

55
Zej



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO**

FACULTAD DE INGENIERIA

**SIMULACION NUMERICA DE LA DESCARGA DE
HIDROCARBUROS A LA ATMOSFERA, CAUSADA
POR LA RUPTURA DE UNA LINEA DE CONDUCCION**

T E S I S

**QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO MECANICO ELECTRICISTA**

(AREA MECANICA)

**P R E S E N T A
JORGE ALBERTO EROSA ZEPEDA**

DIRECTOR DE TESIS; DR. YURI V. FAIRUZOV

MEXICO, D. F.

OCTUBRE 1996

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

A MIS PADRES

José Armado Erosa León
María de los Ángeles Zepeda Morales

por su gran apoyo,
y por ser unos grandes padres y amigos.

A LA MEMORIA DE:

Sara Morales Quintero
Dora León Guzmán
Luis A. Erosa León

por ser parte fundamental de mi desarrollo y crecimiento.
Aunque no siguen físicamente aquí,
permanecerán por siempre con nosotros.

A MIS HERMANOS

José, Oscar y Juan Carlos

que éste trabajos les sirva de motivación en sus proyectos futuros
y se acuerden que no existe reto imposible de alcanzar.

A MIS TÍOS, PRIMOS Y FAMILIARES

por su apoyo y tiempo dedicado hacia conmigo.

A TODOS MIS AMIGOS Y CONOCIDOS

AGRADECIMIENTOS

A LA UNAM

por su gran apoyo.

AL INSTITUTO DE INGENIERÍA

por permitirme trabajar en este gran Instituto.

AL Dr. Yuri V. Fairuzov

por su apoyo y asesoría otorgados
para la realización de la presente tesis.

A LOS DOCTORES:

José L. Fernández Zayas
Alejandro Rodríguez Valdés
Arturo Palacio Pérez

por su apoyo durante la realización de la presente.

A TODOS MIS PROFESORES

por toda su dedicación y esmero
entregados durante mi formación académica.

ÍNDICE

NOMENCLATURA

1. INTRODUCCIÓN

- 1.1 El problema considerado
- 1.2 Relevancia práctica del problema considerado
- 1.3 Antecedentes
- 1.4 Objetivos de la tesis

2. MODELADO DE LA DESCARGA

- 2.1 Fundamentos Teóricos
- 2.2 Modelos de descarga monofásica de gases
 - 2.2.1 Modelo de parámetros concentrados (un nodo)
 - 2.2.2 Modelo Unidimensional
 - 2.2.3 Modelo de Ruptura Total
 - 2.2.4 Comparación de los modelos de descarga monofásica
- 2.3 Descarga de flujo bifásico
 - 2.3.1 Modelo de descarga de flujo bifásico transitorio
 - 2.3.2 Modelo de expansión isentrópica homogénea
 - 2.3.3 Resultados de la simulación

3. MODELADO DE LA DISPERSIÓN DEL GAS FUGADO

- 3.1 Fundamentos Teóricos
- 3.2 Modelos semi-empíricos de Elevación de la Pluma
 - 3.2.1 Ley "2/3"
 - 3.2.2 Elevación de la Pluma en una atmósfera estable
 - 3.2.3 Elevación de la Pluma en una atmósfera neutra
- 3.3 Modelo Numérico

- 3.3.1 Formulación matemática del problema
- 3.3.2 Condiciones de frontera
- 3.4 Comparación de resultados numéricos con las predicciones de modelos semi-empíricos
 - 3.4.1 Descarga a la atmósfera neutra
 - 3.4.2 Descarga a la atmósfera estratificada
- 3.5 Ecuación de Estado y propiedades termofísicas para mezclas de gases ideales

4. SIMULACIÓN NUMÉRICA DE ACCIDENTES

- 4.1 ACCIDENTE EN UNA LÍNEA DE TRANSPORTE DE METANO
- 4.2 ACCIDENTE EN UNA LÍNEA DE TRANSPORTE DE PROPANO

5. SELECCIÓN Y DISEÑO DE UNA VÁLVULA DE AISLAMIENTO

- 5.1 Selección de válvulas para la industria de procesos
- 5.2 Tipos de válvulas
- 5.3 Válvulas de cierre
- 5.4 Selección de una válvula de aislamiento (cierre)
- 5.5 Diseño de una válvula de bola

6. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

REFERENCIAS

APÉNDICE 1 Programa principal y subrutinas de cálculo (GROUND.F)

APÉNDICE 2 Programa de entrada de datos (Q1)

- APÉNDICE 3** **Propiedades Termofísicas del Aire, Propano y Metano**
- APÉNDICE 4** **Cálculo de las propiedades termodinámicas del propano**
- APÉNDICE 5** **Discretización del Dominio y Pasos de Tiempo Simulados**

NOMENCLATURA

a	= factor de atenuación
A	= área
c	= velocidad del sonido
C	= constante de rigidez
C_d	= coeficiente de descarga
C_v	= capacidad térmica específica a volumen constante
D,d	= diámetro
e	= rugosidad de la tubería
E	= constante (Q/P)
f	= factor de fricción de Moody
F	= fuerza
F, \dot{m}	= flujo másico de gas
F.S.	= factor de seguridad
g_i	= componente i de la aceleración de la gravedad
G	= flujo másico por unidad de área
h	= entalpia
I	= Momento de inercia
J	= Momento polar de inercia
k	= coeficiente isentrópico del gas
k	= constante de rigidez
L,l	= longitud total de la tubería
m	= masa molecular
M	= número de Mach, masa, momento aplicado
P	= presión
\bar{P}	= presión adimensional
P_{0i}	= presión de estancamiento en la sección "i"
q	= flujo de calor por unidad de masa del gas
Q	= flujo de gas; $Q = \rho u$
r	= radio
R	= constante universal del gas
S,s	= entropía
S	= resistencia
t	= tiempo
l	= espesor
\bar{t}	= tiempo adimensionalizado = l / τ
T	= temperatura absoluta
T	= momento torsionante
u	= velocidad media en la dirección X
u_i	= componente de la velocidad en las distintas direcciones
U	= energía interna
v	= volumen específico
v	= velocidad
V	= volumen
x,y,z	= sistema de ejes coordenados

Letras Griegas

α	= constante adimensional
γ	= relación de calores específicos
ϵ	= relación de disipación de energía cinética turbulenta
κ	= energía cinética turbulenta
κ	= constante definida en la ecuación (2.18)
Γ_{T0}, ν_T	= coeficiente de intercambio turbulento
ξ	= coeficiente de caída de presión
μ	= viscosidad
ρ	= densidad
σ_{T0}	= número de Prandtl turbulento
σ	= resistencia del material
τ	= constante de tiempo, esfuerzo torsionante
θ	= temperatura potencial
χ	= calidad
$C_{\mu}, C_D, \sigma_k,$ $\sigma_{\epsilon}, C_{1\epsilon}, C_{2\epsilon}$	= constantes empíricas en el modelo κ - ϵ : (Rodi)

Subíndices

a	= ambiente
av	= promedio
b	= descarga total
c	= descarga sónica, al corte
f	= líquido
fg	= estado de vaporización (fluido-gas)
g	= gas
e	= salida
i	= inicial
p	= fluencia
s	= descarga subsónica o entropía
t	= transversal o torsión.
th	= orificio de descarga
o	= condiciones iniciales
0	= condición en el extremo intacto
1	= condición cercana a la ruptura

1. INTRODUCCIÓN

1.1 El problema considerado

En México, año con año, ocurren graves accidentes asociados con la ruptura de las líneas de transporte de hidrocarburos altamente inflamables.

Dichas rupturas son ocasionadas por diversos factores, tales como corrosión y fallas en el material de la línea de conducción, sobre-presión en la línea, rupturas involuntarias causadas durante excavaciones, etc.

En el caso de la ruptura de la línea, el hidrocarburo conducido escapa hacia la atmósfera generando una nube peligrosa de gas. Su formación o disminución depende del gasto másico de gas descargado y de la turbulencia y estabilidad de la atmósfera baja.

La presencia de la nube de hidrocarburo gaseoso en el ambiente puede ser de gran riesgo, ya que la posible existencia de una fuente de ignición en la zona cercana a la ruptura, o a la nube, puede causar una explosión de consecuencias devastadoras. O bien, en el mejor de los casos, la contaminación del aire adyacente a la zona de la fuga.

El presente trabajo, se enfoca al estudio de ambos fenómenos ocurridos durante el posible accidente, en una línea larga de transporte de líquidos o gases inflamables.

1.2 Relevancia práctica del problema considerado

Como consecuencia de este tipo de accidentes, se ha observado que el número de lesionados, muertos y daños a propiedades vienen relacionados con la cantidad de gas fugado de las líneas de conducción que transportan hidrocarburos (LPG, propano, metano, gasolina, etc.). Esta correlación indica que, a mayores volúmenes de gas fugado, mayor será la cantidad de lesionados, muertos y daños a propiedades.

Ante la necesidad de reducir los daños causados por éstos accidentes, así como la de prevenir algunos posteriores, es necesario contar con una herramienta confiable que permita simular la descarga y dispersión del hidrocarburo fugado, producto de la ruptura de una línea de transporte.

El desarrollo de dicha herramienta, ayudaría en gran medida a la planeación y desarrollo de las medidas de seguridad en las líneas de transporte actuales y en aquellas que estuvieran en proceso de diseño.

En México existen un total de 393 ductos que transportan hidrocarburos, sumando una longitud total de 58,139.2 km. /44/. Por lo tanto, dichos programas serían de gran utilidad para aquellas compañías, nacionales o internacionales encargadas del transporte de hidrocarburos, así como a aquellos organismos que pretenden la seguridad y conservación del medio ambiente mexicanos.

1.3 Antecedentes

Los hidrocarburos dentro de las líneas de transporte, pueden ser conducidos en forma gaseosa (metano), o líquida (propano, LPG).

En el caso de la conducción de hidrocarburos en forma gaseosa, Richardson y Saville /20/ reportan que una vez ocasionada la ruptura y generada la descarga, existe una rápida despresurización de la línea de transporte, observándose en ésta tres etapas principales:

- a) Movimiento de una onda de expansión, ocasionada por la ruptura en el extremo roto.
- b) Flujo crítico.- El gas se descarga a la velocidad del sonido debido a las condiciones, de presión interna y atmosférica principalmente, existentes en la línea instantes antes de iniciada la ruptura.
- c) Flujo subcrítico.- Una vez terminada la etapa de flujo crítico, la velocidad del flujo comienza a ser menor que la del sonido.

Estas etapas serán estudiadas más a fondo en el capítulo No. 2.

Para el caso del transporte de líquidos, una característica del problema es que se presume que el material es conducido a una presión suficientemente alta para prevenir la formación de vapor. Sin embargo, la evaporación instantánea del líquido ocurrirá en el caso de una despresurización rápida, causada por un rompimiento de la línea. Esto es, el líquido transportado se evaporará instantáneamente justo después que su presión alcance la condición de saturación.

Con una presión suficientemente alta, corriente arriba del rompimiento, el flujo a través de la ruptura alcanza la condición de flujo crítico, por eso el gasto llega a ser máximo e independiente de las condiciones corriente abajo del rompimiento. El gasto crítico a través de la tubería o recipiente roto, depende del estado del fluido corriente arriba del rompimiento y de las características propias del rompimiento. Fairuzov /43/ propone un modelo de flujo bifásico aceptable, que permite calcular la descarga de flujo bifásico causada por el rompimiento de una línea de conducción de hidrocarburos en forma líquida.

Una vez conocida la descarga del gas, puede calcularse la dispersión y elevación de la pluma de gas generada por la descarga de éste. Antes de esto, es necesario conocer las características propias de la atmósfera para poder predecir confiablemente la dispersión del gas. El flujo dentro de la atmósfera es totalmente turbulento, excepto en los últimos milímetros cercanos a la superficie terrestre, donde se caracteriza por ser laminar. El movimiento del flujo turbulento es transitorio y muy irregular. Dicho movimiento consiste de movimientos en un amplio rango de longitudes y escalas. Las dos principales fuentes de producción de la turbulencia son el esfuerzo cortante del viento y la fuerza de flotación. Por flotación se entiende que, si un pequeño volumen de aire tiene menor densidad que el aire a su alrededor, este tiende a subir; mientras que si un pequeño volumen de aire tiene mayor densidad que el de su alrededor, este tiende a descender. De ahí la importancia de conocer las condiciones del aire que se encuentra adyacente a la pluma. En días soleados con intensa radiación solar, la superficie terrestre calentará el aire sobre dicha superficie. Esto establecerá una estratificación inestable dentro de la atmósfera. Lo contrario ocurrirá durante las noches despejadas, cuando la superficie fría de la tierra enfríe el aire situado sobre ésta. Esto establecerá una estratificación estable de la atmósfera. La estratificación intermedia a la estable y la inestable se llama neutra. En este caso la temperatura decrece con respecto a la altura aproximadamente en términos de la relación adiabática. Lo anterior significa que si un volumen pequeño de aire, que tiene la misma temperatura del aire adyacente, es llevado adiabáticamente a una altura superior, éste volumen tendrá la misma temperatura que el aire adyacente a esta última altura. En el caso estable, la temperatura decrece con respecto a la altura, en menor medida que para el caso adiabático; mientras que en el caso inestable es lo contrario, la temperatura decrece más rápido que en el adiabático.

La turbulencia es un rasgo característico de la atmósfera, como ya se observó, y debido al amplio rango de longitudes y escalas de tiempo en un flujo turbulento, es necesario emplear un modelo de turbulencia durante la simulación numérica de la dispersión. Existe una gran variedad de modelos de turbulencia [30]. El modelo $k-\epsilon$ no ha sido tan empleado durante la simulación de flujos en la parte baja de la atmósfera. Detering y Etling (1984) emplearon el modelo $k-\epsilon$ para la simulación de la capa límite atmosférica dentro de una atmósfera con estratificación neutra. Ambos se vieron obligados a hacer modificaciones al modelo, con el fin de obtener resultados acertados para la región cercana a la superficie.

