

Simulación matemática en estado estable del pre-floculador de una potabilizadora en La Chorrera

A steady state simulation of a pre-floculator from a drinking water plant in La Chorrera

Gonzalo Pulido¹, Manuel Isaac Pérez^{2*}

¹Universidad del Istmo, Dirección de Investigación e Innovación, Panamá

²Universidad Tecnológica de Panamá, Centro Regional de Panamá Oeste, Facultad de Ingeniería Civil, Panamá

Fecha de recepción: 28 de febrero de 2023. **Fecha de aceptación:** 24 de marzo de 2023.

***Autor de correspondencia:** manuel.perez1@utp.ac.pa

Resumen. El agua potable es un recurso indispensable que el Estado debe proveer. Sin embargo, las cuencas hidrográficas se ven cada vez más afectadas y la demanda del agua va en aumento. Esto se traduce en la necesidad de hacer un mejor uso de los recursos disponibles y poner en práctica la investigación científica como una herramienta para la toma de decisiones, mediante metodologías innovadoras. En este sentido, este trabajo describe el procedimiento utilizado para simular, matemáticamente, el pre-floculador de la potabilizadora Jaime Díaz Quintero de La Chorrera. Esta simulación se realizó en el *software OpenFoam* aplicando las ecuaciones de Navier-Stock promediadas por Reynolds con el modelo turbulento de transporte de esfuerzos cortantes k-omega (SST, por sus siglas en inglés). Para esto se trabajó un modelo 3D del pre-floculador y se simplificaron sus características mediante AutoCAD y Blender. Adicionalmente, la discretización del dominio se realizó mediante el algoritmo *cfMesh* de *OpenFoam* y se utilizó el *software Paraview* para observar los resultados. La simulación se llevó a cabo con una computadora de 64 GB de RAM y 24 núcleos. Los resultados mostraron residuales del orden de 0.001 y se obtuvieron valores de y^+ dentro del rango aceptable con un máximo de 37. En cuanto al campo de velocidad, la simulación mostró los flujos y su bifurcación debido a la presencia de los tablonces con magnitudes entre 0.6 m/s cerca de la entrada y 0.2 m/s del otro lado del muro divisorio. Se obtuvo un modelo no calibrado con sentido físico.

Palabras clave. CDF, estado estable, Navier-Stock.

Abstract. The State must provide drinking water, it is essential. However, river basins are highly affected and the demand for water is increasing. We should make a better use of the available resources and generate scientific data as a tool to shrink the gap between science and decision making through innovative methodologies. This study describes the procedure used to simulate, mathematically, the pre-floculator of the Jaime Díaz Quintero water plant in La Chorrera. This simulation was performed in *OpenFoam* with Reynolds-averaged Navier-Stock equations and the k-omega turbulent shear transport (SST) model. A 3D model of the pre-floculator was simplified using AutoCAD and Blender. Discretization was performed using the *cfMesh* algorithm of *OpenFoam* and the post-processing in *Paraview*. The simulation was carried out in a computer with 64GB of RAM and 24 cores. The results showed residuals close to 0.001 and y^+ values between an acceptable range with a maximum of 37. The velocity field showed the flow and bifurcation due to the presence of planks between 0.6 m/s near the inlet and 0.2 m/s on the other side of the dividing wall. An uncalibrated model with physical sense was achieved.

Keywords. CDF, steady state, Navier-Stock.

1. Introducción

Los recursos hídricos son vitales para la subsistencia de la humanidad. Por lo que resulta necesario cuidarlos tanto en calidad como en cantidad para satisfacer las necesidades de las personas y evitar el descontento social o peor aún, conflictos armados. La escasez de este recurso afecta a más del 40 % de la población mundial y en el escenario de cambio climático la situación no se proyecta que mejore [1]. En el caso de Panamá, el estudio de [2] estima que para el 2042 las condiciones de temperatura y precipitación cambiarán significativamente. Esto pone en relevancia la necesidad de tomar decisiones que salvaguarden la seguridad hídrica del país a la luz de la creciente demanda.

En este sentido, particularmente en Arraiján, se recurre a la construcción de una nueva infraestructura para darle solución a la creciente población de esta parte del país. Actualmente, su demanda es suplida casi en totalidad por las potabilizadoras de la Autoridad del Canal de Panamá y Laguna Alta [3],[4]. Sin embargo, la inversión en una infraestructura nueva no es la única opción frente a esta problemática, como se verá más adelante.

En Panamá Oeste (sin contar Arraiján) el Instituto de Acueductos y Alcantarillados Nacionales (IDAAN) atiende el 37 % de la demanda mediante la potabilizadora Jaime Díaz Quintero [4]. Esta potabilizadora inició su construcción en el año 1963 y recibió mejoras en el año de 1980 y el año 1996. No obstante, la dinámica computacional de fluidos (CFD, por sus siglas en inglés) puede jugar un rol importante contribuyendo a mejorar sus procesos [5]. Esta herramienta se ha utilizado con el objetivo de optimizar sistemas hidráulicos como lo es el trabajo de [6], donde utilizo el modelo de Navier-Stokes promediado por Reynolds (RANS, por sus siglas en inglés) para un bifurcador de caudales.

Otro ejemplo en el uso de modelos lo tenemos con [7]. En dicho trabajo se concluyó disminuir el tiempo de floculación de una potabilizadora e invertir en la construcción de nuevos sedimentadores. Para esto se hicieron físicos y un modelo matemático desarrollado por el Instituto de Mecánica de Fluidos e Ingeniería Ambiental de Uruguay.

Estas alternativas contribuyen a la toma de decisiones basadas en ciencia, lo cual coincide con el cuarto punto de la meta 5 del Plan Nacional de Seguridad Hídrica de Panamá. Esta plantea la necesidad de hacer investigación para hacer un mejor uso de los recursos hídricos [5].

Este artículo tiene como objetivo describir la simulación matemática de un caso en estado estable del pre-floculador, mediante OpenFoam, de la potabilizadora Jaime Díaz Quintero de La Chorrera.

