuación 7 y la Ecuación 14, también conocidas como Ecuaciones de Navier Stokes (NSE) para flujo incompresible e isotérmico. Las NSE describen con precisión el flujo de un fluido newtoniano (Ferziger y Peric, 2002), pero su resolución normalmente considera simplificaciones para reducir los costos computacionales sin incidir en errores importantes para los fenómenos de estudio. Así, para resolver las NSE, se consideró la solución aproximada mediante un proceso de promediado en el tiempo, que consiste en la descomposición de la variable de flujo en el componente medio (promedio de tiempo) y el componente fluctuante. Si la variable de flujo es la velocidad  $U$ , ésta se puede separar en el componente medio  $\bar{U}$  y el componente fluctuante  $U'$ , es decir  $U(\mathbf{x}, t) = \bar{U}(\mathbf{x}) + U'(\mathbf{x}, t)$ , donde  $\mathbf{x} = (x, y, z)$  es la posición del vector. Un proceso análogo se lleva a cabo con la presión dinámica  $p^*$  y la temperatura  $T$ :  $p^*(\mathbf{x}, t) = \bar{p}(\mathbf{x}) + p'(\mathbf{x}, t)$ ,  $T = \bar{T}(\mathbf{x}) + T'(\mathbf{x}, t)$ .

Las NSE promediadas en el tiempo, e implementadas en el modelo *interMixingTemperatureWaveFoam* se conocen como ecuaciones de Navier-Stokes promediadas de Reynolds (RANS). Las ecuaciones RANS quedan entonces expresadas por la ecuación de continuidad (Ecuación 22) y la ecuación de conservación de momentum (Ecuación 23) para flujos incompresibles:

$$\nabla \cdot U = 0 \quad (22)$$

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U U) = \nabla \cdot (\mu \nabla U - \rho \tau) - \nabla(p) + \rho g + \sigma \kappa_\alpha \nabla \alpha \quad (23)$$

donde  $\tau$  es el tensor de tensión de Reynolds específico. La expresión  $(\mu \nabla U - \rho \tau)$  corresponde al esfuerzo cortante total. El tensor de Reynolds específico  $\tau = \overline{u_i' u_j'}$  se puede definir a través de la aproximación de Boussinesq (Ecuación 24), donde  $\mu_t$  es el viscosidad turbulenta y  $k$  la energía cinética turbulenta por unidad de masa, definida como  $k = 0.5 \overline{u_i' u_j'}$ .

El tensor de Reynolds relaciona las tensiones de Reynolds con gradientes de la velocidad promedio  $\bar{U}$ , pero requiere modelado adicional para el cierre de las ecuaciones RANS (i.e. los modelos de turbulencia) y estimar los valores de  $k$  y  $\mu_t$ .

$$\tau = \frac{2}{\rho} \mu_t S - \frac{2}{3} \mathbf{k}I \quad (24)$$

Por otra parte, dentro del modelo se consideraron la ecuación de conservación de cantidades escalares (Ecuación 25), así como también la implementación de la ecuación de conservación de energía en función de la temperatura (Ecuación 26), considerando el promediado de Reynolds:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi U) = \nabla \cdot (D \nabla \phi) + q_\phi \quad (25)$$

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho c_p T U) = \nabla \cdot (K \nabla T) + q_\phi \quad (26)$$

La Ecuación 25 involucra la difusividad molecular  $D$  para modelar la mezcla entre las fases líquidas. Este coeficiente es la constante de proporcionalidad de la ley de Fick y representa la facilidad con la que cada soluto se mueve en el solvente. En el SI,  $D$  se expresa como  $\text{m}^2/\text{s}$  y varía con la temperatura; sin embargo, por simplicidad del modelo, se consideró constante el valor de  $D$  dentro del intervalo de tiempo de análisis. Por otra parte, debido a que no se contemplan cambios de fase en el modelo desarrollado, este primer enfoque considera el término fuente  $q_\phi$  como cero.