Sin embargo, debido a que en la zona de interés de la atmósfera el esfuerzo cortante del viento es grande y los efectos debidos a la fuerza de Coriolis pueden despreciarse, el modelo de turbulencia $k-\epsilon$ puede ser una herramienta útil para la simulación.

En cuanto a la parte de evolución y dispersión del gas, mucho se ha estudiado sobre este tema. Entre los diversos factores que afectan la elevación de la pluma están el flujo de descarga hacia la atmósfera, la velocidad del viento, la altura de la descarga, la temperatura del flujo y la estabilidad de la atmósfera.

Existen una enorme variedad de modelos que describen la elevación de plumas flotantes en una atmósfera neutra [21,24], pero todavía no existe algún modelo que considere totalmente los anteriores factores. No obstante que el modelo de Briggs predice de una manera sencilla y algo certera la evolución y elevación de la pluma generada por un afluyente, ninguno de los anteriores modelos realiza una buena predicción del comportamiento de la pluma en una atmósfera con una estratificación distinta a la neutra.

1.4 Objetivos de la tesis

La realización de la presente tesis tuvo como propósito desarrollar programas que puedan ser empleados como herramientas para el análisis confiable y rápido de los problemas que surjan durante el diseño, mantenimiento y planeación de medidas de seguridad para los sistemas de transporte de líquidos subenfriados (gases licuados), y gases.

Más específicamente, los objetivos se pueden enumerar como sigue:

- 1) Desarrollar un programa para la simulación de la descarga de hidrocarburos gaseosos a través de una ruptura, de tamaño arbitrario, en una línea de conducción de hidrocarburos. Dicho programa contempla el cálculo de propiedades termodinámicas para el propano.
- 2) Desarrollar un modelo numérico tridimensional de dispersión del gas fugado, que permita calcular los campos transitorios de velocidad, concentraciones, temperatura, bajo condiciones arbitrarias de la atmósfera, y así poder evaluar la zona afectada por la descarga del hidrocarburo.
- 3) Modelar varios escenarios de fugas con el propósito de estimar la influencia de los parámetros físicos (velocidad del viento, temperatura de la descarga, estado termodinámico de fluido, longitud de la línea, etc.) sobre la rapidez de la descarga y el radio de afectación.
- 4) Estudiar sobre la importancia del empleo de válvulas de aislamiento en las líneas de transporte de hidrocarburos, así como la de una buena selección de éstas.

El segundo capítulo de la presente tesis está dedicado al modelado de las descargas de gas y líquidos comprimidos a través de una ruptura de la tubería de conducción. El modelo de la dispersión de gas (vapor) a una atmósfera estratificada y neutra se presenta en el capítulo tres. Los resultados de la simulación numérica de varios accidentes con metano y propano, bajo distintas

condiciones a la descarga, se encuentran en el capítulo cuatro. El capítulo cinco está enfocado a la selección y el diseño confiable de una válvula de aislamiento para las líneas de conducción de hidrocarburos altamente volátiles e inflamables. Finalmente las conclusiones y recomendaciones se presentan en el capítulo seis.

2. MODELADO DE LA DESCARGA

2.1 Fundamentos Teóricos

2.1.1 Descarga de Recipientes rígidos

La descarga de un recipiente rígido sometido a una presión interna mayor que la exterior, es un ejemplo común y típico de un problema del flujo en estado transitorio.

Considere un recipiente rígido en donde se desprecian los cambios de energía potencial y cinética, no existen ni trabajo de flecha, ni intercambio de calor entre el recipiente y sus alrededores, por lo que la ecuación de conservación de la energía queda

$$(u + Pv)dm = dU \quad (2.1)$$

o bien

$$hdm = d(mu) = mdu + udm \quad (2.2)$$

reagrupando

$$\frac{du}{h-u} = \frac{dm}{m} \quad (2.3)$$

Observe que para asociar valores a las propiedades, como h y u , de la masa que se encuentra dentro del volumen de control, se necesita que el fluido permanezca en equilibrio todo el tiempo.

La anterior ecuación es completamente general. En otras palabras, no se ha indicado la naturaleza del fluido que sale del tanque presurizado. Todavía es posible introducir dos relaciones adicionales sin perder esta generalidad. La primera, a partir de la definición de la función entalpia, $h-u=Pv$. La segunda, ya que el volumen del sistema abierto permanece constante en el tiempo, a partir de la relación básica $V = mv$ se halla que

$$dV = m dv + v dm = 0 \quad (2.4)$$

Por tanto,

$$\frac{dm}{m} = -\frac{dv}{v} \quad (2.5)$$

Sustituyendo las ecuaciones (2.5) y (2.3) en la ecuación de conservación de la energía se llega a

$$du + P dv = 0 \quad (2.6)$$

Este resultado es notable, ya que para un sistema cerrado de composición constante se observa que

$$T ds = du + P dv \quad (2.7)$$

donde dicha relación es válida para una sustancia simple compresible, sin importar la naturaleza del proceso. Al comparar las dos últimas ecuaciones se concluye que para el proceso de descarga, $ds=0$.

Por lo que, para cualquier fluido que escapa de un recipiente a presión bajo las suposiciones antes mencionadas, la entropía específica dentro del volumen de control se mantiene constante.

Como ejemplo específico de un proceso como el mencionado, considere el flujo de un gas ideal desde un tanque a presión, rígido, y adiabático. Ya que el proceso es isentrópico, son válidas las relaciones isentrópicas. Por ejemplo, $T(v)^{k-1} = cte.$ es válida si se supone que las capacidades térmicas específicas son constantes.

Para un gas ideal también se puede obtener una relación para la masa que queda en el tanque en cualquier instante, en función de las propiedades de la masa dentro del volumen de control. De la ecuación (2.5) y de las relaciones isentrópicas para un gas ideal

$$\frac{dT}{T} = (1 - k) \frac{dv}{v} \quad (2.8)$$

Entonces,

$$\frac{1}{k-1} \frac{dT}{T} = \frac{dm}{m} \quad (2.9)$$

Integrando la ecuación anterior se obtiene

$$\frac{m_2}{m_1} = \left(\frac{T_2}{T_1} \right)^{\frac{1}{k-1}} \quad (2.10)$$

Si se conoce la relación de presiones, la ecuación equivalente a (2.10) será

$$\frac{m_2}{m_1} = \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{1}{k}} \quad (2.11)$$

2.1.2 Velocidad del Sonido y número de Mach

La velocidad del sonido es la velocidad de propagación de un pulso infinitesimal de presión, onda sonora, a través de un medio; dicha velocidad depende del estado del medio sobre el cual se propaga.

Una onda sonora es una pequeña perturbación de la presión que se propaga a través de gases, líquidos o sólidos a una velocidad c , que depende de las propiedades del medio. La velocidad del sonido es una propiedad importante en el estudio de flujos compresibles.

La figura 2.1a muestra una onda de presión moviéndose hacia la derecha con una velocidad de magnitud c . La onda se genera por un desplazamiento pequeño del pistón. (como muestra en la figura). La presión, la densidad y la temperatura en la región de la izquierda de la posición de la onda han sido modificadas respecto a los valores del fluido no afectado a la derecha de la onda, designados simplemente como p , ρ y T . Después del paso de la onda, el fluido a su izquierda se encuentra en movimiento estacionario con una velocidad de magnitud ΔC .

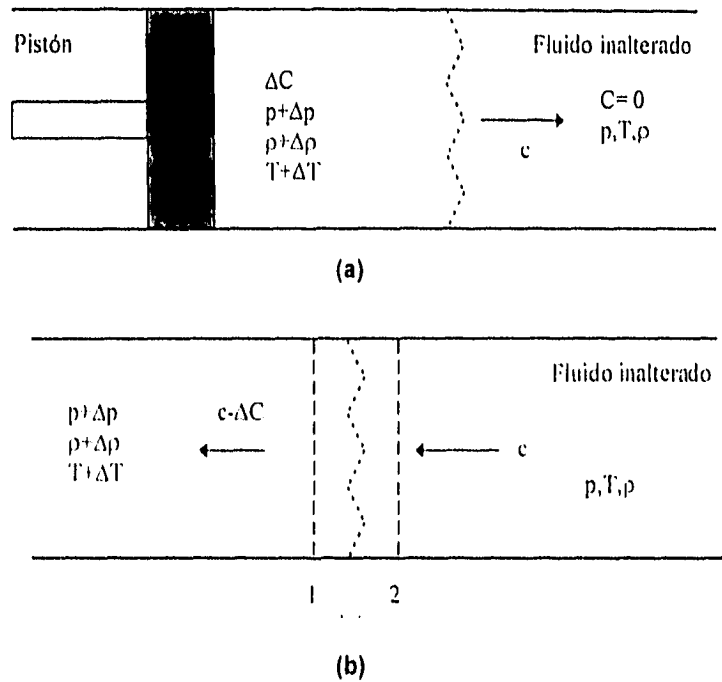


Figura 2.1 Análisis de la propagación de una onda sonora

La figura 2.1a muestra el frente de onda desde el punto de vista de un observador estático. Es posible analizar esta situación desde el punto de vista de un observador que se mueve con la onda. Adoptando este punto de vista se aplica el análisis de volumen de control en situación estacionaria, identificado en la figura 2.1b. Para el observador que está en reposo respecto a la onda, el fluido a la derecha del frente de onda aparece moviéndose con velocidad c , presión p , densidad ρ y temperatura T y el fluido a la izquierda se mueve con velocidad $c-\Delta C$, presión $p+\Delta p$, densidad $\rho+\Delta\rho$ y temperatura $T+\Delta T$.

En situación estacionaria, el principio de conservación de masa para el volumen de control se reduce a

$$\rho A c = (\rho + \Delta\rho) A (c - \Delta C) \tag{2.12}$$

Reagrupando

$$0 = c \Delta\rho - \rho \Delta C' - \Delta\rho \Delta C' \tag{2.13}$$

La perturbación es suficientemente débil de modo que el tercer término de la derecha de la ecuación (2.13) puede omitirse, quedando

$$\Delta C' = \left(\frac{c}{\rho} \right) \Delta\rho \tag{2.14}$$

Ahora bien, aplicando la ecuación de cantidad de movimiento al volumen de control. Como el espesor de la pared de la onda es pequeño, se desprecian las fuerzas de rozamiento con la pared. También se desprecia el efecto de la gravedad. Así, las fuerzas importantes que actúan

sobre el volumen de control en la dirección del flujo son las fuerzas debidas a las presiones de entrada y salida. Con estas idealizaciones, la componente de la ecuación de cantidad de movimiento en la dirección del flujo se reduce a

$$\begin{aligned} pA - (p + \Delta p)A &= \dot{m}(c - \Delta c) - \dot{m}c \\ &= (\rho A c)(-\Delta c) \end{aligned} \quad (2.15)$$

o

$$\Delta p = \rho c \Delta c$$

Combinando las ecuaciones (2.14) y (2.15), y despejando c ,

$$c = \sqrt{\frac{\Delta p}{\Delta \rho}} \quad (2.16)$$

Para ondas sonoras, las variaciones de presión, densidad y temperatura al paso de la onda son muy pequeñas. Así la relación $\Delta p/\Delta \rho$ en la ec. (2.16) se puede interpretar como la derivada de la presión con respecto a la densidad al paso de la onda. Además se conoce que la relación entre la presión y la densidad al paso de una onda sonora es casi isentrópica. La expresión para la velocidad del sonido será

$$c = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s} \quad (2.17)$$

o en términos de volumen específico

$$c = \sqrt{-v^2 \left(\frac{\partial p}{\partial v}\right)_s} \quad (2.18)$$

Aunque hemos asumido que el sonido se propaga isentrópicamente, el medio puede estar sometido a cualquier proceso.

La relación entre la presión y el volumen específico de un gas ideal para entropía constante es $p v^k = cte.$, donde k es la relación de calores específicos. Entonces, con $(\partial p / \partial v)_s = -k p / v$, y la ec. (2.18) da $c = \sqrt{k p v}$. Sustituyendo la ecuación de estado del gas ideal, tenemos que la velocidad del sonido en un medio con características de gas ideal se calcula como

$$c = \sqrt{k R T} \quad (2.19)$$

La relación de la velocidad de una corriente de fluido, C , en un estado cualquiera respecto a la velocidad del sonido c en el mismo estado juega un papel importante. A dicha relación se le conoce como número adimensional de Mach, o simplemente número de Mach, y se escribe

$$M = \frac{C}{c} \quad (2.20)$$

Cuando $M > 1$, el flujo se denomina supersónico, cuando $M < 1$ es subsónico y cuando $M = 1$, el flujo es sónico. El término hipersónico se utiliza para flujos con número de Mach mucho mayor que uno y el término transónico cuando el número de Mach es próximo a la unidad.

2.1.3 Flujo Compresible

Se considera un flujo compresible, cuando la densidad del fluido varía significativamente entre puntos distintos ubicados sobre una misma línea de corriente.

Consideraremos que un flujo es incompresible cuando $M \leq 0.3$. Esto debido a que las variaciones en la densidad son despreciables (menores al 3%).

2.1.4 Propiedades de Remanso en flujo compresible

Cuando se estudian flujos compresibles, es conveniente trabajar con propiedades evaluadas en un estado de referencia conocido como estado de remanso. El estado de remanso es el estado que se obtiene si el fluido es desacelerado isentrópicamente hasta velocidad cero. Por lo que, realizando el balance de energía a un volumen de control se obtiene que, la entalpía en el estado de remanso, asociada con un estado real en el que la entalpía específica es h y la velocidad es C , está dada por

$$h_0 = h + \frac{C^2}{2} \quad (2.21)$$

La entalpía designada aquí como h_0 se llama entalpía de remanso. La presión p_0 y temperatura T_0 en el estado de remanso se llaman presión de remanso y temperatura de remanso, respectivamente, y pueden ser calculadas a partir de la ec. (2.21).