En este artículo se presentan ejemplos del CFD desde una perspectiva comercial hasta el ámbito académico mediante el uso de software libre. Seguido, se desarrolla sobre la teoría referente a la mecánica de fluidos que involucra al CFD como: turbulencia, la ecuación de Navier-Stokes, modelos turbulentos y métodos numéricos. Seguido, se describe el software utilizado y la función del pre-floculador.

Luego, se detalla la metodología incluida en este trabajo, la cual está conformada por: revisión de literatura y acercamiento al entorno Linux, modelación 3D, discretización del dominio, simulación matemática y el postprocesamiento. Finalmente, se muestran los resultados en forma de gráficos y figuras en 3D que muestran el campo de velocidad, así como las conclusiones y recomendaciones.

2. Marco teórico

Si bien los CFD no se han desarrollado de manera plena en Latinoamérica, una proyección del periodo 2023-2028 plantea que a nivel global este mercado crecerá a una tasa de crecimiento anual compuesto (CAGR, por sus siglas en inglés) del 12 %. Además, reporta que las compañías que tienen mayor lugar en este mercado son: ANSYS, Inc., Autodesk Inc., COMSOL AB., entre otras [8].

La mayoría de las fuentes de información sobre este tema están en el idioma inglés lo que limita la participación de un grupo más amplio de estudiantes, sin contar la complejidad matemática de fondo. Sin embargo, existen diversos trabajos de CFD en Latinoamérica como lo es el caso de [9], en donde mediante el uso de un software de ANSYS se evaluó el potencial de un material para ser utilizado como fuente de energía renovable. Con este trabajo se determinó que el material funcionaba perfectamente como biomasa de combustión, pues emitía poca toxicidad.

Otro caso Latinoamericano es la investigación de [10]. En ella se evaluó el comportamiento de una pila de concreto frente a las condiciones de una zona costera con el fin de diseñar una estructura para la producción de energía eólica marina. Este trabajo se realizó utilizando un software libre llamado OpenFoam y concluyó con una buena validación respecto al método teórico.

Como se ha visto, los CFD tienen múltiples aplicaciones, válidas para distintas disciplinas. Un último ejemplo lo tenemos en Panamá, en donde un grupo de investigación de la Universidad Tecnológica de Panamá desarrolló proyectos enfocados en evaluar la calidad del aire en la ciudad. Para esto, también hicieron uso de CFD y utilizaron el mismo software libre del trabajo anterior [11].

2.1 Turbulencia

La humanidad siempre ha ido en busca de respuestas para entender la naturaleza y ajustarla a sus necesidades a través de la ciencia. No obstante, un tema no resuelto por la física clásica, ligado a los cursos de mecánica de fluidos en ingeniería, es la turbulencia. Esta no se ha logrado definir de manera clara pues involucra fluctuaciones en los campos de velocidad que se van propagando en el sistema de manera desordenada y de una forma aparentemente aleatoria. Esta situación hace difícil que se pueda explicar mediante un modelo. A esto se le añade que es un fenómeno que contempla las tres dimensiones, las cuales también varían con el tiempo. Además, su desarrollo está ligado a las condiciones iniciales del sistema y también a sus propiedades [12], [13].

La turbulencia está presente en distintos fenómenos donde se involucran fluidos como: la dispersión de contaminantes en el aire, el flujo sanguíneo, sistemas hidráulicos como vertederos y rompeolas, entre otros [14], [15].

2.2 Navier-Stock

La teoría detrás de la modelación matemática es extensa y compleja. Existen numerosos métodos, modelos, asunciones y teoremas que se aplican. Sin embargo, todo el planteamiento referente al CFD inicia con lo más elemental, la segunda ley de Newton. A partir de esta ley se deriva la ecuación de Navier-Stock (NS), la cual contempla la conservación de masa, momento y energía. Esta es una ecuación diferencial parcial, es decir, no se puede resolver de manera analítica. Es por esto por lo que se recurren a métodos numéricos; los más comunes son: elementos finitos, diferencias finitas y volúmenes finitos. La ecuación de NS para el momento es la siguiente (ecuación 1):

$$\rho \frac{dV}{dt} = \rho g - \nabla p + \mu \nabla^2 V \quad (1)$$

En donde, del lado derecho se representan las fuerzas externas, el gradiente de presión y el término de difusión, respectivamente. El lado izquierdo es la derivada total que contiene los cambios de velocidad en el tiempo y el término convectivo [16].

De la ecuación de NS, típicamente, se pueden obtener modelaciones mediante tres métodos: simulación numérica directa (DNS, por sus siglas en inglés), simulación de grandes remolinos (LES, por sus siglas en inglés) y RANS. Las dos primeras brindan mayor detalle en la simulación, pero con un alto costo computacional. En cambio, la última alternativa es popular por su menor requerimiento computacional y funcionalidad en el campo industrial y académico.

Mediante RANS se promedian las variables del flujo, esto facilita su solución. Existen diversos métodos para hacer el promedio, el principal es el promedio en el tiempo. Con este

método en la ecuación de NS aparecen dos términos, el promedio de las velocidades en sus respectivos ejes (x, y, z) y las fluctuaciones. Estas fluctuaciones se añaden como incógnitas a la ecuación y pasan a llamarse estreses de Reynolds.

Posteriormente, mediante la hipótesis de Boussinesq se toma en consideración un comportamiento lineal entre estos estreses y los gradientes promedios de velocidad. De esta manera las incógnitas anteriores se reemplazan por la energía cinética turbulenta y la viscosidad turbulenta. Desde aquí, matemáticamente, se puede avanzar mediante varios métodos como: sistema de una ecuación, sistema de dos ecuaciones y solución algebraica.