Para la distinción de la condición de superficie libre entre los fluidos no miscibles, se empleó el método VOF fundamentado en la ecuación de fracción de volumen  $\alpha$  considerando la aproximación descrita por Hirt y Nichols (1984) con un factor de compresibilidad (Berberović et al., 2009) para su refinamiento. Para un sistema de fluido de superficie libre,  $\alpha = 0$  representa la fase gaseosa y  $\alpha = 1$  la mezcla de las fases fluidas. De esta manera, los valores intermedios representan la interfaz entre los fluidos no miscibles, describiendo la dinámica de fluidos multifásica requerida. La distribución de  $\alpha$  se modela con una ecuación convectiva denominada ecuación de fracción de volumen (Ecuación 27), que es un caso particular de la ecuación de conservación de cantidades escalares:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha U) + \nabla \cdot (U_r \alpha (1 - \alpha)) = 0 \quad (27)$$

donde  $U_r$  es una velocidad relativa. El último término en el lado izquierdo de la Ecuación 27 corresponde al término de compresión que limita el tamaño de la interfaz.

Los valores del número de Prandtl  $Pr$  y la capacidad calorífica específica  $c_p$  se introducen en el modelo como datos constantes para cada una de las tres fases. Con ellos se estima la conductividad térmica  $K$  para la mezcla (Ecuación 28), requerida para modelar el campo de temperatura con la ecuación de conservación de energía. El número de Prandtl resulta del cociente entre la velocidad de difusión viscosa y la velocidad de difusión térmica e indica la efectividad de la conducción en comparación con la convección al transferir calor. La conductividad térmica en  $\text{Jm}^{-1}\text{s}^{-1} \text{K}^{-1}$ , mide la capacidad de conducción de calor de una sustancia y se puede obtener como:

$$K = \rho v \frac{c_p}{Pr} \quad (28)$$

Como el modelo funciona con tres fases fluidas diferentes,  $K$  se obtiene a través de una media aritmética ponderada, donde  $K$  toma en cuenta la fracción de cada fase  $\alpha$  en cada celda, como se muestra en la Ecuación 30.

$$K = \alpha_1 \rho_1 v_1 \frac{c_{p1}}{Pr_1} + \alpha_2 \rho_2 v_2 \frac{c_{p2}}{Pr_2} + \alpha_3 \rho_3 v_3 \frac{c_{p3}}{Pr_3} \quad (29)$$

Además, la capacidad de calor específica para la mezcla  $\rho * c_p$ , así como el flujo de calor  $\rho * \phi * c_p$ , se obtienen respectivamente como:

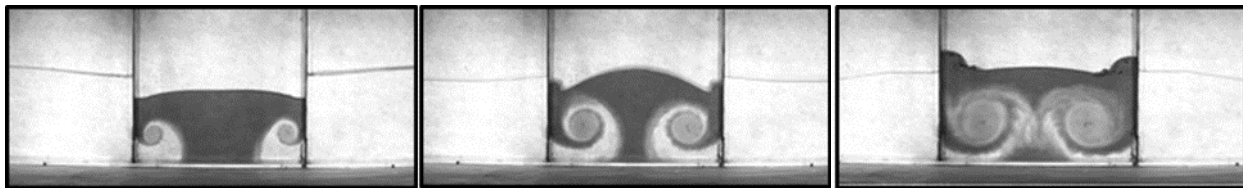
$$\rho * c_p = \alpha_1 \rho_1 c_{p1} + \alpha_2 \rho_2 c_{p2} + \alpha_3 \rho_3 c_{p3} \quad (30)$$

$$\rho * \varphi * c_p = \alpha_1 \rho_1 c_{p1} + \alpha_2 \rho_2 c_{p2} + \alpha_3 \rho_3 c_{p3} \quad (31)$$

Las ecuaciones 29, 30 y 31 son los términos asociados con el laplaciano, la derivada parcial y la divergencia, respectivamente, de la ecuación de conservación de energía (Ecuación 26).