Considerando el caso de un gas ideal con C_p constante, la ec (2.21) queda

$$T_0 = T + \frac{C^2}{2C_p} \quad (2.22)$$

Introduciendo $C_p = kR/(k-1)$, junto con las ecuaciones (2.19) y (2.20)

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{k-1}{2} M^2 \quad (2.23)$$

De las ecuaciones (2.10) y (2.11) para flujo isentrópico obtenemos que

$$\frac{P_0}{P} = \left(1 + \frac{k-1}{2} M^2\right)^{\frac{k}{k-1}} \quad (2.24)$$

$$\frac{\rho_0}{\rho} = \left(1 + \frac{k-1}{2} M^2\right)^{\frac{1}{k-1}} \quad (2.25)$$

2.1.5 Flujo isentrópico a través de boquillas

Suponiendo que se tiene una tobera o difusor dentro de el volumen de control en estudio. Si el sistema opera en un régimen estacionario, entonces el flujo másico es constante, por lo que

$$\rho A c = cte. \quad (2.26)$$

En forma diferencial

$$\begin{aligned} d(\rho A c) &= 0 \\ A c d\rho + \rho A dC + \rho C dA &= 0 \end{aligned} \quad (2.27)$$

dividiendo la anterior expresión entre $\rho A c$,

$$\frac{d\rho}{\rho} + \frac{dC}{C} + \frac{dA}{A} = 0 \quad (2.28)$$

Considerando que no existe intercambio de calor, ni trabajo, y despreciando los efectos de la energía potencial, el balance de energía queda

$$h_2 + \frac{C_2^2}{2} = h_1 + \frac{C_1^2}{2} \quad (2.29)$$

Suponiendo una condición de remanso como el primer estado termodinámico del proceso, las relaciones entre entalpa específica y energía cinética deben satisfacer para cada estado

$$h + \frac{C^2}{2} = h_{01} \quad (2.30)$$

En forma diferencial tendremos

$$dh = -C dC \quad (2.31)$$

Además de las ecuaciones que expresan la conservación de masa y energía, deben tenerse en cuenta las relaciones entre las propiedades. Suponiendo que el flujo evoluciona isentrópicamente, la relación de propiedades

$$\gamma ds = dh - \frac{dp}{\rho} \quad (2.32)$$

se reduce a

$$dh = \frac{1}{\rho} dp \quad (2.33)$$

Estableciendo la relación $p=p(\rho,s)$ en forma diferencial

$$dp = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_s d\rho + \left(\frac{\partial p}{\partial s} \right)_\rho ds \quad (2.34)$$

El segundo término es nulo en flujos isentrópicos. Introduciendo la ecuación (2.17) en la anterior ecuación, tendremos que

$$dp = c^2 d\rho \quad (2.35)$$

Combinando las ecuaciones (2.32) y (2.33) resulta en

$$\frac{1}{\rho} dp = -C' dC \quad (2.36)$$

Sustituyendo la ecuación (2.35) en (2.36) y combinado el resultado con la ecuación (2.28)

$$\frac{dA}{A} = -\frac{dC}{C} \left[1 - \left(\frac{C'}{c} \right)^2 \right] \quad (2.37)$$

En términos del número de Mach M

$$\frac{dA}{A} = -\frac{dC}{C} \left[1 - (M)^2 \right] \quad (2.38)$$

La ecuación (2.38) establece cómo cambia el área al variar la velocidad. Se pueden identificar cuatro casos siguientes.

- Caso 1: Tobera subsónica. $dC > 0$, $M < 1$, por lo que $dA < 0$. El conducto converge en la dirección del flujo.
- Caso 2: Tobera supersónica. $dC > 0$, $M > 1$, por lo que $dA > 0$. El conducto diverge en la dirección del flujo.
- Caso 3: Difusor supersónico. $dC < 0$, $M > 1$, por lo que $dA < 0$. El conducto converge en la dirección del flujo.
- Caso 4: Difusor subsónico. $dC < 0$, $M < 1$, por lo que $dA > 0$. El conducto diverge en la dirección del flujo.

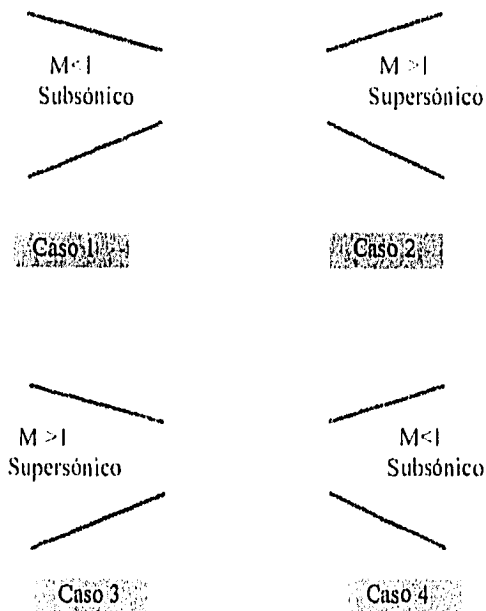


Figura 2.2 Toberas y Difusores

2.2 Modelos de descarga monofásica de gas

En esta sección se estudian los diversos modelos matemáticos que describen la descarga monofásica y crítica de gases en tuberías rotas.

2.2.1 Modelo de parámetros concentrados

Este modelo desprecia los efectos debidos a la fricción y al flujo a lo largo de la tubería principal y por esto, supone que las condiciones de estancamiento prevalecen dentro de toda la sección sometida a la descarga. Este modelo es conocido como el Modelo de Volumen /19/. Se considera dentro de la tubería, expansión isotérmica del gas y flujo isentrópico a través de la ruptura.

La ecuación de conservación de masa se puede escribir de la siguiente forma

$$G dt = -V d\rho \quad (2.39)$$

La ecuación de estado para gases tiene la forma

$$\rho = \rho(P, T) \quad (2.40)$$

A continuación se describe el método de solución a las ecuaciones anteriores.

Método de Solución Analítica.

La solución analítica puede ser obtenida solamente para un gas ideal. Para descarga isotérmica, la ec.(2.40) queda

$$d\rho = \frac{dP}{RT} \quad (2.41)$$

y entonces la ec. (2.39) puede ser transformada en

$$G \cdot R \cdot dt = -V \cdot dP \quad (2.42)$$

Para flujo sónico en la boquilla de la válvula y asumiendo expansión isentrópica desde las condiciones de estancamiento de la tubería, la variación de flujo másico se calcula /19/:

$$G_c = \left[\frac{2}{k+1} \right]^{\frac{k+1}{2(k-1)}} \left[\frac{k}{RT} \right]^{0.5} \cdot P \cdot A_{th} \cdot C_d \quad (2.43)$$

donde el coeficiente de descarga C_d depende del tipo de válvula.

La constante del tiempo τ_v se define como:

$$\tau_v = \frac{V \cdot \left[\frac{k+1}{2} \right]^{\frac{k+1}{2(k-1)}}}{c \cdot A_{th} \cdot C_d} \quad (2.44)$$

donde c es la velocidad del sonido $c = \sqrt{kRT}$. Introduciendo las ecuaciones (2.43) y (2.44) en la ecuación original (2.42) obtenemos la ecuación diferencial normalizada:

$$d\bar{t}_c = -\frac{d\bar{P}}{\bar{P}} \quad (2.45)$$

donde la presión normalizada $\bar{P} = \frac{P}{P_a}$, donde P_a es la presión ambiente y el tiempo $\bar{t} = \frac{t}{\tau_v}$.

Integrando desde la presión inicial \bar{P}_i hasta la presión \bar{P}_c , fin de la etapa sónica, obtenemos que el tiempo de descarga en la etapa sónica es:

$$\bar{t}_c = \ln \bar{P}_i - \ln \bar{P}_c \quad (2.46)$$

o tomando en cuenta que

$$P_c = \left[\frac{k+1}{2} \right]^{\frac{k}{k-1}} \quad (2.47)$$

entonces, el tiempo adimensional para una descarga sónica puede escribirse como:

$$\bar{t}_c = \ln \bar{P}_i - \left[\frac{k}{k-1} \right] \cdot \ln \left[\frac{k+1}{2} \right] \quad (2.48)$$

Generalmente, la presión durante una descarga sónica se puede determinar, de la ec. (2.46), como:

$$\frac{P}{P_i} = e^{(-\bar{t})} \quad (2.49)$$

donde $0 < \bar{t} < \bar{t}_c$. Esto indica que la caída de presión dentro de la tubería principal ocurre en forma exponencial durante una descarga sónica.

Después de la etapa sónica, se presenta una descarga subsónica en donde la presión crítica del flujo, correspondiente a la línea de presión de estancamiento, es menor que la presión ambiente P_a .

2.2.2 Modelo Unidimensional (Pipe Model)

Este modelo toma en cuenta las pérdidas por fricción a lo largo de la tubería principal de la descarga. Las otras consideraciones son iguales a las empleadas en el modelo de un nodo, v.g. expansión isotérmica del gas dentro de la tubería principal y expansión isentrópica a través del orificio de ruptura. Este modelo también fue desarrollado por Botros y Jungowsky /19/.

El flujo unidimensional a lo largo de la tubería está descrito por la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} = 0 \quad (2.50)$$

la ecuación de cantidad de movimiento

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{f u^2}{2D} = 0 \quad (2.51)$$

y la ecuación de estado, ecuación (2.40).

Solución Analítica del Modelo Unidimensional.

Al igual que en la solución analítica anterior, solamente es posible obtener una solución aproximada empleando la ley de gas ideal, $P = \rho RT$. Introduciendo el flujo de gas $Q = \rho u$

$$\frac{f u^2}{2D} = \left(\frac{f u}{2D} \right)_{av} \cdot u = a \cdot u \quad (2.52)$$

donde a es el factor de atenuación, y omitiendo los términos inerciales de la ec. (2.51) resulta en la siguiente ecuación modificada de continuidad:

$$\left(\frac{1}{RT} \right) \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad (2.53)$$

y la de la cantidad de movimiento:

$$\frac{\partial P}{\partial x} + aQ = 0 \quad (2.54)$$

Derivando la ec. (2.54) con respecto a x y empleando la ecuación (2.53) obtenemos:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} \quad (2.55)$$

donde

$$\kappa = \frac{R \cdot T}{a} \quad (2.56)$$

La ecuación diferencial parcial, (2.55), que describe un flujo con pequeñas variaciones de la velocidad dentro de la tubería, es lineal, parabólico y de segundo orden y es conocida como la ecuación unidimensional de conducción de calor /32/. Esta ecuación se puede resolver una vez especificadas las condiciones inicial y de frontera para la tubería en estudio. En el extremo intacto, $x=0$, $Q=0$ prevalece para cualquier tiempo y entonces de la ecuación (2.54), $\partial P / \partial x = 0$. En el extremo de la ruptura, $x=L$, y durante la descarga sónica el flujo de gas es proporcional a la presión en la tubería, por ejemplo $Q = E P$ (véase la ec. (2.43)) donde E es una constante. Al inicio de la descarga la presión dentro de toda la tubería es igual a P_1 , estableciéndose así la condición inicial.

Para resolver este problema de valor de la frontera, se empleó el método de separación de variables /32/ y la solución a la ecuación (2.55) es:

$$P(x,t) = [A \cos(\lambda x) + B \sin(\lambda x)] \exp(-\kappa \lambda^2 t) \quad (2.57)$$

Derivando la ecuación (2.57), e introduciendo la condición de frontera en $x=0$ resulta que $B=0$ y por tanto

$$P(x,t) = A \cdot \cos(\lambda x) \cdot \exp(-\kappa \cdot \lambda^2 \cdot t) \quad (2.58)$$

La condición de frontera en $x = L$ se obtiene de la ecuación (2.54):

$$\frac{\partial P(L,t)}{\partial x} + a E P(L,t) = 0 \quad (2.59)$$

Después de introducir la ecuación (2.58) obtenemos que

$$\alpha \tan(\alpha) = a E L \quad (2.60)$$

Las condiciones de frontera serán satisfechas sólo si dicha solución puede ser desarrollada en una serie infinita como:

$$\frac{P(x,t)}{P_1} = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cdot \cos\left(\frac{\alpha_n x}{L}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\kappa \lambda^2}{L^2}\right) \quad (2.61)$$

Los coeficientes A_n se pueden calcular de la relación

$$A_n = \frac{\int_0^L \cos\left(\alpha_n \frac{x}{L}\right) \cdot dx}{\int_0^L \cos^2\left(\alpha_n \frac{x}{L}\right) \cdot dx} \quad (2.62)$$

y después de integrarla tenemos

$$A_n = \frac{4 \cdot \text{sen} \alpha_n}{2 \alpha_n + \text{sen} 2 \alpha_n} \quad (2.63)$$

De la tabla 1 del Apéndice IV en el libro de Carslaw y Jaeger [32] se observa que para una $a E L < 0.1$ la segunda raíz α_2 de la ec. (2.63) es diez veces mayor que la primer raíz α_1 y por esto la serie converge rápidamente. Dentro de éste intervalo A_1 es casi la unidad ($A_1 = 1.016$ para $a E L = 0.1$). Si $a E L$ decrece, el coeficiente A_1 tiende a la unidad y los últimos coeficientes A_n tienden a cero. De acuerdo con la ec. (2.61) para $x = 0$ y $t = 0$ la relación de las presiones esta dada simplemente por la suma de los coeficientes A_n . Debido a que simplemente se toma en cuenta el primer término, existe un error asociado del 1.6%. Pero, mientras más transcurre el tiempo t , esta función converge mejor debido a que el segundo y subsecuentes coeficientes son cada vez menores que el primer coeficiente A_1 . De ahí que para el cálculo de la caída de presión, en el tiempo, durante una descarga es suficiente emplear el primer término de la ec. (2.61), por lo que para $x = 0$ tenemos

$$\frac{P}{P_1} = \exp\left(\frac{-\kappa \alpha_1^2 t}{L^2}\right) \quad (2.64)$$

Normalizando el tiempo t con la constante τ_p , donde

$$\tau_p = \frac{L^2}{\kappa \alpha_1^2} \quad (2.65)$$

podemos obtener una expresión exponencial idéntica a la ec. (2.49):

$$\frac{P}{P_i} = \exp(\bar{t}) \quad (2.66)$$

pero que contiene una normalización de la constante del tiempo τ_p distinta.