Todo sistema de ecuaciones requiere igual número de ecuaciones que incógnitas para resolverse. Este es el problema que aborda el método de dos ecuaciones mediante los modelos turbulentos. Aporta dos ecuaciones, teniendo así, seis en total. Las tres de momento, la de continuidad y las provistas por el sistema de dos ecuaciones. Dentro de RANS se aborda la turbulencia; existen varios modelos turbulentos, así como modificaciones de cada uno de ellos. Entre los principales tenemos k-epsilon y k-omega.

Tras investigaciones sobre el tema, estos dos modelos turbulentos se unificaron y formaron el modelo línea base k-omega (BSL, por sus siglas en inglés). Posteriormente, una modificación de éste se impone y recauda lo mejor de ambos; este es: El transporte de esfuerzos cortantes k-omega (SST, por sus siglas en inglés).

El modelo SST k-omega incluye una función de pared que permite tener mejores aproximaciones, aún en los casos en donde el flujo choca con superficies y cambia de dirección abruptamente. Del mismo modo, permite tener un menor refinado en los bordes de la malla, lo que se traduce en una mayor rapidez en el cálculo y menor costo computacional.

En base a lo anterior, tenemos que el modelo RANS en conjunto con el modelo turbulento SST k-omega ofrece las mejores características para representar flujos con gradiente de presión adverso y con un menor costo computacional [17], [18].

2.3 Método de volúmenes finitos y discretización

El método numérico de volúmenes finitos es conservativo, es decir, que dentro de un volumen de control lo que entra es igual a lo que sale. Consiste en dividir el volumen de control (dominio) en pequeños volúmenes llamados celdas que contienen la información del flujo en cada punto. Esta información puede estar en el centro de las celdas, en los vértices o las aristas. La forma de las celdas puede ser triangular, cuadrada, hexagonal, etc.

Al aplicar este método en RANS cada una de las celdas se transforma de la forma diferencial a una aproximación algebraica y pasa a formar parte de un sistema de ecuaciones.

Entre más pequeñas sean las celdas, mejor se podrá representar el flujo. No obstante, esta es la principal causa del alto requerimiento computacional. Este proceso es realizado por algoritmos preestablecidos en distintos programas y recibo en nombre de discretización del dominio [17], [19].

2.4 OpenFoam

OpenFoam es un software de código libre en lenguaje C++ que permite simular distintos fenómenos de la mecánica de fluidos. Cuenta con diversos solucionadores y casos de ejemplo que facilitan su uso; sin embargo, sólo funciona en el sistema operativo Linux.

Dicho software es ampliamente utilizado y cada año presenta nuevas versiones y actualizaciones. Uno de sus algoritmos es simpleFoam, el cual es útil para fluidos incompresibles en estado estable y ejecuta diversos modelos turbulentos como SST k-omega. Algunos ejemplos de su uso lo tenemos en el trabajo de [20], con el caso más sencillo de simular, una cavidad. Por otro lado, en la investigación de [21] se modeló una turbina Francis con el objetivo de entender el comportamiento de la turbina a diferentes cargas de operación. Este caso se estudió con flujo inestable (que varía con el tiempo) por medio del algoritmo pimpleFoam.

2.5 Floculación

La floculación es el proceso en el que las partículas coloidales del agua se unen y forman un conjunto más pesado, llamado flóculo, que finalmente se decanta en el sedimentador. Para esto se utiliza un agente coagulante que ejerce su función gracias a la mezcla de un flujo lento en el floculador debido a la presencia de pantallas de concreto que propician flujos horizontales o verticales [22], [23].

El objeto de estudio de este trabajo es un pre-floculador, una estructura de concreto de la planta potabilizadora Jaime Díaz Quintero que se encuentra en medio de la mezcla rápida (donde se agrega el agente coagulante) y el floculador (donde ocurre la floculación). Esta contiene tabloncillos que favorecen la mezcla del agua; la literatura establece que dos segundos después de agregado y mezclado el agente coagulante se inicia la formación de flóculos que en presencia de alta turbulencia o esfuerzos cortantes se fragmentan y difícilmente se vuelven a unir. Además, que una velocidad apropiada para la floculación esta entre 0.21 m/s y 0.43 m/s [24].

3. Metodología

La metodología utilizada en este trabajo se muestra de manera resumida en la figura 1.

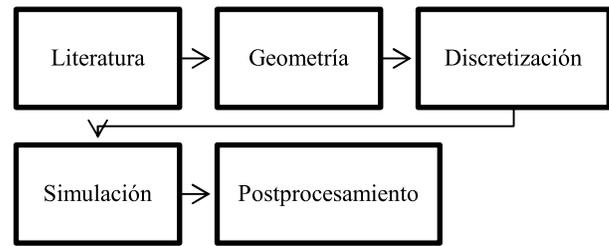


Figura 1. Flujo de trabajo para la simulación.

3.1 Revisión de literatura y entorno Linux

En esta etapa del estudio se consultaron diversos libros y páginas web para entender de manera conceptual los solucionadores y el proceso de la simulación en OpenFoam. El libro principal de referencia utilizado fue el de [17].

Se descargó el software Ubuntu en una computadora portátil con sistema operativo Windows de 4 GB de RAM y dos núcleos, con el fin de descargar e instalar OpenFoam. En esta computadora se trabajó desde el modelado 3D hasta la configuración para la simulación, así como el postprocesamiento.

3.2 Geometría y modelación 3D

El pre-floculador tiene las siguientes dimensiones: 5.6x5.7x3.6 m. Cuenta con una entrada circular, que se mantiene sumergida, de 0.40 m de diámetro y una salida de 0.9x0.8 m en la parte inferior de la pared opuesta a la entrada. También posee una pared divisoria de concreto con cavidades en sus extremos y tabloncillos de madera perpendiculares a ambos lados de dicha pared.

Se tomó un modelo 3D detallado del pre-floculador producto del proyecto “Formulación de la optimización de una planta potabilizadora mediante modelación matemática y calibración en sitio” en formato dwg y se simplificaron sus características a los elementos principales [25]. Estas modificaciones se realizaron en el software AutoCAD y Blender; además, se crearon capas planas para la entrada y la salida, así como para la superficie libre. Luego, se exportaron los modelos 3D en Blender a formato stl para ser trabajados en OpenFoam.