Como se mencionó anteriormente, las ecuaciones RANS requieren de un modelo de cierre para la estimación del comportamiento de las fluctuaciones de las variables de velocidad, presión y conductividad térmica en este caso. Dichos modelos de cierre se conocen como modelos de turbulencia (Ferziger y Peric, 2002) y se caracterizan por reflejar propiedades observables de las variables dadas como una señal irregular en el espacio y el tiempo, flujo rotacional, alta difusividad, carácter impredecible de trayectorias, la coexistencia de remolinos de escalas muy diferentes y disipación. La Figura 1 muestra el desarrollo del flujo turbulento resultado de un experimento de laboratorio en el que las compuertas verticales entre compartimentos se levantan de forma cuasi-instantánea hasta una apertura dada, permitiendo la interacción de los fluidos por la diferencia en su gradiente de densidad, contrastada por un trazador (i.e. compartimentos laterales - agua dulce, compartimento central - agua salada). Al presentar una apertura súbita manual de las compuertas se tiene un flujo altamente turbulento que evidencia la presencia de remolinos a diferente escala.

**Figura 3.1** Representación experimental de flujo turbulento con sus característicos remolinos de diferente escala, alta difusividad y flujo rotacional.



Fuente de Consulta: (Rodríguez-Ocampo, P.E. 2016. Tesis de Maestría. II-UNAM)

Existen diferentes enfoques para modelar la turbulencia en las simulaciones de fluidos, que se han desarrollado con diferentes niveles de complejidad, por ejemplo: a) modelos estadísticos con una hipótesis de turbulencia-viscosidad; b) modelos avanzados que involucran ecuaciones de transporte o simulaciones numéricas turbulentas de grades remolinos. Sin embargo, cada enfoque tiene ventajas y limitaciones de rendimiento, pero son complementarios y se eligen según el tipo de problema a resolver y la respuesta que se espera (Schiestel, 2008). Cabe señalar, que la plataforma CFD de OpenFOAM® cuenta con códigos de una gran variedad de modelos de turbulencia de tipo Zero-equation, RAS (Reynolds Average Simulation), LES (Large Eddy Simulation) y DES (Direct Eddy Simulation).

### 3.8 Resultados de implementación en caso de estudio de descarga de aguas submarina

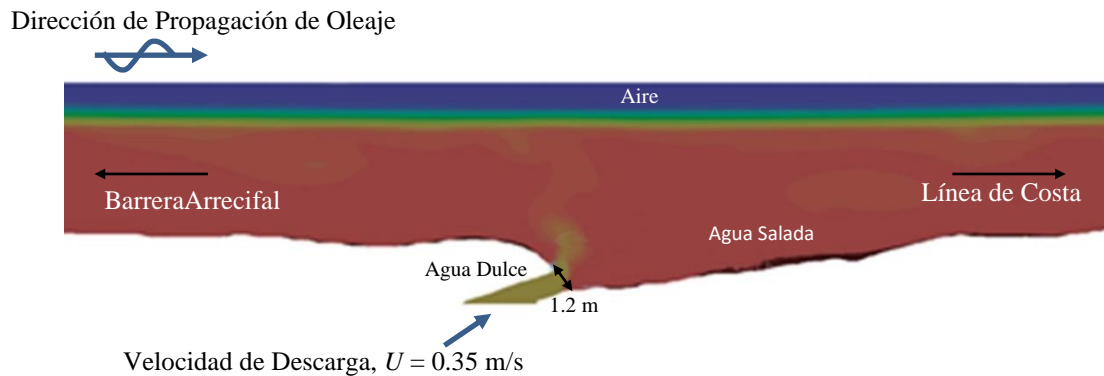
La validación de las diferentes componentes del modelo *interMixingTemperatureWaveFoam* puede consultarse de forma detallada en Rodríguez-Ocampo, 2016, 2020 y Rodríguez-Ocampo et al. 2020. Así, el caso de simulación de una descarga de aguas subterráneas (SGD) en un cuerpo de agua costero es presentado a fin de mostrar la implementación del modelo en aplicaciones estrechamente vinculadas con el aprovechamiento de gradientes termohalinos (i.e., energía renovable oceánica).