Nótese que de las ecuaciones (2.44), (2.56), (2.60) y (2.65), $\lim_{\alpha \rightarrow 0} \tau_p = \tau_v$, y que para $\alpha > 0, \tau_p > \tau_v$, indicando que el factor de atenuación de fricción, dentro de la tubería principal, tiende a incrementar el tiempo de descarga.

El tiempo normalizado para la descarga sónica se puede calcular introduciendo la ec. (2.48), y por tanto el tiempo t_c será:

$$t_c = \bar{t}_c \cdot \tau_p \quad (2.67)$$

2.2.3 Modelo de ruptura total (Full-bore rupture Model)

En el caso de una ruptura total de la tubería el gasto y, consecuentemente, la velocidad de flujo a la salida son altos, por lo que la linearización de las ecuaciones descrita anteriormente no es posible. Por lo anterior, el modelo desarrollado por Richardson (Full-bore rupture Model) /19/ fue empleado para este caso.

Se consideró una despresurización de una línea de diámetro D y longitud L , en donde un extremo de ésta permanece intacto mientras que en el otro se encuentra un orificio con un diámetro equivalente d . El parámetro α se define como:

$$\alpha = \frac{d^2}{D^2} \quad (2.68)$$

Sabiendo que, $\alpha = 1$ para una ruptura completa y que $\alpha \leq 1$ en general.

Dentro de la línea se cuenta con un gas perfecto con una relación de calores específicos γ y un peso molecular m ; la constante universal del gas es R . La rugosidad, en escala de longitudes, de la línea es ϵ ; el flujo en la línea se asume, en cualquier instante, totalmente turbulento por lo que el factor de fricción f es aproximadamente constante y puede ser determinado por la relación de rugosidad ϵ/D (típicamente, $0.003 < f < 0.004$). La presión y temperatura iniciales del gas en la línea son P_0 y T_0 , respectivamente.

La descarga del gas esta dividida en tres etapas.

Etapas:
 Etapa 1. Movimiento de una onda de expansión desde el extremo de la ruptura hacia el extremo intacto. El flujo es crítico en el extremo roto. La presión en el extremo intacto no cambia.

Etapa 2. El flujo desde la línea es crítico, cuasi-estático y con fricción.

Una vez que la onda de expansión ha alcanzado el extremo intacto, la presión en éste punto comienza a caer. El flujo continúa siendo crítico en el extremo roto. La mayor contribución de la caída de presión en la línea es debida a la fricción del fluido en la pared del tubo.

Etapa 3. El flujo desde la línea es subcrítico, cuasi-estático y con fricción.

La caída de presión llega hasta un punto en donde el flujo desde la línea deja de ser crítico. Al igual que la anterior etapa, la mayor contribución de la caída de presión se debe a la fricción del fluido sobre la pared.

El modelo analítico:

Etapa 1.

Una onda de expansión se mueve a la velocidad del sonido y entonces alcanza al extremo intacto de la línea en un tiempo $t = t_1$ dado por:

$$t_1 = \frac{L}{\left[\frac{\gamma R T_o}{m} \right]^{0.5}} \quad (2.69)$$

asumiendo que la ruptura se inicia a partir de $t = 0$. Se puede demostrar que, para una ruptura completa ($\alpha = 1$), el flujo másico F de gas que escapa de la línea en el tiempo t depende de la masa inicial contenida en la línea M_o de la siguiente manera:

$$F = \frac{\frac{M_o}{L} \left[\frac{R T_o}{m} \right]^{0.5}}{\left[\frac{1 \left[\frac{\gamma + 1}{2} \right]^{\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}} + \frac{4 f L t}{D t_1}}{\gamma} \right]^{0.5}} \quad (2.70)$$

Etapa 2.

Si el flujo en la línea se asume isotérmico, cuasi-estático y unidimensional, se pueden resolver las ecuaciones estándares que describen la dinámica del gas a través de una ruptura completa.

Igualando esta solución con la obtenida en la primera etapa obtenemos que:

$$F = \frac{3 M_o}{2 L} \left[\frac{R T_o D}{4 m f L} \right]^{0.5} \exp \left(\frac{3}{2} \cdot \left(\frac{R T_o D}{4 m f L} \right)^{0.5} \cdot \frac{(t - t_1)}{L} \right) \quad (2.71)$$

$$M = M_o \exp \left(\frac{3}{2} \cdot \left(\frac{R T_o D}{4 m f L} \right)^{0.5} \cdot \frac{(t - t_1)}{L} \right) \quad (2.72)$$

$$P_i = P_o \exp\left(\frac{3}{2} \cdot \left(\frac{RT_o D}{4mfL}\right)^{0.5} \cdot \frac{(t-t_1)}{L}\right) \quad (2.73)$$

donde M es la masa de gas contenida en la línea y P_i es la presión en el extremo intacto de la línea. El flujo permanece crítico dado que la presión en el extremo de la ruptura excede la presión atmosférica P_a . El flujo deja de ser crítico en el instante que $t = t_2$, por lo que

$$t_2 = t_1 + \frac{2}{3} L \left[\frac{4mfL}{RT_o D} \right]^{0.5} \ln\left(\frac{P_o}{P_a} \left[\frac{D}{4fL} \right]^{0.5}\right) \quad (2.74)$$

Análogamente, aunque más complicado, se pueden encontrar expresiones que describan el flujo a través de orificios menores.

El análisis realizado para la segunda etapa puede ser empleado para la tercera y última, en donde el flujo deja de ser crítico, para pasar a subsónico. Esta consideración es válida debido a que el volumen contenido en la línea, para éste instante, es pequeño, por lo que el error obtenido en la simulación también es casi imperceptible.

2.2.4 Comparación de los modelos de descarga monofásica

Se realizó la simulación de una descarga similar a la reportada por Botros y Jungowsky /19/. Las características del sistema simulado se presentan en la figura 2.3.

Tabla 2.1 Características geométricas del sistema

D_p	D_s	L_{s1}	L_{s2}	L	A_{th}
0.203 m	0.097 m	1.3 m	0.7 m	25,523 m	0.00548 m ²

Tabla 2.2 Composición del Gas @ P=20 bar; T= 302K

k	c	T
1.298	420 m/s	320 K

Las condiciones iniciales del flujo son: $P_i = 40.89$ bar, $T_i = 302$ K. Los resultados, tanto experimentales/19/ como los obtenidos con los modelos de parámetros concentrados y unidimensional, se muestran a continuación en la figura 2.4.

Para las predicciones de la descarga mediante dichos modelos /19/, se observó que el coeficiente de descarga C_d era de aproximadamente 0.75, ya que éste era el que mejor se ajustaba a dicha descarga.

De la fig. 2.4 se ve la gran discrepancia existente entre los datos experimentales y las predicciones del modelo de un nodo en la estimación de perfil $p-t$. Esto se explica como sigue: para un gran valor de fL/D , el modelo físico, que no toma en cuenta la fricción, no puede describir correctamente la expansión del gas en la tubería.

Para el modelo unidimensional se emplearon seis términos de la serie-solución con la finalidad de obtener una mejor aproximación al fenómeno dentro de los primeros instantes de tiempo. Se observa que el modelo unidimensional muestra un gran acuerdo con los datos experimentales.

La comparación de las predicciones hechas por los dos modelos indica que la fricción ejerce una gran influencia sobre el flujo de la descarga, de una tubería larga. Los parámetros que caracterizan a la fricción en la tubería son f , L y D . Para estimar la influencia de la fricción sobre el tiempo de la descarga una serie de cálculos fueron realizados. De la fig.2.5 se observa que durante la descarga de tuberías cortas ($fL/D < 100$) la fricción puede ser despreciada: los dos modelos predicen el mismo tiempo de la descarga. Para tuberías con un mayor valor de fL/D , la fricción tiene que ser tomada en cuenta.

En la figura 2.6 se muestra la distribución de la presión normalizada a lo largo de la tubería, para los instantes de 10, 100 y 1000 segundos. Para el instante de 10 s, se pueden ver algunas pequeñas irregularidades, anteriores a la zona de ruptura. Dichas irregularidades se deben a que la solución al problema es una serie aproximada, mas no una solución exacta. Empero, estas irregularidades tienden a desaparecer conforme transcurre el tiempo. El extremo intacto inicialmente no está afectado por la descarga. La notable caída de presión en este extremo comienza después de 100s del proceso.

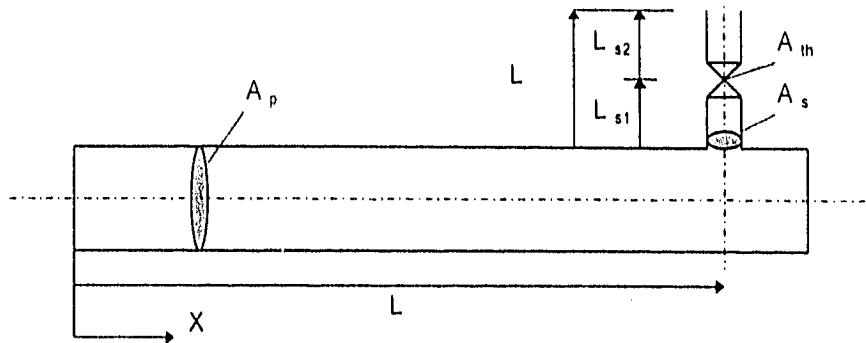


Fig. 2.3 Esquema de la sección de la descarga (experimentos).

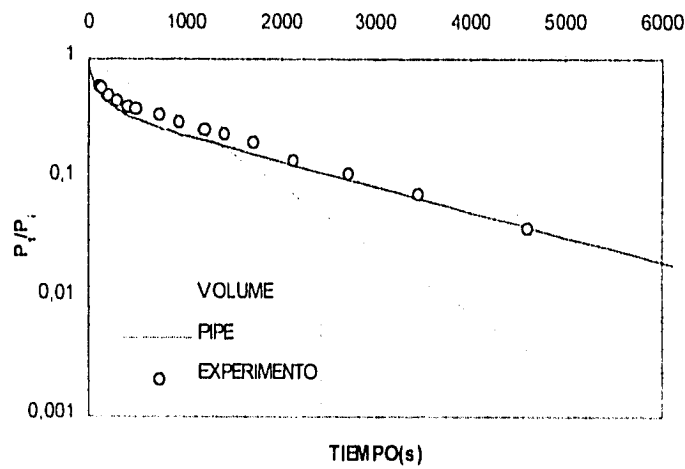


Fig.2.4 Descarga monofásica y transitoria de gas natural debida a una ruptura de una tubería de 25,523 m de longitud.

(Modelos de Volumen, Tubería y datos experimentales)

($P_i=40.89$ bar; $T_i=302$ K; $D_{tubería}=0.203$ m; $D_{secundario}=0.097$ m, $A_{th}=0.00548$ m²; $L_{s1}=1.3$ m
Composición del gas: $k=1.298$ a $P=20$ bar, $T=302$ K, $c=420$ m/s a $P=20$ bar; $T=302$ K

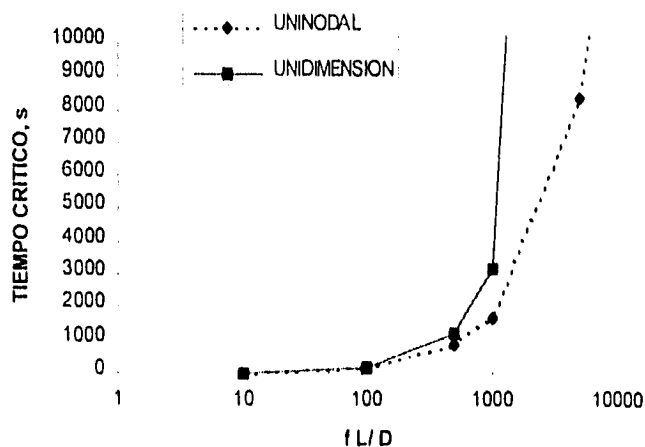


Fig.2.5 Simulación numérica de una descarga de flujo monofásico y transitorio de gas natural debido a una ruptura de una línea de 1 km. de longitud

Condiciones: $P_i=40.89$ bar; $T_i=302$ K; $D_{tubería}=0.203$ m; $D_{sección}=0.097$ m
 $Area_{th}=0.00548$ m²; $L_{S1}=1.3$ m; $L_{pipe}=1$ km.

Composición del gas (Tabla 2): $k=1.298$ a $P=20$ bar, $T=302$ K, $c=420$ m/s a $P=20$ bar; $T=302$ K

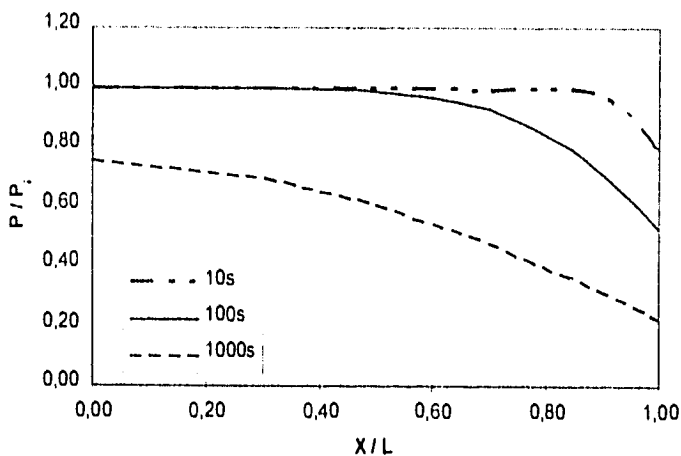


Fig. 2.6 Distribución de presiones, según el modelo de unidimensional (PIPE), dentro de una tubería de conducción para una descarga monofásica y transitoria de gas natural debido a una ruptura en ésta (L=25,523 m).