Los elementos del pre-floculador incluidos en el modelo 3D simplificado son los siguientes: entrada, salida, muro, cajón, tabloncillos y aire (representa la superficie del agua, es la que cierra el dominio). Algunos de estos elementos se muestran en la figura 2.

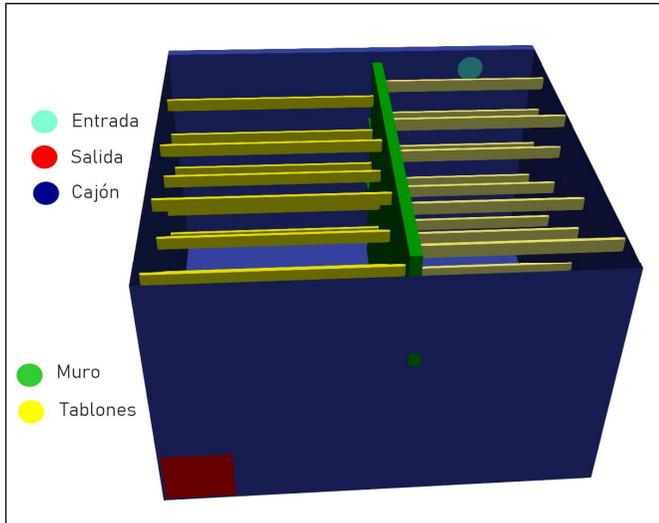


Figura 2. Elementos del pre-floculador.

3.3 Discretización del dominio

Para la discretización se utilizó el generador de malla cfMesh de OpenFoam con un tamaño de celda base de 0.15 m [26]. Se utilizaron dos conjuntos de mallas; ambos con la configuración de refinamiento local y uno con capas límites, a este último le denominaremos malla con refinamiento de aquí en adelante. Con este se generaron pequeñas celdas en los bordes de los elementos, lo que permite la funcionalidad del modelo turbulento SST k-omega.

La malla con refinamiento resultó con un total de 6.4 millones de celdas. En la figura 3 se muestra un corte de dos secciones de este enmallado.

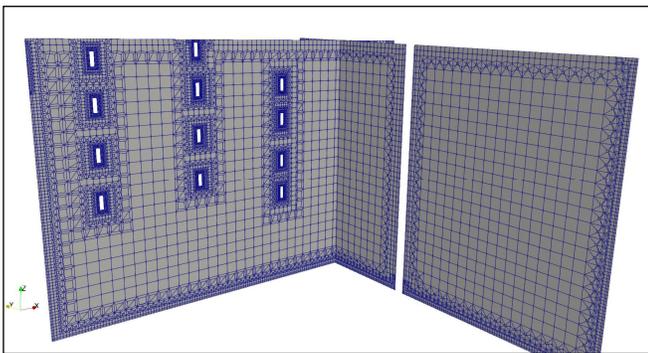


Figura 3. Malla con refinado del pre-floculador.

3.4 Simulación matemática

Para configurar los archivos de OpenFoam en Ubuntu se utilizó la computadora especificada en la sección 3.1; sin embargo, para ejecutar la simulación se utilizó una computadora con procesador AMD Ryzen 3960X a 3.80 GHz (4.5 GHz turb), 64 GB de RAM, 24 núcleos y 12 MB L2 caché.

Se configuraron las tres carpetas de OpenFoam: 0, constant y system. La primera contiene información de la velocidad y presión, así como de las variables del modelo turbulento. La segunda detalla la viscosidad y el modelo turbulento a utilizar; mientras que la tercera es la que controla el enmallado y la simulación.

A cada núcleo de la computadora se le asignó una sección del dominio (pre-floculador), para una mejor eficiencia del cálculo computacional [27]. Para esto se usó el diccionario decomposeParDict, cuya configuración se muestra en la figura 4.

```

1  *-----*
2  |                   |                   |
3  |                   |                   |
4  |                   |                   |
5  |                   |                   |
6  |                   |                   |
7  |                   |                   |
8  |                   |                   |
9  |                   |                   |
10 |                   |                   |
11 |                   |                   |
12 |                   |                   |
13 |                   |                   |
14 |                   |                   |
15 |                   |                   |
16 |                   |                   |
17 |                   |                   |
18 |                   |                   |
19 |                   |                   |
20 |                   |                   |
21 |                   |                   |
22 |                   |                   |
23 |                   |                   |
24 |                   |                   |
25 |                   |                   |
26 |                   |                   |
27 |                   |                   |
28 |                   |                   |
29 |                   |                   |
30 |                   |                   |
31 |                   |                   |
32 |                   |                   |
  *-----*
  
```

```

FoamFile
{
  version      2012;
  format       ascii;
  class        dictionary;
  location     "system";
  object       decomposeParDict;
}

numberOfSubdomains 24;

method         hierarchical;

distributed    no;

hierarchicalCoeffs
{
  n             (6 4 1);
  delta         0.001;
  order         xyz;
}
  
```

Figura 4. Captura de pantalla para la configuración de descomposición.

La simulación, en general, consistió en la ejecución de siete casos en estado estable de un fluido incompresible, mediante el algoritmo simpleFoam [28]. Este procedimiento se realizó con el objetivo de tener valores de entrada que permitieran llegar con rapidez a la convergencia. Los pasos para la simulación se describen a continuación:

- Simulación en flujo laminar: se ejecutó un caso para flujo laminar altamente viscoso (viscosidad cinemática de $0.001 \text{ m}^2/\text{s}$). En la carpeta 0 se colocaron valores típicos como zeroGradient y noSlip para el elemento aire; kqRWallFunction para las paredes y flowRateInletVelocity para la entrada, con un caudal uniforme de 0.15 m/s . Este caso se limitó a 500 iteraciones mediante el diccionario controlDict.
- Simulación en flujo turbulento: se ejecutaron cuatro casos para fluido turbulento mediante SST k-omega. Dicho procedimiento se realizó con el objetivo de ir pasando de un flujo viscoso a la viscosidad del agua a 20°C (viscosidad cinemática de $1 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$) [16]. En este proceso los valores de la carpeta 0 de la última iteración se fueron pasando como datos base para la iteración uno del siguiente

caso. Los archivos transportados fueron: k, nut, omega, p, phi y U. Las iteraciones se fueron aumentando para cada caso hasta llegar a 5000 iteraciones.