La SGD implementada se localiza en los 20.880 °N y 86.859 °W, al interior de una laguna arrecifal. Las principales características de la laguna consideran una profundidad media del agua  $h_{media} \approx 3.5$  m, influencia de oleaje local con altura de ola  $H_s = 0.2-0.3$  m; y régimen micromareal con un rango de marea máximo de 0.4 m (Rodríguez-Ocampo, 2016). La descarga media del flujo de salida del SGD se consideró con  $Q \approx 0.4-0.5$  m<sup>3</sup>/s con su batimetría conformada por una abertura de ~1.2 m de diámetro en la boca del SGD (Parra et al., 2015) (Figura 2). Además, el caso consideró una malla semi-estructurada con tamaños de celda de ~ 0.20 m para un dominio bidimensional de 180 m de largo y 6 m de altura, con una profundidad de la columna de agua de 4 m. La aceleración gravitacional se consideró de 9.81 m/s<sup>2</sup>, mientras que el caudal de la descarga se estableció en  $Q_{entrada} = 0.4$  m<sup>3</sup>/s con una velocidad  $U_{entrada} = 0.35$  m/s.



El oleaje incidente fue considerado con un período pico  $T = 7$  s y altura  $H = 0.3$  m. El tiempo total de simulación consideró 150 s. Los datos generales de la configuración del caso respecto a las tres fases consideraron: i) Fase 1 (Agua dulce),  $\nu_1 = 1 \times 10^{-6}$  m<sup>2</sup>/s,  $\rho_1 = 1000$  kg/m<sup>3</sup>, ii) Fase 2 (Agua salada),  $\nu_2 = 1 \times 10^{-6}$  m<sup>2</sup>/s,  $\rho_2 = 1030$  kg/m<sup>3</sup>, iii) Fase 3 (Aire),  $\nu_3 = 1.48 \times 10^{-5}$  m<sup>2</sup>/s,  $\rho_3 = 1.2$  kg/m<sup>3</sup>. La difusión molecular ( $D$ ) entre las fases miscibles (Fase 1 y Fase 2) se definió  $D = 1.26 \times 10^{-9}$  m<sup>2</sup>/s. La tensión superficial entre la Fase 3 y el resto de las fases se consideró como  $\sigma = 0.7$  N/m.

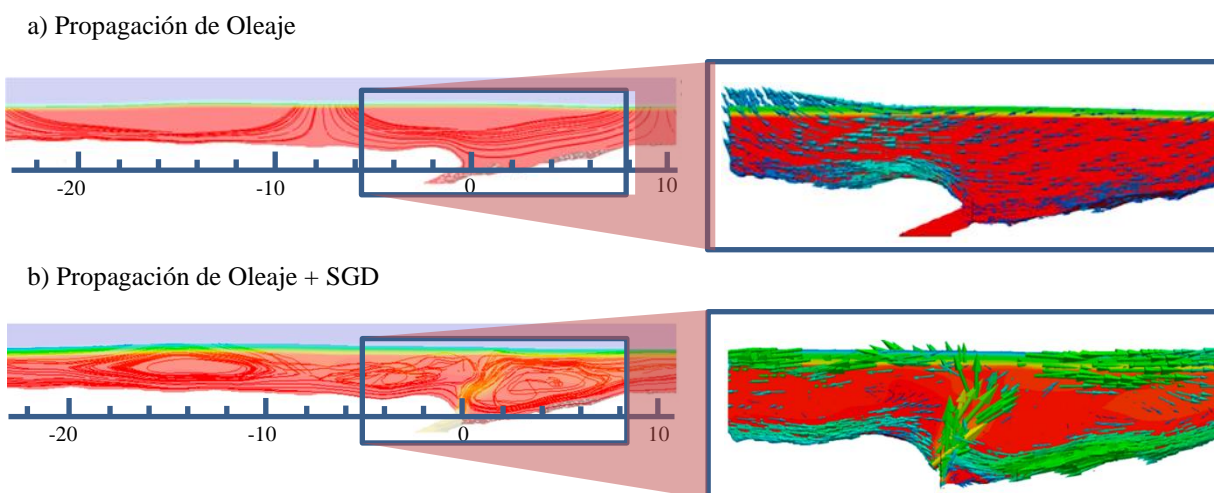
**Figura 3.2** Corte lateral de la batimetría de la descarga de agua subterránea