($P_i=40.89$ bar; $T_i=302$ K; $D_{tubería}=0.203$ m; $D_{secundario}=0.097$ m, $A_{th}=0.00548$ m²; $L_{S1}=1.3$ m
 Composición del gas: $k=1.298$ a $P=20$ bar, $T=302$ K, $c=420$ m/s a $P=20$ bar; $T=302$ K

2.3 Descarga de Flujo Bifásico.

2.3.1 Modelo de descarga de flujo bifásico transitorio

Una predicción exacta del proceso de descarga bifásica requiere de modelos matemáticos que permitan describir: a) la dinámica del flujo en la línea; b) el flujo crítico y subcrítico generado en el extremo de la ruptura; c) la transferencia de calor existente entre el fluido y la pared de la tubería. El modelo desarrollado por Fairuzov /43/ consta de tres partes. La primera es un modelo de flujo bifásico transitorio, el cual se basa en el modelo de equilibrio homogéneo. La segunda parte consiste de un modelo de expansión isentrópica (Starkman et al., 1965) el cual calcula la variación del flujo en el extremo roto. Y finalmente, la tercer parte consiste de un modelo térmico el cual simula la transferencia de calor existente entre la tubería, el flujo, y alrededores.

2.3.1.1 Modelo de Flujo Bifásico.

El método de parámetros concentrados fue aplicado para la simulación del flujo transitorio en la tubería. La tubería fue modelada como una red hidráulica de nodos y conectores. En los nodos se conserva la masa y energía. Los conectores intercambian masa entre los nodos de acuerdo con la ley de conservación de la cantidad de movimiento. Una descripción mas detallada del método de parámetros concentrados puede ser encontrada en /9/. Se asumió que ambas fases se encuentran en equilibrio mecánico y térmico durante todo el proceso de la descarga. La discretización de la tubería se muestra en la Figura 2.7.

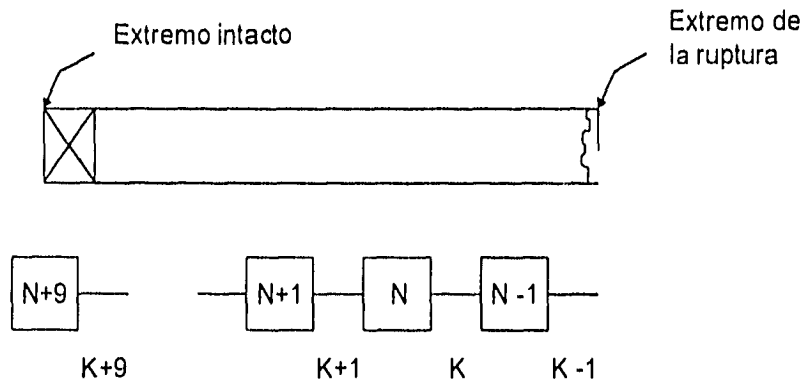


Fig. 2.7 Discretización de la tubería empleada en el modelo bifásico.
(donde N son los nodos y K los conectores)

Las estimaciones indicaron que durante la descarga la temperatura de flujo disminuye decenas de grados Kelvin, con respecto a la temperatura inicial debido al proceso de evaporación del líquido. En la mayoría de artículos publicados hasta el momento sobre el tema en cuestión, el flujo se considera adiabático sin tomar en cuenta la capacidad térmica de las paredes de la tubería. Sin embargo, el enfriamiento de una tubería de conducción con un espesor típico de 15mm o mayor, puede afectar a las características de la descarga de líquido. Con el propósito de estudiar la influencia del enfriamiento de la tubería en la descarga, la capacidad térmica de las paredes de la tubería fue tomada en cuenta en el modelo general de la descarga.

Debido a los altos valores de los coeficientes de transferencia de calor entre el flujo bifásico y la pared, y a la alta conductividad del acero, el tiempo característico del proceso de enfriamiento de la pared de tubería, es de dos ordenes de magnitud menor que el tiempo característico del proceso de la descarga de fluido. Por esto se asumió que la tubería está en equilibrio térmico con el fluido adyacente a la pared. El tiempo característico de enfriamiento de la pared fue estimado empleando las gráficas Heisler y Grober /26,27/.

Las ecuaciones de conservación para un flujo bifásico transitorio en una tubería, pueden ser escritas de la siguiente manera:

Ecuación de conservación de masa (para el nodo n)

$$\frac{d M_n}{d t} = \dot{m}_{k+1} - \dot{m}_k \quad (2.75)$$

Ecuación de cantidad de movimiento (para el conector k)

$$\frac{d \dot{m}_n}{d t} = \frac{A}{L_k} (P_n - P_{n-1} - \Delta P_f - \Delta P_a) \quad (2.76)$$

donde: $L_k = \frac{l_n + l_{n+1}}{2}$; $\Delta P_{f,k}$ es la caída de presión debida a fricción; $\Delta P_{m,k}$ es la caída de presión debido al cambio de cantidad de movimiento.

Ecuación de la energía (para el nodo n)

$$\frac{d U_n}{d t} = \dot{m}_{k+1} \cdot h_{n+1} - \dot{m}_k \cdot h_n + Q_n \quad (2.77)$$

donde: $U_n = U_{m,n} + U_{u,n}$

2.3.1.2 Modelo de expansión isentrópica homogénea

Este modelo de expansión isentrópica se basa en las siguientes suposiciones:

- Las velocidades de las dos fases son iguales.
- Existe equilibrio térmico entre las fases.
- La expansión es isentrópica.
- Los cálculos en las propiedades se realizaron para un sistema bifásico en equilibrio, estático y con interfaces planas.

Despreciando la velocidad inicial, la velocidad del fluido se puede determinar, en cualquier sección como:

$$V = [2 (h_n - h)]^{1/2} \quad (2.78)$$

el flujo por unidad de área, empleando la ecuación de continuidad, es

$$G = \frac{\dot{m}}{A} = \frac{V}{v} \quad (2.79)$$

y el volumen específico se puede calcular

$$v = xv_k + (1-x)v_f \quad (2.80)$$

Debido a que es un proceso isentrópico, la calidad del vapor se puede calcular,

$$x = \frac{s_u - s_f}{s_{fg}} \quad (2.81)$$

y entonces la entalpia para el nuevo estado termodinámico, a la presión P , queda

$$h = h_f + x h_{fg} \quad (2.82)$$

por lo que finalmente la velocidad másica se calcula de la siguiente manera

$$G = \frac{\sqrt{2(h_u - h)}}{v_f + xv_{fg}} \quad (2.83)$$

La presión que corresponde a el valor máximo de G fue adoptado como crítico.

Si la presión crítica calculada era mayor que la presión atmosférica el flujo se consideraba crítico y el gasto másico crítico fue especificado en el extremo roto. En el caso contrario la descarga se considerada como subsónica y el gasto másico se calculaba con la ec.(2.83) suponiendo una expansión isentrópica de flujo en la salida hasta la presión atmosférica.

2.3.1.3 Modelo Térmico

La transferencia de calor existente entre el flujo en la línea y sus fronteras, puede ser descrita mediante el modelo térmico de tubería y las correlaciones de transferencia de calor debida a convección.

La aproximación mediante parámetros concentrados no puede ser empleada en el modelo térmico transitorio de la línea, debido a que el número de Biot calculado para una línea típica que conduce hidrocarburo excede a 0.1. Fairuzov, et al. (1996), desarrolló un modelo térmico el cual realiza las siguientes suposiciones:

- a) La temperatura de la pared de la tubería responde instantáneamente a cambios en la temperatura del fluido.
- b) El fluido y la pared de la tubería permanecen en equilibrio térmico.

La pared de la tubería es dividida en un número de secciones isotérmicas, como las mostradas en la figura 2.5. Cada segmento de tubería tiene la misma temperatura que la del nodo adyacente. La transferencia de calor por conducción en la dirección axial se desprecia, debido a que los gradientes térmicos en la dirección axial son mínimos comparados con los radiales. Tomando en cuenta las anteriores consideraciones, la ecuación de conservación de la

energía para un volumen de control que contiene un nodo y un segmento de tubería puede ser escrita como:

$$\frac{d(U_{f,n} + U_{w,n})}{dt} = \dot{m}_{k+1} \cdot h_{n+1} - \dot{m}_k \cdot h_n + Q_n \quad (2.84)$$

Para obtener un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en una forma estándar, la ecuación de energía para nodo n Ec.(2.76) se reescribió de la siguiente forma

$$\frac{dP}{dt} = \frac{\left(\frac{h_{fg}}{T v_{fg}} \right)_n \left[\dot{m}_{k+1} h_{n+1} - \dot{m}_k h_n - u_n (\dot{m}_{k+1} - \dot{m}_k) + \left(\frac{u_{fg} v}{v_{fg}} \right)_n A \right]}{\left[1 - \left(\frac{u_{fg} B}{v_{fg} C} \right)_n \right] (MC)_n} \quad (2.85)$$

donde $B = \frac{dv_f}{dT} + x \frac{dv_{fg}}{dT}$; $C = \frac{du_f}{dT} + x \frac{du_{fg}}{dT} + \frac{\rho_w A_w \delta L_n c}{M}$

El número total de ecuaciones es igual a

$$N_{tot} = 2 \cdot N + K \quad (2.86)$$

donde N es el número de nodos y K es el número de conectores.

El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias resultante fué resuelto con respecto a M_n , p_n y m_k .

Las propiedades de líquido y vapor saturados se calcularon empleando relaciones descritas en el capítulo 4 del presente reporte.

La calidad fue determinada por la relación

$$x_n = \left(\frac{v_m - v_f}{v_g - v_f} \right)_n \quad (2.87)$$

donde $v_m = \frac{A L_n}{M}$.

En el extremo roto, el flujo saliente es función de los siguiente factores

$$G_{out} = G(P_1, x_1, P_a) \quad (2.88)$$

La ec.(2.88) representa una relación general para flujo bifásico compresible en ausencia de los efectos disipativos. Inicialmente la presión en el extremo roto P_1 excede la presión del medio ambiente, por un margen suficiente de tal manera que las condiciones de flujo crítico prevalecen. El procedimiento de cálculo de flujo crítico está descrito en punto (2.3.2) de la presente tesis. Cuando la presión P_1 disminuye suficientemente el flujo subsónico se calcula automáticamente.

En el extremo intacto, o bien la presión o el gasto másico pueden ser especificados como una condición de la frontera. Las derivadas de la ecuación (2.85) son evaluadas a lo largo de la línea de saturación, para un proceso de evaporación instantánea (flasheo).

La formulación puede ser expandida para cualquier número de nodos. También se empleó un espaciado nodal logarítmico, siendo éste cada vez menor conforme nos acercamos al punto de la descarga. El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias y no-lineales anteriormente descrito, se resolvió empleando el método de GEAR [29].

2.3.2 Resultados de la simulación

Se simuló la descarga de una línea de transporte de propano. Las condiciones del problema se indican en la Tabla 2.2 y Tabla 2.3

Tabla 2.2 Dimensiones de la línea de conducción simulada

Nº Problema	Longitud de la tubería	Diámetro	Volumen
2	30 km.	0.287 m	2342 m ³

Tabla 2.3 Fluido y condiciones iniciales

Fluido	Presión	Temperatura
Propano	0.85 Mpa	294.4 K

Los resultados de la simulación se muestran en las figuras 2.8 y 2.9.

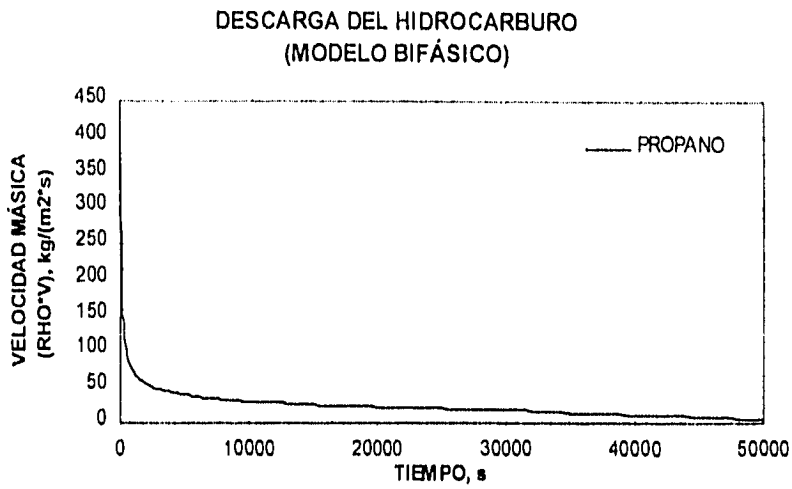


Fig. 2.8 Velocidad másica de la descarga de propano utilizando el modelo de flujo bifásico /43/

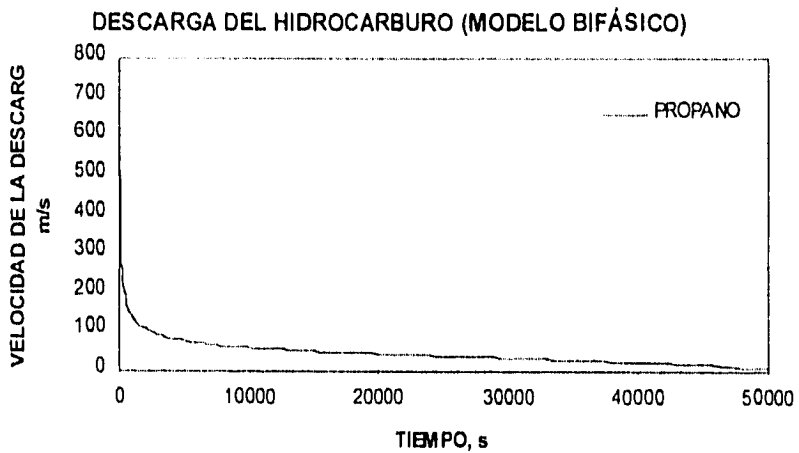


Fig. 2.9 Velocidad de la descarga de propano utilizando el modelo de flujo bifásico /43/

3. MODELADO DE LA DISPERSIÓN DEL GAS FUGADO

3.1 Fundamentos Teóricos

Antes de empezar a modelar la evolución y dispersión de gases en la atmósfera, es importante estudiar las condiciones predominantes dentro de la parte baja de ésta.