- Simulación de flujo turbulento con refinamiento: se ejecutaron dos casos con malla de refinamiento, utilizando una viscosidad cinemática de 1×10^{-6} m²/s. El segundo se limitó a 6000 iteraciones y no se le colocaron criterios de convergencia (control de residuales del sistema de ecuaciones).

3.5 Postprocesamiento

Los resultados de OpenFoam están expresados como vectores para una ubicación única, por lo que se utilizó el software Paraview para visualizarlos. Con esto se observó el campo de velocidad, presión, energía cinética turbulenta y tasa de disipación de energía turbulenta. Para este trabajo, con el fin de sintetizar, se presenta solamente el campo de velocidad para tres secciones y una representación de la velocidad con líneas de flujo para el pre-floculador desde la entrada hasta la salida.

Además, mediante Microsoft Excel se procesaron los datos de residuales para las 6000 iteraciones.

4. Resultados y discusión

El caso siete descrito en la metodología es el resultado final de la simulación, los demás fueron pasos intermedios. Por lo tanto, se utilizó un conjunto de casos para simular el pre-floculador; la computadora se tomó dos horas en completar todos los cálculos. Estos resultados se consideran válidos por las siguientes consideraciones, las cuales se discuten más adelante:

- Se obtuvieron residuales para todas las variables, con excepción de la presión, inferiores a 2×10^{-3} sin picos ni valles a lo largo de las iteraciones.
- Se obtuvo conservación de masa, expresada así en los caudales de entrada y salida.
- El modelo mostró sentido físico en el campo de velocidad.
- Se obtuvieron valores de y+ aceptables para los elementos, con excepción del tablón que esta más cercano a la superficie del agua.

Los residuales que se muestran en la figura 5 muestran una solución numérica estable. La presión se muestra en una figura a parte (figura 6) debido a que su magnitud fue significativamente superior, rondando un valor de 0.4. Esto está ligado a las condiciones de frontera utilizadas, sobre todo con la superficie libre y a las consideraciones del problema. El elemento aire en el pre-floculador es flujo multifásico; este fue modelado como un flujo monofásico por simplificación [17], [29].

Al observar los campos de velocidad se encontró que los caudales de entrada y salida expresaron conservación de masa, lo cual es un indicativo de convergencia, puesto que el método utilizado es conservativo. Esto había sido un problema en casos anteriores cuando se utilizaba el modelo k-epsilon y condiciones de frontera distintas tanto para la salida como para la entrada. En el caso 7 se utilizó caudal de velocidad de salida y velocidad del flujo de entrada, respectivamente. En la figura 7 se muestran tres secciones del campo de velocidad del pre-floculador, donde se representa la magnitud de la velocidad por colores y aparecen flechas en blanco que indican la dirección del flujo.

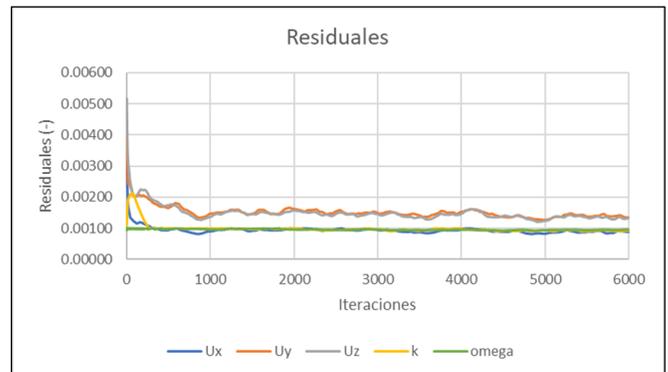


Figura 5. Residuales del último caso de la simulación.

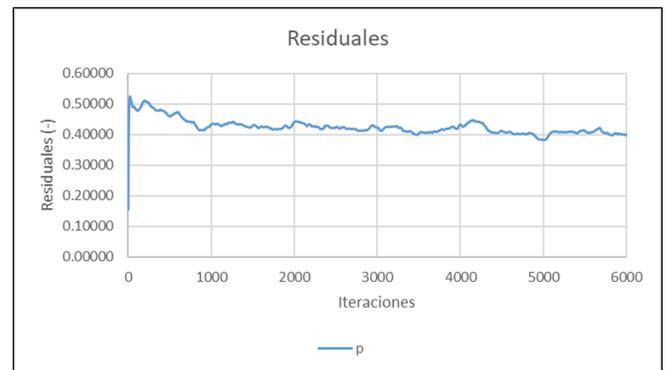


Figura 6. Residuales de presión del último caso de la simulación.

Se encontró sentido físico en el campo de velocidad con las siguientes características: la velocidad en el pre-floculador de un lado del muro y del otro variaron debido a la influencia del caudal de entrada. Este chorro al chocar con uno de los tablones causa un flujo ascendente de 0.3 m/s que lleva al agua al otro lado del muro donde el flujo se secciona como un sistema venoso a 0.2 m/s y sale influenciada por flujos provenientes mayormente de la parte media y alta del pre-floculador.