Fuente de Consulta: (Rodríguez-Ocampo, P.E. 2016. Tesis de Maestría. II-UNAM)

En general, se puede observar la influencia del tren de olas en la columna de agua salobre que emerge del manantial submarino (Figura 3.2), junto con la formación de remolinos de aproximadamente 1.5-2 m de diámetro (Figura 3.3). Estos remolinos aparecen cerca de la superficie libre debido al proceso de flotación por la menor densidad del agua dulce que se disuelve en la fase de agua salada. Para las condiciones simuladas, la zona de influencia del SGD mostró un radio de  $\sim 20$  m, mayormente desarrollado en dirección a la línea de costa (Figura 3.3). Las líneas de corriente y los vectores de velocidad se trazaron para un caso sin aporte de agua dulce (solo propagación de olas) y para el caso con un manantial submarino "activo" (Figuras 3.3), esto permitió evidenciar cómo la entrada de agua dulce afecta el flujo, especialmente en la zona cercana a la superficie libre y cerca del manantial submarino. La capa de agua salobre que se forma cerca de la superficie libre representa un obstáculo para el tren de olas y causa una zona con un flujo caótico y la formación de remolinos (4 a 6 m de diámetro).

**Figura 3.3** Líneas de corriente (izquierda) y vectores de velocidad (derecha) para caso: a) propagación de oleaje y b) propagación de oleaje y descarga de agua dulce del SGD. El tamaño del vector es proporcional al valor del vector.



Fuente de Consulta: (Rodríguez-Ocampo, P.E. 2016. Tesis de Maestría. II-UNAM)

Cabe señalar que los resultados presentados consideran condiciones isotérmicas pero de densidad variable, con el fin de exponer la capacidad del modelo para el mezclado entre fases, condiciones de oleaje, y la implementación de fuentes puntuales de flujo. Por lo tanto, estos resultados pueden ser extendidos considerando los gradientes termohalinos de la zona, así como su validación con datos *in-situ*, para determinar la influencia real de descargas submarinas bajo ciertas condiciones de interés.

### 3.9 Conclusiones

El presente trabajo muestra las bases para la implementación del modelo *interMixingTemperatureWaveFoam* dentro de la plataforma CFD de OpenFOAM®, con el fin de permitir el análisis de flujos multifásicos considerando la mezcla de fases y el intercambio térmico entre ellas. Para dicho propósito se consideraron las ecuaciones de gobierno promediadas de Reynolds de: i) conservación de momento, ii) continuidad, iii) conservación de cantidades escalares, iv) fracción de volumen (VOF) y v) conservación de energía en función del campo de temperatura. A partir de dicho modelo, es posible el análisis de flujos multifásicos en aplicaciones marinas como el aprovechamiento de la energía oceánica por gradientes termohalinos. Para demostrar la capacidad del modelo, se mostró su implementación y desarrollo teórico, así como su aplicabilidad a un caso de descargas submarinas puntuales de agua en un cuerpo costero bajo la influencia de oleaje y masas de agua de diferente densidad.