3.1.1 Meteorología

La Meteorología es la ciencia encargada del estudio de la dinámica de la atmósfera y, dependiendo de la escala del movimiento en estudio, puede ser clasificada como sigue:

1. *Meteorología de Macroescala.* Es aquella dedicada a los fenómenos que ocurren en la escala de los miles de kilómetros, tales como las áreas semipermanentes de alta y baja presión que residen sobre los océanos y continentes.

2. *Meteorología de Mesoescala.* Es la encargada del estudio de los fenómenos que ocurren en la escala de los cientos de kilómetros, tales como las brisas terrestre-marina, vientos de la montaña, y frentes migratorios de alta y baja presión.

3. *Meteorología de Microescala.* Es aquella que se encarga de los fenómenos que ocurren dentro del orden de 1 km, tales como la trayectoria y dispersión de una pluma de una chimenea.

Para el presente estudio, la zona del interés se enfoca dentro de ésta última escala.

Cada uno de las anteriores escalas de movimiento juegan un papel importante en la dispersión de contaminantes en el aire, aunque en diferentes periodos de tiempo.

En la parte baja de la atmósfera existe una región, primeros 500 m, gobernada por el transporte y la dispersión llamada capa límite planetaria. Dicha capa límite manifiesta la gran influencia de la superficie terrestre sobre la estructura del viento dentro de la atmósfera. Dentro de la capa límite planetaria, los vientos se encuentran influenciados por los grandes flujos y la fuerza de arrastre ejercida sobre la superficie.

El perfil de temperatura (la variación de la temperatura con la altitud) ejerce una importante influencia sobre la estructura y turbulencia del viento dentro de los primeros 500 m de altura. En la tropósfera, la temperatura normalmente decrece a medida que incrementamos la altura, esto debido al decaimiento de la presión con la altura. Este gradiente de temperatura en la atmósfera baja varía dependiendo del calentamiento de la superficie terrestre.

La difusión turbulenta es el fenómeno de principal interés durante la predicción de la dispersión de los contaminantes. El término de difusión es mal empleado, debido a que la dispersión no se debe realmente al fenómeno de difusión como una colisión de las partículas, sino al movimiento irregular de vórtices macroscópicos dentro de la turbulencia. Ya que las escalas de longitud de la difusión turbulenta son menores que las de dichos vórtices, esta última puede ser despreciada. De ahí que la turbulencia se deba tanto a las fuerzas mecánicas (estruenzos, inerción superficial) y térmicas (flotabilidad).

Los perfiles de temperatura de la parte baja de la atmósfera determinan, en parte, la estabilidad de la atmósfera, es decir, el grado al cual la turbulencia inducida (por el viento, la rugosidad superficial, o la flotabilidad) se propagará a lo largo de la capa límite planetaria.

3.1.2 Temperatura en la atmósfera baja

Las capas de la atmósfera pueden ser clasificadas de distintas maneras, dependiendo su temperatura, densidad y composición química. Desde el punto de vista de dispersión de contaminantes, la clasificación más importante es la de la temperatura, que a continuación se describe.

1. *Tropósfera*. Es la capa más cercana a la tierra y se extiende hasta los 15 km. de altura en el ecuador, o bien hasta los 10 km. sobre los polos. La temperatura decrece con la altura a razón de 6.5 °C/km. La convección vertical mantiene el aire relativamente bien mezclada.

2. *Estratósfera*. Se extiende desde la tropopausa hasta casi unos 50 km. de altitud. La temperatura permanece constante durante la estratósfera baja y después se incrementa con la altitud, esto debido a la absorción de radiación de baja frecuencia por parte del ozono. En la estratopausa (parte alta de la estratósfera) la temperatura alcanza una temperatura de 270 K. Existe un pequeño mezclado vertical en la estratósfera.

3. *Mesósfera*. Se extiende desde los 50 hasta los 80 km. En ésta la temperatura decrece con la altura hasta alcanzar los 175 K. Es el punto más frío de la atmósfera.

4. *Termósfera*. Es la capa más lejana de la atmósfera. Las densidades moleculares son del orden de 10^{13} moléculas/cm³, mientras que a nivel del mar es de 2.5×10^{19} .

3.1.3 Relaciones de presión y temperatura en la atmósfera baja.

El aire puede ser considerado como un gas ideal, por lo que

$$p = \frac{\rho R T}{M_a} \quad (3.1)$$

donde M_a es la masa molecular del aire (28.97).

La presión en cualquier punto de altura z es hidrostática, por lo que el cambio de presión en la dirección vertical obedece a la relación:

$$\frac{dp(z)}{dz} = -\rho \cdot g \quad (3.2)$$

Sustituyendo la ecuación (3.1) en (3.2) tenemos que

$$\frac{dp(z)}{dz} = -\frac{g \cdot M_a \cdot p}{R \cdot T} \quad (3.3)$$

Si la temperatura permaneciera constante con la altura, la anterior ecuación puede ser integrada directamente, quedando

$$p(z) = p_0 \cdot e^{\left(-\frac{g \cdot M_a \cdot z}{R \cdot T}\right)} \quad (3.4)$$

donde p_0 es la presión a nivel suelo.

Antes de establecer una relación para la temperatura, es necesario definir el concepto de porción de aire. Una porción de aire es una masa hipotética de aire que puede deformarse mientras que ésta se mueve verticalmente dentro de la atmósfera. El concepto de porción de aire es posible, mientras ésta presente un tamaño en donde el intercambio de las moléculas de aire a través de su frontera sea pequeño, comparado con el número de moléculas totales dentro de la misma porción.

En la medida que dicha porción de aire se eleva en la atmósfera, sufre una expansión adiabática y una disminución de la temperatura. El proceso de mezclado vertical en la atmósfera puede, por simplicidad, ser visto como aquel que involucra a un gran número de porciones de aire ascendiendo, o bien descendiendo. Ya que no existe intercambio de calor entre la porción de aire y sus alrededores, ambos tendrán distintas temperaturas (pero no presiones). Por lo que la relación de la temperatura de la porción con la del aire a su alrededor, será la que determine si la porción de aire continuará elevándose o descendiendo, o bien, se mantendrá en un punto de equilibrio. De ahí la importancia del gradiente de temperatura.

Aplicando la primera ley de la termodinámica a una porción de aire cuyo volumen cambia, dependiendo si asciende o desciende en la atmósfera, tenemos que

$$dU = dQ - dW \quad (3.5)$$

donde la energía perdida en forma de trabajo se calcula como $p dV$, el cambio de energía interna está dado por $C_v dT$, y la transferencia de calor se desprecia (considerando un proceso adiabático).

De la ley de gas ideal tenemos que

$$d(pV) = \frac{m \cdot R \cdot dT}{M_a} \quad (3.6)$$

pero también sabemos que

$$d(pV) = p dV + V dp \quad (3.7)$$

Empleando lo anterior, la primera ley de la termodinámica se reduce a

$$\begin{aligned} C_v dT &= V dp - \frac{mR dT}{M_a} \\ &= \frac{mRT}{M_a} \frac{dp}{p} - \frac{mR dT}{M_a} \end{aligned} \quad (3.8)$$

reordenando

$$\frac{dT}{dT} = \frac{mRT / M_a p}{C_v + mR / M_a} \quad (3.9)$$

Combinando las ecuaciones (3.3) y (3.9) obtenemos que

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dz} &= -\frac{m g}{C_v + m R / M_u} \\ &= -\frac{g}{\hat{C}_v + R / M_u} \end{aligned} \quad (3.10)$$

donde \hat{C}_v es la capacidad térmica específica a volumen constante por unidad de masa. Entonces, la capacidad térmica específica a presión constante se puede escribir como

$$\hat{C}_v + R / M_u = \hat{C}_p \quad (3.11)$$

Esto da como resultado a que la variación de la temperatura con la altura para una porción de aire que se eleva adiabáticamente queda

$$\frac{dT}{dz} = -\frac{g}{\hat{C}_p} \quad (3.12)$$

Para el aire seco, la anterior razón de cambio es constante e igual a $1^\circ \text{C}/102.39 \text{ m}$ o bien, $0.976^\circ \text{C} / 100 \text{ m}$. A esta constante también se le conoce como la razón de cambio adiabática seca, y se denota con la letra Γ .

3.1.4 Temperatura Potencial

La relación existente entre la temperatura y presión de dos distintos puntos, situados a diferentes alturas de la atmósfera, puede obtenerse mediante la integración de la ecuación (3.9).

Empleando la relación de gas ideal $\hat{C}_v + R / M_u = \hat{C}_p$ y la definición de $\gamma = \hat{C}_p / \hat{C}_v$, el resultado de la anterior integral queda

$$\frac{T(z_2)}{T(z_1)} = \left[\frac{P(z_2)}{P(z_1)} \right]^{(\gamma-1)/\gamma} \quad (3.13)$$

Suponiendo que el punto z_1 se refiere a la superficie terrestre con una temperatura T , y el punto z_2 como cualquier otro punto dentro de la atmósfera, la temperatura de éste último punto, θ , será

$$\theta = T \left(\frac{p}{p_0} \right)^{(\gamma-1)/\gamma} \quad (3.14)$$

La temperatura θ es también denominada como la "temperatura potencial". Introducimos el concepto de temperatura potencial debido a que una atmósfera real rara vez presenta una condición adiabática, y se requiere comparar el perfil de temperatura real con el adiabático.

La interpretación que se le puede dar a la temperatura potencial es como sigue: el gradiente de θ con respecto a z que puede ser expresado en términos del gradiente absoluto de temperatura T y el gradiente adiabático de temperatura Γ .

De la ecuación (3.14) es fácil observar que

$$\frac{1}{\theta} \frac{d\theta}{dz} = \frac{1}{T} \frac{dT}{dz} - \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dz} = \frac{1}{T} \left(\frac{dT}{dz} + \Gamma \right) \quad (3.15)$$

En $z=0$, $\theta=T$, esto si la presión en la superficie es la atmosférica. Ya que θ es casi igual que T , en magnitud, la ecuación (3.15) se puede aproximar a

$$\frac{d\theta}{dz} \cong \frac{dT}{dz} + \Gamma \quad (3.16)$$

Integrando la anterior ecuación, (3.16), tenemos que

$$\theta \cong T + \Gamma z \quad (3.17)$$

3.1.5 Clasificación de la atmósfera baja (Estabilidad)

El movimiento vertical del aire depende en gran forma de la razón de cambio de la temperatura en la atmósfera baja. Si dicha tasa es la adiabática, una porción de aire desplazado verticalmente estará siempre en equilibrio con sus alrededores. Esta condición, en la que los desplazamientos verticales no son afectados por las fuerzas de flotación, es también llamada estabilidad neutra. Sin embargo, debido al calentamiento de la superficie y a la influencia del clima local, la atmósfera rara vez presenta un perfil de temperatura adiabático. La atmósfera puede ser

1. Inestable. Las fuerzas de flotación contribuyen al movimiento vertical.
2. Estable. Las fuerzas de flotación se oponen a dicho movimiento.

Suponiendo que una porción de aire caliente empieza a elevarse en una atmósfera en donde el perfil de temperatura es mayor que el adiabático, la porción de aire se enfría adiabáticamente, pero la diferencia de temperatura entre la porción que se eleva y sus alrededores se ve incrementada conforme asciende.

Si la densidad de la porción es ρ y la del aire ρ' , la aceleración que experimentará la porción será

$$\begin{aligned} \text{Aceleración} &= g \left(\frac{\rho' - \rho}{\rho} \right) \\ a &= g \left(\frac{T - T'}{T'} \right) \end{aligned} \quad (3.18)$$

Por lo que, la aceleración se incrementa conforme aumenta z y la porción continua elevándose tanto como $T > T'$. Expresando la aceleración en términos de las dos tasas de cambio, Γ y Λ , y si $\Gamma_u \cong \Gamma'_u$, la anterior expresión queda

$$\begin{aligned}
 \text{Aceleración} &= g \left(\frac{dT/dz - dT'/dz}{T'} \right) dz \\
 &= g \left(\frac{\Lambda - \Gamma}{T'} \right) dz
 \end{aligned}
 \tag{3.19}$$

Mientras se mantenga la condición de $\Lambda > \Gamma$, la porción continua elevándose. Lo mismo sucede con una porción de aire más frío que sus alrededores, el aire continuará descendiendo si la razón de calentamiento adiabático es menor que la de la atmósfera.

Debido a que el movimiento vertical es incrementado por la flotación, esto si $\Lambda > \Gamma$, éste tipo de atmósfera es clasificada como inestable. Las razones de cambio Λ para las cuales $\Lambda > \Gamma$ son llamadas tasa de cambio superadiabáticas.

Por otro lado, si $\Lambda < \Gamma$, la porción de aire elevándose se enfriará más rápidamente, con forme asciende, que el aire adyacente, y dicha porción alcanzará una altura hasta donde la temperatura de la porción de aire se iguala a la temperatura de su alrededor. Por lo que se observa que, si $\Lambda < \Gamma$, la aceleración se opondrá al movimiento de la porción de aire.

Por lo que cualquier fluctuación de la temperatura en la porción de aire causará una elevación o caída de la misma, pero solamente en una distancia corta. Cuando $\Lambda < \Gamma$, dice que la atmósfera presenta una estratificación estable.