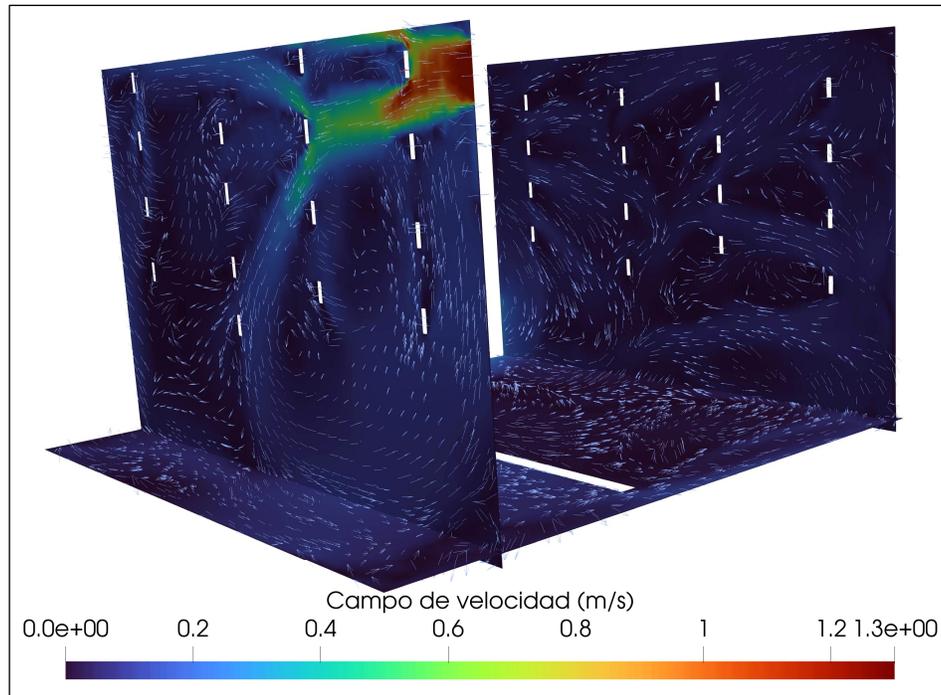


Figura 7. Secciones de campo de velocidad del pre-floculador.

La descripción anterior se puede observar en la figura 8, que muestra algunas líneas de corriente del flujo en el pre-floculador.

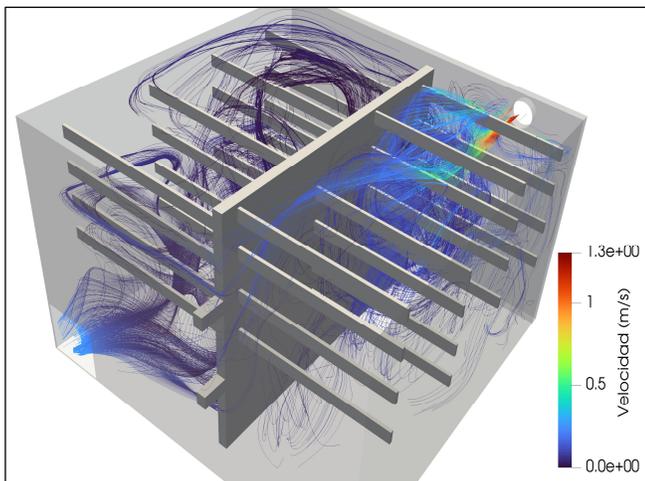


Figura 8. Líneas de corriente del pre-floculador.

De la función de la pared, propia del modelo turbulento, se desprende una variable llamada distancia adimensional a la pared que tiene la nomenclatura de y^+ . Estrictamente, un valor entre 5 y 30 es deseado para tener buenos resultados. Este

rango se puede ampliar hasta 50 o 70; su magnitud afecta los resultados, por lo que es una variable por considerar [30].

En este estudio se cumplió con el rango estricto, menos en uno de los tabloncillos. Este se localiza muy cercano al elemento aire, así que, para que no se deformara la malla en esta sección se le dio alto refinamiento. Esto coincide con lo expuesto por [31], en donde se indica que al refinar mucho un elemento se presentan valores de y^+ fuera del rango del lado inferior que influyen negativamente en la precisión de los resultados. Dicho tabloncillo resultó con un y^+ de 2.

En este trabajo no se realizó un análisis de independencia de malla. Este consiste en ejecutar la simulación múltiples veces con distintos tamaños de celda con el fin de obtener resultados que no dependan de la malla [32]. Este procedimiento requiere invertir bastante tiempo y es utilizado para obtener resultados más precisos. Con este objetivo el estudio de [33] hizo este análisis para un caso de tubo vórtice mediante cuatro modelos turbulentos, entre ellos SST k - ω .

La tecnología sigue avanzando y con ella metodologías innovadoras que contribuyen a mejorar los resultados del CFD. En este sentido, las redes neuronales profundas pueden contribuir, como ya ha sido comprobado en los trabajos de [34], [35]. Esto demuestra que existen varios mecanismos para buscar una mejor precisión en los resultados; sin embargo, un

paso forzoso en toda simulación para darle aplicación a los resultados es la calibración del modelo.

Esta se puede realizar con un software más avanzado y reconocido como se hizo en el trabajo de [36], donde se utilizó STAR-CCM+ para validar OpenFoam. También, mediante el uso de ecuaciones con solución analítica como en el trabajo de [37], en el cual se utilizaron ecuaciones de flujo laminar para placas paralelas. Por último, la validación con un modelo físico real, tal como se describe en el estudio de [38]. En dicho estudio se compararon los resultados de OpenFoam con el desbordamiento en un dique de prueba. En este trabajo se dio por calibrado el modelo, pues las descargas promedias del dique coincidieron con lo obtenido en la simulación [39].

5. Conclusiones

Se obtuvo un modelo en régimen turbulento estacionario para el pre-floculador, mediante OpenFoam y el modelo turbulento SST k-omega con sentido físico y, en general, buenos parámetros de convergencia. No obstante, el campo de presión requiere una atención especial para su análisis que deriva de la simplificación del modelo con las condiciones de frontera.

Este trabajo provee una base para la investigación de este tipo de infraestructuras, el cual se ve limitado de aplicación práctica debido a la necesidad de calibrar el modelo con mediciones in situ.