El flujo de fluido se observó afectado por varios factores, entre los que se pueden mencionar:

- a) Acción de fuerzas aplicadas externamente como diferencias de presión, rotación y tensión superficial (que se clasifican como fuerzas de superficie) y fuerzas de cuerpo dadas por la gravedad y fuerzas centrífugas.
- b) Densidad y viscosidad del fluido, cuya influencia en variaciones termohalinas es fundamental en procesos de flotabilidad, turbulencia y dinámica de flujos multifásicos.
- c) Velocidad del flujo, que puede inducir inestabilidad en el flujo y describe un régimen de flujo (laminar, transición o turbulento). Además, la velocidad de flujo permite la consideración de incompresibilidad de fluidos para números bajos de Mach (i.e.,  $Ma < 0.3$ ).

Aproximaciones con datos *in-situ* o pruebas de laboratorio podrían ser de relevancia para validar los fenómenos transitorios y aplicar el modelo desarrollado en los casos en que esta característica sea relevante. Por otro lado, debido a la versatilidad de los modelos CFD, el modelo desarrollado también se puede implementar en una variedad de casos diferentes que involucran flujos multifásicos, miscibilidad de dos fases líquidas con diferente temperatura/salinidad (i.e., densidad), generación/absorción de olas o corrientes, y la necesidad de evaluar diferentes modelos de turbulencia. De esta manera, las aplicaciones potenciales del modelo, además de la descarga de agua termal de plantas OTEC (conversión de energía térmica oceánica) pueden atender otro tipo de problemáticas comunes en zonas costeras tales como la descarga submarina de agua subterránea, la descarga de aguas residuales en aguas costeras y la descarga costera de agua de desecho, entre otros. Por último, dado que OpenFOAM® es una plataforma CFD de código abierto, *interMixingTemperatureWaveFoam* puede ser mejorado y ampliado en el futuro por usuarios y desarrolladores para satisfacer la resolución de problemas de energía o de flujos multifásicos en zonas costeras.

### 3.10 Declaración de disponibilidad de datos

Los datos que dan soporte a este estudio se encuentran disponibles de manera abierta en Mendeley Data <http://dx.doi.org/10.17632/x7p6drp9r6.1>.

### 3.11 Agradecimientos

La primera autora agradece el apoyo para la realización de la presente investigación al programa de becas de maestría y doctorado CONACYT, al programa EXCEED-SWINDON, así como el proyecto CONACYT-SENER SUSTENTABILIDAD ENERGÉTICA: FSE-2014-06-249795 "Centro Mexicano de Innovación en Energía del Océano (CEMIE Océano)".

### 3.12 Referencias

Berberović, E., Van Hinsberg, N.P., Jakirlić, S., Roisman, I. V., Tropea, C., 2009. Drop impact onto a liquid layer of finite thickness: Dynamics of the cavity evolution. *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.* 79. <https://doi:10.1103/PhysRevE.79.036306>.