Resumiendo lo anterior, la estratificación de la atmósfera será

- 1. Si $\Lambda = \Gamma$, Estabilidad neutra
- 2. Si $\Lambda > \Gamma$, Inestable (incremento de los movimiento verticales)
- 3. Si $\Lambda < \Gamma$, Estable (movimientos verticales suprimidos)

La figura 3.1 resume los tipos de perfiles de temperatura dentro de la atmósfera baja.

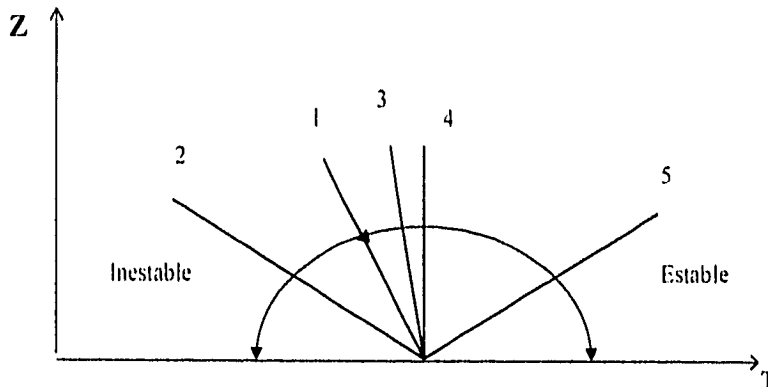


Figura 3.1 Perfiles de temperatura en la atmósfera

(1) Razón de cambio adiabática (estabilidad neutra, $1^\circ\text{C}/100\text{m}$): T decrece con la altura de tal manera que cualquier movimiento vertical provocado a una porción de aire resultará en el mantenimiento de las mismas temperatura y la densidad tanto en la porción como en el aire adyacente. (2) Superadiabática (inestable): La porción de aire elevándose con una temperatura mayor que su ambiente, por lo que ésta llega a tener una mayor flotación y continua elevándose. (3) Subadiabática (estable): La porción de aire es más fría que sus alrededores, lo que provoca una menor flotación y su descenso. (4) Isotérmica (estable): Temperatura constante con la altura (5) Inversión (extremadamente estable): La temperatura se incrementa conforme aumenta la altura.

3.2 Modelos semi-empíricos de elevación de la pluma

3.2.1 Ley "2/3"

El factor principal que influye en la concentración de las emisiones, a nivel suelo, es la elevación de la pluma (o bien elevación de emisiones gaseosas debidas a una fuente continua de emisiones).

Diversos modelos [21] se han desarrollado para la predicción de ésta, pero solamente uno muy simple ha podido realizar las mejores predicciones de la elevación de la pluma para una variedad de condiciones meteorológicas, la ley 2/3.

Se ha observado que cerca de la fuente emisora, a distancias típicas de entre tres y diez veces la altura de la fuente aguas abajo, la estabilidad atmosférica y la turbulencia presentan poca influencia sobre la elevación de la pluma. La pluma se eleva principalmente por la influencia de su cantidad de movimiento, flotación y mezcla de ésta con el aire. La pluma rápidamente gana cantidad de movimiento horizontal debida al viento. Esto provoca que la pluma se incline y eleve con un pequeño ángulo.

Simplificando un poco la teoría antes mencionada, se puede predecir adecuadamente la elevación de la pluma. Aquí la fuerza de flotación total en un segmento de la pluma permanece constante, el segmento de la pluma se mueve horizontalmente a una velocidad igual que la velocidad media del viento u , y el radio del segmento de la pluma crece en proporción directa con la altura del centro de la pluma, por encima de la fuente emisora z .

Briggs [21] propuso un modelo que calcula la elevación de la pluma empleando las anteriores simplificaciones. Dicho modelo predice que cerca a la fuente emisora, la elevación de una pluma flotante y térmica es proporcional al recíproco de la velocidad del viento, a la emisión de calor elevada a la un tercio, y a la distancia aguas abajo elevada a la dos tercios. Esto es:

$$\Delta h = 1.6 \frac{F^{1/3}}{u} x^{2/3} \quad (3.20)$$

donde Δh es la elevación sobre la fuente de emisión, u es la velocidad media del viento, x la distancia corriente abajo de la descarga, y F la emisión de calor en m^4/s^3 ($F = 3.8 \times 10^{-5} \cdot Q_H$; Q_H en cal/s).

Esta relación es mejor conocida como la ley "2/3" de la elevación de la pluma, debido a que ésta establece que la elevación es proporcional a la distancia corriente abajo, elevada a la dos tercios.

Dicha relación es una buena aproximación de la elevación de la pluma, haciendo caso omiso de las condiciones atmosféricas de estabilidad.

3.2.2 Elevación de la Pluma en una atmósfera estable

EL aire cercano a la superficie terrestre frecuentemente presenta una condición atmosférica estable, especialmente durante las noches despejadas, cuando la tierra transfiere calor, por radiación, hacia el espacio y enfría el aire cercano a ésta. La condición estable persiste hasta que el sol empieza a calentar a la tierra durante las mañanas. Las plumas a través de la atmósfera estable pueden perder su flotabilidad y nivelarse a una cierta altura por encima de la

fente emisora, o bien mantener su flotabilidad lo suficiente para elevarse hacia una atmósfera todavía mas neutra que la predominante en la parte cercana a la tierra.

La altura máxima alcanzada por la pluma, según la ley de "2/3", se puede determinar mediante la siguiente expresión

$$\Delta h = 2.9 \left(\frac{F}{u s} \right)^{1/3} \quad (3.21)$$

donde Δh es la elevación sobre la fuente de emisión, u es la velocidad media del viento, s la aceleración de flotación por unidad de desplazamiento vertical, y F la emisión de calor en m^4/s^3 ($F = 3.8 \times 10^{-5} \cdot Q_H$, Q_H en cal/s).

Dicha aceleración puede calcularse como:

$$s = \frac{g}{T} \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (3.22)$$

donde g es la aceleración de la gravedad, T la temperatura media absoluta del aire ambiente, y

$\frac{\partial \theta}{\partial z}$ el gradiente de la temperatura potencial en el aire ambiente ($\frac{\partial \theta}{\partial z} = \left(\frac{\partial T}{\partial z} \right) + 5.4^\circ F / 1000 \text{ ft}$).

En el supuesto caso de que el viento fuera muy ligero, la pluma se elevaría casi verticalmente, y el modelo de predicción de la máxima altura, anteriormente descrito, no sería apropiado.

Por lo que para la condición de viento ligero, Morton, Taylor y Turner desarrollaron un modelo de predicción de la elevación de una pluma en una atmósfera estable [21], el cual permite un buen acuerdo con resultados experimentales publicados.

Este modelo se muestra a continuación.

$$\Delta h = 5.0 \frac{F^{1/4}}{s^3} \quad (3.23)$$

donde F y s se calculan como se indicó anteriormente en la ley de "2/3".

3.2.3 Elevación de la pluma en una atmósfera neutra

Cuando la pluma se eleva a través de una atmósfera neutra, la fuerza de flotación resultante en un segmento de pluma inclinada permanece constante, mientras que la flotabilidad y la cantidad de movimiento se ven disminuidas conforme la pluma se mezcla con el aire ambiente.

Anteriormente se mencionó que en la región cercana a la fuente emisora, los efectos debidos a la turbulencia eran casi nulos; pero como la pluma crece y su radio aumenta, la turbulencia atmosférica llega a tener mayor influencia sobre el proceso de mezclado, hasta llegar a un punto en el que la turbulencia ejerce un mayor dominio sobre dicho proceso.

Esto dio paso a considerar una segunda etapa, donde la velocidad de mezclado es proporcional al radio de la pluma elevado a la un tercio, y a la razón de disipación de la energía ϵ : elevada a la un tercio.

Por lo que esta segunda etapa de la elevación de la pluma, dominada por la turbulencia en la atmósfera, comienza desde una distancia

$$x^* = 2.16 F^{2/3} h_g^5 \quad (3.24)$$

donde F está en m^4/s^3 , h_g y x^* en m.

La ley "2/3" es aplicable solamente hasta $x=x^*$, después es necesario emplear un modelo modificado.

$$\Delta h = 1.6 \frac{F^{1/3}}{u} x^{*2/3} \frac{\frac{2}{5} + \frac{16}{25} \frac{x}{x^*} + \frac{11}{5} \frac{x^2}{x^{*2}}}{\left(1 + \frac{4}{5} \frac{x}{x^*}\right)^2} \quad (3.25)$$

donde Δh es la elevación sobre la fuente de emisión, u es la velocidad media del viento, x la distancia corriente abajo de la descarga, x^* la distancia de inicio de la etapa turbulenta y F la emisión de calor en m^4/s^3 ($F = 3.8 \times 10^{-5} \cdot Q_H$; Q_H en cal/s).

3.3 Modelo Numérico

3.3.1 Formulación Matemática del problema

Las ecuaciones básicas que gobiernan la dispersión de gases en la atmósfera son: las de conservación de masa, cantidad de movimiento, energía y gas ideal, respectivamente.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u_i u_i + p \delta_{ii} - \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \right) = \rho g_i \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial (\rho \theta)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \theta u_i) = 0 \quad (3.28)$$

$$p = \rho R T \quad (3.29)$$

Donde ρ es la densidad, u_i la velocidad del componente i , p la presión, μ la viscosidad dinámica y g_i el componente i de la aceleración debida a la gravedad.

El movimiento del flujo turbulento es no-estacionario y muy irregular. Este movimiento consiste de movimientos en un amplio rango de longitudes y escalas. La solución exacta a las ecuaciones no es posible actualmente.

Para atacar este problema se empleó el enfoque del modelo de turbulencia. El movimiento general fue descompuesto en un movimiento promedio y uno de fluctuación, y las ecuaciones básicas fueron promediadas en un período de tiempo Δt , el cuál es largo, comparado con la escala de tiempo del movimiento turbulento.

Introduciendo la notación

$$u_i = \bar{u}_i + u_i' \quad (3.30)$$

$$\theta = \bar{\theta} + \theta' \quad (3.31)$$

$$p = \bar{p} + p' \quad (3.32)$$

$$\rho = \bar{\rho} + \rho' \quad (3.33)$$

donde la barra sobre la letra denota promediado en un período de tiempo, las ecuaciones de conservación promediadas pueden ser escritas de la siguiente forma:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \bar{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.34)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_j + \bar{p} \delta_{ij} - \mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \overline{\rho u_i' u_j'} \right) = \bar{\rho} g_i \quad (3.35)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{\theta})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \bar{\theta} \bar{u}_j + \bar{\rho} \overline{\theta' u_j'} \right) = 0 \quad (3.36)$$

$$p = \rho R T \quad (3.37)$$

Los esfuerzos de Reynolds están dados por:

$$-\bar{\rho} \overline{u_i' u_j'} = \bar{\rho} \nu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij} \quad (3.38)$$

y

$$-\bar{\rho} \overline{\theta' u_j'} = \bar{\rho} \Gamma_{T0} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x_j} \quad (3.39)$$

donde ν_t y Γ_{T0} son los coeficientes de intercambio turbulento; ν_t además es llamada como la viscosidad turbulenta; k es la energía cinética turbulenta y se define como:

$$k = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \overline{(u_i')^2} \quad (3.40)$$

La razón de disipación de la energía cinética turbulenta por unidad de tiempo se denota con la letra ε . En el modelo $\kappa - \varepsilon$ la viscosidad turbulenta se expresa como función de k y de una longitud característica L mediante la relación Prandtl-Kolmogorov:

$$v_t = C_\mu L \sqrt{k} \quad (3.41)$$

La razón de disipación de la energía cinética turbulenta también puede ser expresada como función de k y L , de la siguiente manera:

$$\varepsilon = \frac{C_D k^2}{L} \quad (3.42)$$

Esto nos lleva a:

$$v_t = C_\mu C_D \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.43)$$

Γ_{T0} se calcula con la viscosidad turbulenta empleando el concepto del número de Prandtl turbulento para flujo de calor, σ_{T0} :

$$\Gamma_{T0} = \frac{v_t}{\sigma_{T0}} \quad (3.44)$$

En el modelo $\kappa - \varepsilon$ se emplean las ecuaciones de conservación aproximadas, tanto para k como para ε , dadas por Rodi [30]:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} k \bar{u}_i - \bar{\rho} \frac{v_{tj}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) = \bar{\rho} (P_s + P_b - \varepsilon) \quad (3.45)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \varepsilon \bar{u}_i - \bar{\rho} \frac{v_{tj}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) = \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} (C_{1\varepsilon} (P_s + C_{3\varepsilon} P_b) - C_{2\varepsilon} \varepsilon) \quad (3.46)$$

donde P_s y P_b denotan las producción de energía cinética turbulenta debida al cortante (s) y a los efectos de fuerza de flotación (b), respectivamente

3.3.2 Condiciones de Frontera

3.3.2.1 Condiciones de frontera en la entrada

En la entrada, el flujo de masa, cantidad de movimiento, energía cinética turbulenta, razón de disipación de energía cinética y temperatura potencial fueron especificados. El perfil de velocidad a la entrada se asumió logarítmico:

$$u_m = \frac{u_b}{\kappa} \ln\left(\frac{Z}{Z_0}\right) \quad (3.47)$$

donde u_b y Z_0 se especificaron para la frontera. El flujo másico en $x=0$ es $\rho_m u_m$. La densidad a la entrada depende linealmente con la altura Z :

$$\rho_m = 1.28 - 1.1 \times 10^{-4} \cdot Z \quad (3.48)$$

Las condiciones iniciales (Grundberg /31/) empleadas para la simulación de la energía de disipación y la energía cinética turbulenta son:

$$\varepsilon = 1.64 - 0.001 \cdot Z \quad (3.49)$$

$$k\varepsilon = 2.15 - 0.001 \cdot Z \quad (3.50)$$

asumiendo una estratificación neutra. La temperatura potencial del aire que fluye en $x=0$ es de 273 K.