Se recomienda eliminar dos capas de refinado al elemento de tabloncitos para mejorar los valores de y^+ . Además, se podría refinar la malla en el volumen del dominio que tiene influencia por el caudal de la entrada. Esto con el fin de obtener valores más precisos, pues en algunas partes donde el modelo mostró altas velocidades el malla era gruesa. Esto se puede hacer con el refinamiento tipo caja de cfMesh.

Este trabajo contribuye como un documento guía para la simulación de otros casos similares, lo que provee una herramienta poderosa en la ingeniería para la toma de decisiones y el diseño de sistemas hidráulicos.

AGRADECIMIENTOS

A la Secretaría de Ciencia Tecnología e Innovación de (SENACYT) por financiar este trabajo a través del proyecto IOMA 19-006 titulado: Formulación de la optimización de una potabilizadora mediante modelación matemática y calibración in situ. Al Instituto de Acueductos y Alcantarillados Nacionales (IDAAAN), así como a la Universidad del Istmo. Al Dr. József Nagy por su asistencia técnica y al Dr. Gonzalo Pulido Silva, sin el cual este trabajo no hubiera sido posible; gracias por su pasión en la enseñanza y el CFD, paz a su alma.

CONFLICTO DE INTERESES

Los autores declaran no tener algún conflicto de interés.

REFERENCIAS

- [1] ONU, "Objetivo 6: Garantizar la disponibilidad de agua y su gestión sostenible y el saneamiento para todos" 2015. [Online]. Available: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/water-and-sanitation/>. [Último acceso: noviembre 16, 2022].
- [2] R. Pinzón, K. Hibino, I. Takayabu, T. Nakaegawa "Virtually experiencing future climate changes in Central America with MRI-AGCM: climate analogues study", *Hydrological Research Letters* vol. 11, n. 2, pp. 106–113, May 2017.
- [3] E. Montenegro, "Potabilizadora de Howard registra un avance del 70% y se calcula que producirá 40 millones de galones al día" 2022. [Online]. Available: <https://www.panamaamerica.com.pa/provincias/potabilizadora-de-howard-registra-un-avance-del-70-y-se-calcula-que-producira-40-0>. [Último acceso: noviembre 18, 2022].
- [4] IDAAAN. "Boletín estadístico No. 35, año 2018-2021", 2022. [Online]. Available: <https://www.idaan.gob.pa/boletin-estadisticos-historico/>. Comité de Alto Nivel de Seguridad Hídrica, "Plan Nacional de Seguridad Hídrica 2015-2050: Agua para Todos. Panamá, República de Panamá" 2016. [Último acceso: Noviembre 16, 2022].
- [5] Comité de Alto Nivel de Seguridad Hídrica, "Plan Nacional de Seguridad Hídrica 2015-2050: Agua para Todos. Panamá, República de Panamá" 2016.
- [6] C. Ceballos, M. Obando, "Modelación numérica con OpenFOAM de la optimización del bifurcador de caudales aguas arriba de la rápida escalonada El Batán, y comparación numérica – experimental". Tesis de licenciatura, Universidad Central del Ecuador, Ecuador, 2015. Available: <http://www.dspace.uce.edu.ec/handle/25000/15974>.
- [7] D. Ríos, I. Manion, M. Pintos, K. Azuriz, A. Michelena, y M. Martínez, "La evaluación de instalaciones existentes como base para la optimización de proyectos de ampliación de infraestructuras de potabilización de aguas: un caso práctico", *Revista AIDIS de Ingeniería y Ciencias Ambientales: Investigación, desarrollo y práctica*, vol. 1, n. 3, noviembre. 2009.
- [8] Expert Market Research, "Global Computational Fluid Dynamics Market 2023-2028" 2022. [Online]. Available: <https://www.expertmarketresearch.com/reports/computational-fluid-dynamics-market>. [Último acceso: noviembre 18, 2022]
- [9] J. Gonzalez, M. Oliva, D. Zambrano Vera, R. Darío, M.J. Bonilla, E. Casco, and E. Zúñiga "Modeling and computational simulation of Piptocoma discolor (Pigüe) fluid for combustion optimization in Ecuador", *Enfoque UTE*, vol. 13, no. 2, pp. 48 - 67, Apr. 2022.
- [10] G. Rodríguez1, L. Battaglia, S. Morawietz, M. Schauer, "Computation of dynamic loads exerted by regular water waves on a vertical cylinder with application to offshore wind turbine" *Proceedings of the XLII Ibero-Latin American Congress on Computational Methods in Engineering and III Pan-American Congress on Computational Mechanics, ABMEC-IACM. Rio de Janeiro, Brazil, 2021.*