- Bhattacharya, M., Paramati, S. R., Ozturk, I., & Bhattacharya, S. (2016). The effect of renewable energy consumption on economic growth: Evidence from top 38 countries. *Applied Energy*, 162, 733-741. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2015.10.104>.
- Brennen, C.E., 2005. *Fundamentals of Multiphase Flows*.
- Burke, M. J., & Stephens, J. C. (2018). Political power and renewable energy futures: A critical review. *Energy Research & Social Science*, 35, 78-93. <https://doi.org/10.1016/j.erss.2017.10.018>.
- Dávalos Fassler, E. T. (2020). Modelo numérico CFD del túnel de carga, tubería a presión y distribuidores utilizando el paquete computacional ANSYS Fluent. Caso de aplicación Proyecto Hidroeléctrico Sopladora. Master's thesis, Ecuador. <http://bibdigital.epn.edu.ec/handle/15000/20657>
- Davide Magagna, Andreas Uihlein. 2015. Ocean energy development in Europe: Current status and future perspectives. *International Journal of Marine Energy*, 11, 84-104. <https://doi.org/10.1016/j.ijome.2015.05.001>.
- Escalante, P.Q. (2020). Aplicación del método del gradiente conjugado para la solución de sistemas lineales simétricos en la simulación numérica de yacimientos. Bachelor's Thesis, IPN, México. <https://doi.org/10.13140/RG.2.2.12850.76485>.
- Eça, L., Hoekstra, M., 2008. Code Verification of unsteady flow solvers with method of manufactured solutions. *Int. J. Offshore Polar Eng.* 18, 120–126. <https://doi.org/10.1115/1.1412235>.
- Eça, L., Vaz, G., Koop, A., Pereira, F., Abreu, H., 2016. Validation: What, Why and How, in: *Proceedings of the ASME 2016 35th International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering OMAE2016 Busan, South Korea*.
- Ferziger, J.H., Peric, M., 2002. *Computational Methods for Fluid Dynamics*, 3rd ed, Vasa. Springer. [https://doi:10.1016/S0898-1221\(03\)90046-0](https://doi:10.1016/S0898-1221(03)90046-0).
- Greco, M., Colicchio, G., Faltinsen, O.M., 2007. Shipping of water on a two-dimensional structure. Part 2. *J. Fluid Mech.* 581, 371–399.
- Greco, M., Faltinsen, O.M., Landrini, M., 2005. Shipping of water on a two-dimensional structure. *J. Fluid Mech.* 525, 309–332.
- Hernández-Fontes, J. V., Vitola, M.A., Esperança, P. de T.T., Sphaier, S.H., 2018. Assessing shipping water vertical loads on a fixed structure by convolution model and wet dam-break tests. *Appl. Ocean Res.* 82, 63–73. <https://doi.org/10.1016/j.apor.2018.10.022>.
- Higuera, P., Lara, J.L., Losada, I.J., 2013. Realistic wave generation and active wave absorption for Navier-Stokes models. Application to OpenFOAM®. *Coast. Eng.* 71, 102–118. <https://doi.org/10.1016/j.coastaleng.2012.07.002>.
- Hirt, C.W. y B.D Nichols. 1981. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, *Journal of Computational Physics* 39(1):201-225. [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(81\)90145-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(81)90145-5).
- Issakhov, A., 2018. Mathematical modeling of the hot water discharge effect on the aquatic environment of the thermal power plant by using two water discharge pipes. *Int. J. Energy a Clean Environ.* 19, 93–103. <https://doi.org/10.1615/InterJEnerCleanEnv.2018020872>.
- Issakhov, A., Zhandalet, Y., 2019. Numerical simulation of thermal pollution zones' formations in the water environment from the activities of the power plant. *Eng. Appl. Comput. Fluid Mech.* 13, 279–299. <https://doi.org/10.1080/19942060.2019.1584126>.
- ITTC, 2008. *Uncertainty Analysis in CFD Verification and Validation Methodology and Procedures*, 25th ITTC International Towing Tank Conference 2008.

- Jacobsen, N.G., Fuhrman, D.R., Fredsøe, J., 2012. A wave generation toolbox for the open-source CFD library: OpenFoam. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 1073–1088. doi:10.1002/fld.
- Kim, J., Kim, H.-J., 2014. Numerical Modeling of Thermal Discharges in Coastal Waters, in: *International Conference on Hydroinformatics*. CUNY Academic Works.
- Kolev, N.I., 2011. *Multiphase Flow Dynamics 1 - Fundamentals*, Fourth. ed. Springer, Herzogenaurach, Germany. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-15296-7>.
- Luijendijk, E., Gleeson, T., Moosdorf, N., 2020. Fresh groundwater discharge insignificant for the world's oceans but important for coastal ecosystems. *Nat. Commun.* 11. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-15064-8>.
- Ma, Q., Li, H., Wang, Xuejing, Wang, C., Wan, L., Wang, Xusheng, Jiang, X., 2014. Estimation of seawater–groundwater exchange rate: case study in a tidal flat with a large-scale seepage face (Laizhou Bay, China). *Hydrogeol. J.* 23, 265–275. <https://doi.org/10.1007/s10040-014-1196-z>.
- McCoy, C. a., Corbett, D.R., 2009. Review of submarine groundwater discharge (SGD) in coastal zones of the Southeast and Gulf Coast regions of the United States with management implications. *J. Environ. Manage.* 90, 644–651. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2008.03.002>
- Mohseni, M., Esperanca, P.T., Sphaier, S.H., 2018. Numerical study of wave run-up on a fixed and vertical surface-piercing cylinder subjected to regular, non-breaking waves using OpenFOAM. *Appl. Ocean Res.* 79, 228–252. <https://doi.org/10.1016/j.apor.2018.08.003>.
- Olabi, A. G. (2017). Renewable energy and energy storage systems. *Energy*, 136, 1–6 <https://doi.org/10.1016/j.energy.2017.07.054>.
- Parra, S.M., Valle-Levinson, A., MariNo-Tapia, I., Cecilia, E., 2015. Salt intrusion at a submarine spring in a fringing reef lagoon Sabrina. *J. Geophys. Res.* 1–15. <https://doi.org/10.1002/2014JC010459>.
- Robles Hernández, B. A. (2020). Control de la conificación de agua en pozos horizontales con terminación de liner ranurado mediante la optimización del área disponible al flujo. Bachelor's Thesis, IPN, México. <http://tesis.ipn.mx/handle/123456789/28132>.
- Rodríguez-Ocampo, P.E., 2016. Modelación numérica de flujos multifásicos: interacción del oleaje con descargas submarinas de agua dulce. Master's Thesis, UNAM, Mexico.
- Rodríguez-Ocampo, P.E., 2020. Modelación termodinámica de fluidos multifásicos: aplicación en dispositivos de conversión de energía térmica oceánica. Doctoral Thesis, UNAM, Mexico.
- Rodríguez-Ocampo, P.E., Ring, M., Hernández-Fontes, J.V., Alcérreca-Huerta, J.C., Mendoza-Baldwin, E.G., Gallegos-Diez-Barroso, G., et. al. 2020. A 2D image-based approach for CFD validation of liquid mixing in a free-surface condition. *Journal of Applied Fluid Mechanics.* 13 (5). <https://doi.org/10.36884/jafm.13.05.30909>, pp. 1487-1500.
- Schiestel, R., 2008. *Modeling and Simulation of Turbulent Flows*. ISTE. <https://doi.org/10.1002/9780470610848>.
- Stern, F., Wilson, R. V, Coleman, H.W., Paterson, E.G., 2001. Comprehensive Approach to Verification and Validation of CFD Simulations—Part 1: Methodology and Procedures. *J. Fluids Eng.* 123, 793–802.
- Stern, F., Wilson, R. V, Coleman, H.W., Paterson, E.G., 2001. Comprehensive Approach to Verification and Validation of CFD Simulations—Part 1: Methodology and Procedures. *J. Fluids Eng.* 123, 793–802.
- Stern, F., Wilson, R., Shao, J., 2006. Quantitative V&V of CFD simulations and certification of CFD codes. *Int. J. Numer. Methods Fluids* 50, 1335–1355. <https://doi.org/10.1002/fld.1090>.

Thai, T.H., Tri, D.Q., 2017. Modeling the Effect of Thermal Diffusion Process from Nuclear Power Plants in Vietnam. *Energy Power Eng.* 09, 403–418. <https://doi.org/10.4236/epe.2017.98027>.

Tomislav, M., Höpken, J., Mooney, K., 2014. *The OpenFOAM Technology Primer*, First. ed. Sourceflux, Germany.

Wang, Z., Tabeta, S., 2017. Numerical simulations of ecosystem change due to discharged water from ocean thermal energy conversion plant 1–5.