- [11] UTP, "Grupo de Investigación: Air Engineering Studies (AirES)" 2022. [Online]. Available: https://utp.ac.pa/sites/default/files/documentos/2022/pdf/gi-air_engineering_studies_aires.pdf. [Último acceso: Noviembre [Accessed Nov. 20, 2022]]
- [12] B. Shujaut, "Subgrid and hybrid RANS/LES models for scalar transport and boundary layer transition", Doctor of Philosophy, Iowa State University, United State, 2022. Available: <https://dr.lib.iastate.edu/handle/20.500.12876/4vGXO6Ar>.
- [13] J. McDonough, *Introductory Lectures on Turbulence: Physics, Mathematics and Modeling*. 2da. ed. Kentucky: University Press of Kentucky, 2007.
- [14] Z. Hajati, F.Sadegh, M. Vajdi, SE. Razavi, S. Matin, "Fluid-structure interaction of blood flow around a vein valve", *Bioimpacts*. Vol. 10, n. 3, pp. 169-175, Mar. 2020.
- [15] A. Idrees; R. Al-Ameri; S. Das, "Using CFD modelling to study hydraulic flow over labyrinth weirs", *Water Supply*, vol. 22, n. 3, pp. 3125-3142, Mar. 2022.
- [16] F. White. *Fluid mechanics*. 7th ed. Mcgraw-Hill series in mechanical engineering, Jan. 2010.
- [17] F. Moukalled, L. Mangani and M. Darwish, *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics*. Springer International Publishing Switzerland, 2016.
- [18] G. Guevara, O. Huerta and A. Arias, "Modelado computacional Reynolds-Averaged Navier-Stokes flamelets para el estudio del proceso de combustión turbulenta de sprays" *Revista mexicana de física*, vol. 66, n. 1, pp. 56-68, 2020.
- [19] P. Bradshaw and G.P. Huang, "The Law of the Wall in Turbulent Flow". *Proceedings of the Royal Society of London*, vol. 451, n. 1941, pp. 165-188, Oct. 1995.
- [20] J. Fe, "Aplicación del método de volúmenes finitos a la resolución numérica de las ecuaciones de aguas someras con incorporación de los esfuerzos debidos a la turbulencia". Tesis doctoral, Universidad de La Coruña, España, 2015. Available: <https://core.ac.uk/download/pdf/61896697.pdf>
- [21] G. Tabor, "Implementation of a Modified Lid Driven Cavity in OpenFOAM", *OpenFOAM Journal*, vol. 2, pp. 62-80, Mar. 2022.
- [22] S. Salehi and H. Nilsson, "OpenFOAM for Francis Turbine Transients", *OpenFOAM Journal*, vol. 1, pp. 47-61, Nov. 2021
- [23] Comisión Nacional del Agua "Manual de Agua Potable, Alcantarillado y Saneamiento. Diseño de Plantas Potabilizadoras de Tecnología Simplificada", 2016. [Online]. Available: https://sswm.info/sites/default/files/reference_attachments/CO_NAGUA%202016.%20Dise%C3%B1o%20de%20plantas%20potabilizadoras.pdf. [Accessed Dec. 15, 2022]
- [24] I. Castelblanco and M. Orozco, "Propuesta del diseño preliminar de una planta de potabilización de agua para la vereda Santa Helena en el municipio de La Calera, Cundinamarca". Tesis de licenciatura, Universidad de La Salle, Colombia, 2020. Available: https://ciencia.lasalle.edu.co/cgi/viewcontent.cgi?article=2873&context=ing_ambiental_sanitaria.
- [25] E. Baruth (Ed.) *Water Treatment Plant Design*, 4th ed. Mcgraw-Hill, 1990.
- [26] R. Caballero, M. Castrellón and G. Pulido, "Modelado 3D CAD de una Planta Potabilizadora", *Proceedings of Congreso Nacional de Ciencia y Tecnología*, Panamá, Jun. 2021.
- [27] D. Ramalho, "Desempenho das ferramentas cfMesh e snappyHexMesh para geração da malha em torno de perfis alares". Mestre em engenharia mecânica, Universidade de Coimbra, República Portuguesa, 2015. Available: <https://estudogeral.sib.uc.pt/bitstream/10316/38984/1/Desempenho%20das%20ferramentas%20cfMesh%20e%20snappyHexMesh%20para%20geracao%20da%20malha%20em%20torno%20de%20perfis%20alares.pdf>.
- [28] OpenFOAM User Guide, "Parallel" 2018. [Online]. Available: <https://www.openfoam.com/documentation/guides/v2112/doc/openfoam-guide-parallel.html>. [Último acceso: diciembre 3, 2022]
- [29] OpenFOAM User Guide, "simpleFoam" 2018. [Online]. Available: <https://www.openfoam.com/documentation/guides/latest/doc/guide-applications-solvers-incompressible-simpleFoam.html>. [Último acceso: diciembre 3, 2022]
- [30] J. Ahmadi, M. Mahdavi, O.K. Larsen, Ch. Zhang, A. Zarkesh and S. Asadi, "Evaluating the different boundary conditions to simulate airflow and heat transfer in Double-Skin Facade". *Building Simulation*, vol. 15, pp. 799-815, Sep. 2022.
- [31] M. Salim and S.C. Cheah, "Wall y+ Strategy for Dealing with Wall-bounded Turbulent Flows", *Proceedings of the International MultiConference of Engineers and Computer Scientists*, Hong Kong, Mar. 2009.
- [32] A. Bayon and P. Lopez, "Numerical analysis of hydraulic jumps using OpenFOAM", *Journal of Hydroinformatics*, vol. 17, n. 4, pp. 662-678, Jul. 2015.
- [33] G. Mata, "Aplicación de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) y el Modelado Mecánico en el Estudio del Sistema de Bombeo Electrocentrífugo Sumergido (BEC)". Tesis de licenciatura, Universidad Autónoma nacional de México, México, 2017. Available: https://ru.dgb.unam.mx/handle/DGB_UNAM/TES01000765803.
- [34] N. Dyck, M. Parker, A. Straatman, "The impact of boundary treatment and turbulence model on CFD simulations of the Ranque-Hilsch vortex tube", *International Journal of Refrigeration*, vol. 141, pp. 158-172, May 2022.

- [35] J. Ling, A. Kurzwski, and J. Templeton, "Reynolds averaged turbulence modelling using deep neural networks with embedded invariance," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 807, pp. 155–166, Oct. 2016.
- [36] R. Maulik, O. San, A. Rasheed, and P. Vedula, "Subgrid modelling for two-dimensional turbulence using neural networks," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 858, pp. 122–144, Nov. 2019.
- [37] N. Ashton and V. Skaperdas, "Verification and Validation of OpenFOAM for High-Lift Aircraft Flows". *Journal of Aircraft*, vol. 56, n. 4, pp. 1641–1657, Apr. 2019
- [38] M. G. Castrellón and G. Pulido Silva, "Validación de simpleFoam mediante simulación de flujo laminar en un ducto rectangular", *Revista Hidrolatinoamericana de Jóvenes Investigadores y Profesionales*, vol. 5, 2021.
- [39] W. Chen, J. Warmink, M. van Gent, and S. Hulscher, "Modelling of wave overtopping at dikes using openFoam" *Proceedings of virtual Conference on Coastal Engineering*, Dec. 2020.