3.3.2.2 Condiciones de frontera en la salida

En la salida, el perfil de presiones se especificó empleando una polinomial de cuarto orden. Esta polinomial es una aproximación, por mínimos cuadrados, del perfil obtenido a la mitad del dominio en estudio /31/.

$$P = 1.204.0057 - 12.609942 \cdot Z + 5.34394907 \times 10^{-4} \cdot Z^2 + 7.80204436 \times 10^{-9} \cdot Z^3 - 3.04657481 \times 10^{-12} \cdot Z^4 \quad (3.51)$$

3.3.2.3 Condiciones de frontera en la tierra

En la superficie terrestre se especificó una condición de frontera que permite tomar en consideración la fuerza de arrastre ejercida por la superficie terrestre sobre el aire cercano a ésta /31/.

La fuerza de arrastre origina un momento vertical. Dicho momento puede ser escrito como:

$$-\rho \overline{u'w'} = \rho u_b^2 \quad (3.52)$$

La velocidad de fricción en el punto más bajo de la malla, de altura Z_p , puede ser estimado con la velocidad u_p , empleando la ley logarítmica para el viento:

$$u_b = \frac{\kappa u_p}{\ln\left(\frac{Z_p}{Z_0}\right)} \quad (3.53)$$

La función logarítmica para el viento solamente es válida para el caso de una atmósfera neutra. Sin embargo, dicha función es una buena aproximación si se considera que la región cercana a la superficie tiene una estratificación neutra.

Para obtener una atmósfera estratificada, distinta a la neutra, se estableció un flujo de calor en la frontera de la superficie terrestre. Dicho flujo de calor debe ser multiplicado por $\frac{0}{c_p T}$, con la finalidad de obtener la fuente correcta para la temperatura potencial.

Se emplearon los valores de las constantes empíricas en el modelo $k - \epsilon$ reportados por Rodi /29/.

Tabla 3.1 Constantes de Rodi /30/

C'_μ, C''_μ	σ_k	σ_ϵ	$C'_{1\epsilon}$	$C'_{2\epsilon}$
0.09	1.0	1.3	1.44	1.92

3.3.2.4 Condiciones de frontera en el techo del dominio

En el techo del dominio en estudio se establecieron flujos de calor y de cantidad de movimiento, iguales a los establecidos en la superficie de la tierra /31/.

3.3.2.5 Condiciones de la descarga

Las condiciones de energía cinética turbulenta y energía de disipación estimadas para la descarga, se calcularon respectivamente.

$$ke = V^2 \cdot (0.01) \quad (3.54)$$

$$\epsilon = 0.01643 \cdot (k^{3/2}) / (0.01 \cdot Z) \quad (3.55)$$

3.4 Comparación de los modelos semi-empíricos y numérico

Se realizó una comparación entre los modelos semi-empíricos y numérico descritos anteriormente.

Se simuló una descarga con las siguientes características:

Tabla 3.2 Condiciones de la descarga

Temperatura	$T = 300 \text{ }^\circ\text{C}$
Gasto másico	$\dot{m} = 43.75 \text{ kg/s}$
Velocidad de la descarga	$V = 5 \text{ m/s}$
Altura de la chimenea	$H = 25 \text{ m}$

Para el modelo numérico, la discretización del dominio se muestra en la figura 3.2. La altura del dominio es 1 km., la longitud es de 10 km. y el espesor de 500 m.

La discretización del dominio cerca de la descarga se muestra en la figura 3.3. La malla es no-uniforme; en las zonas donde existen grandes gradientes de parámetros de flujo (cerca de la tierra y de la descarga) el tamaño de la celda es menor; esto con la finalidad de disminuir el tiempo de cómputo a emplearse.

3.4.1 Descarga a la atmósfera neutra

El perfil de velocidad anterior a la descarga se muestra en la figura 3.4

El patrón de flujo generado en el plano de la línea central por la descarga aparece en la figura 3.5.

En la figura 3.6 se ve la forma de la pluma mediante isoterms. Los números indican la elevación de la temperatura, en grados Kelvin, sobre el medio. También se observa que el nivelado de la pluma ocurre a aproximadamente 2 km. corriente abajo de la descarga. Debido a un intensivo proceso de dispersión turbulenta del gas descargado, la temperatura disminuye significativamente muy cerca de la descarga.

La figura 3.7 indica la comparación de la elevación de la línea central de la pluma calculada con la fórmula de Briggs (la "ley de 2/3") y la fórmula de Briggs modificada/21/. Los resultados de la simulación se acercan a los obtenidos por la ley de 2/3, la cual fué calibrada con numerosos datos experimentales. Como línea central de la pluma, se entendió como la línea que une los puntos de máxima temperatura calculados para cada sección transversal. Estos máximos de temperatura se determinaron a partir de los perfiles de temperatura obtenidos a distintas distancias corriente abajo de la chimenea, ver figura 3.8, donde Z es la distancia corriente abajo de la chimenea.

3.4.2 Descarga a la atmósfera estratificada

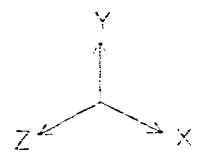
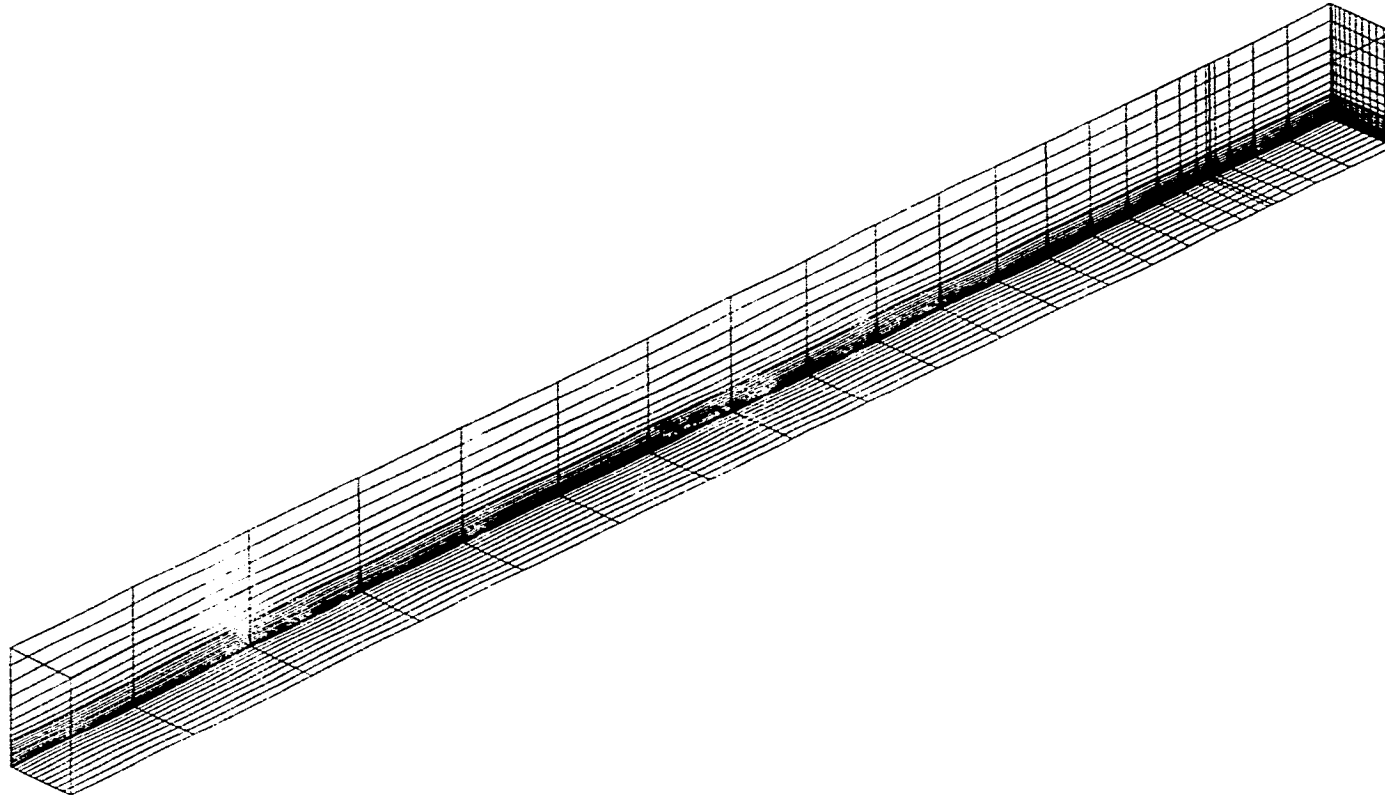
Para modelar la atmósfera estratificada se estableció un flujo de calor en el cielo y el fondo del dominio, en dirección de la tierra, de 10 W/m^2 .

Todas las demás condiciones de frontera se especificaron como en el anterior caso de la atmósfera neutra.

La figura 3.9 ilustra el patrón de flujo generado por la descarga. El perfil de temperatura de la atmósfera corriente arriba de la chimenea, se presenta en la fig. 3.10. En la zona cercana a la tierra (alrededor de 100 m), la atmósfera es muy estable. Mientras que arriba de los 100 m es neutra. La distribución de temperatura de la pluma correspondiente a este tipo de atmósfera, estable, se ilustra en la fig. 3.11. De la comparación de ésta con la figura 3.6 se puede ver que la pluma no se eleva a una altura mayor que en el caso de una atmósfera neutra.

En la fig. 3.12 se comparan las predicciones de la elevación máxima de la pluma, hechas por el modelo de la descarga a la atmósfera estratificada y la teoría de Briggs. La discrepancia entre las predicciones se le atribuye al valor constante del gradiente de temperatura potencial empleado en la fórmula de Briggs. En el modelo numérico el gradiente de temperatura potencial es variable, ver fig. 3.10.

DISCRETIZACION DEL DOMINIO



3D PLUME DISPERSAL

PHOENICS

Figura 3.2 Discretización del dominio

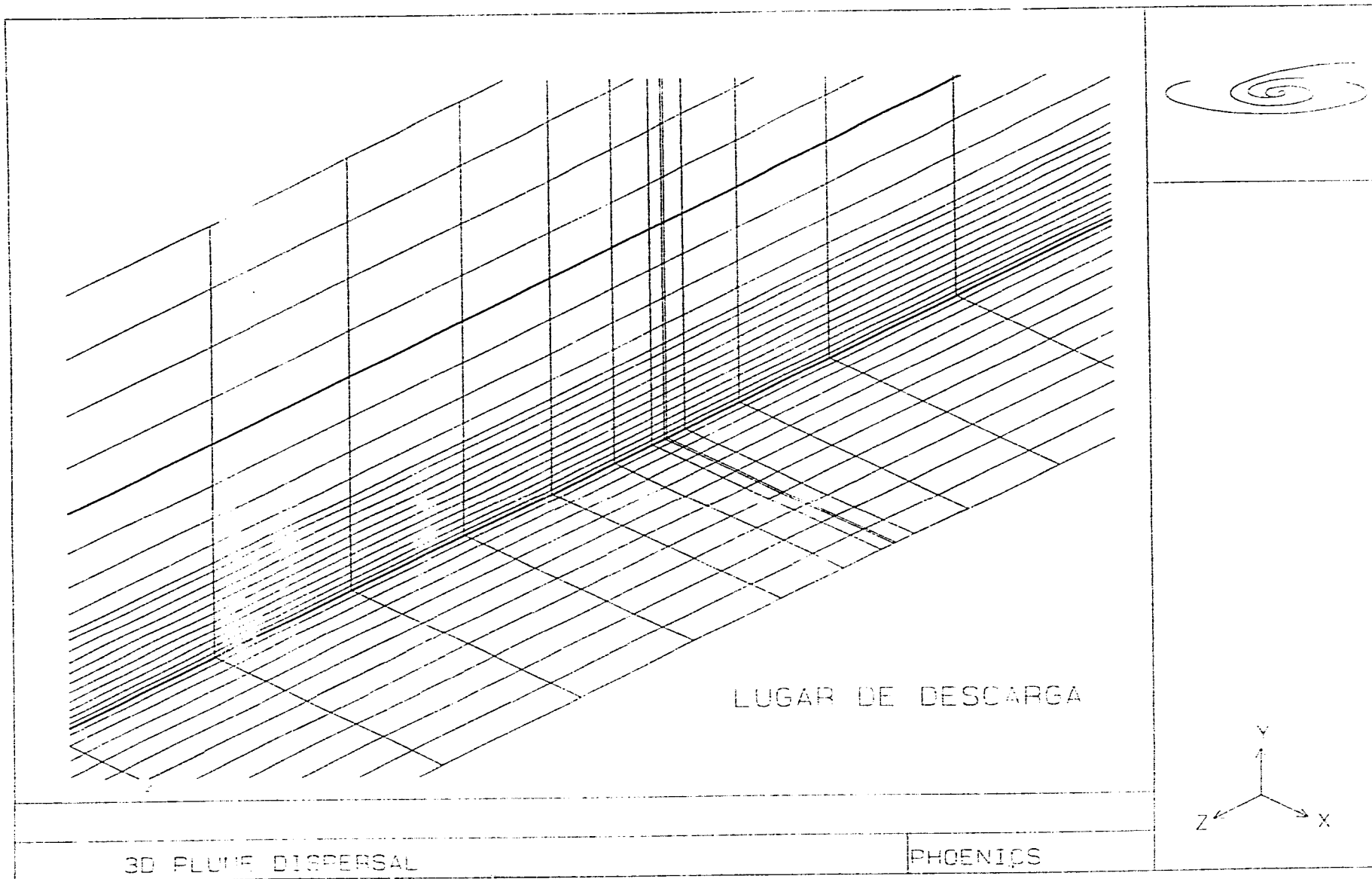


Figura 3.3 Lugar de la descarga

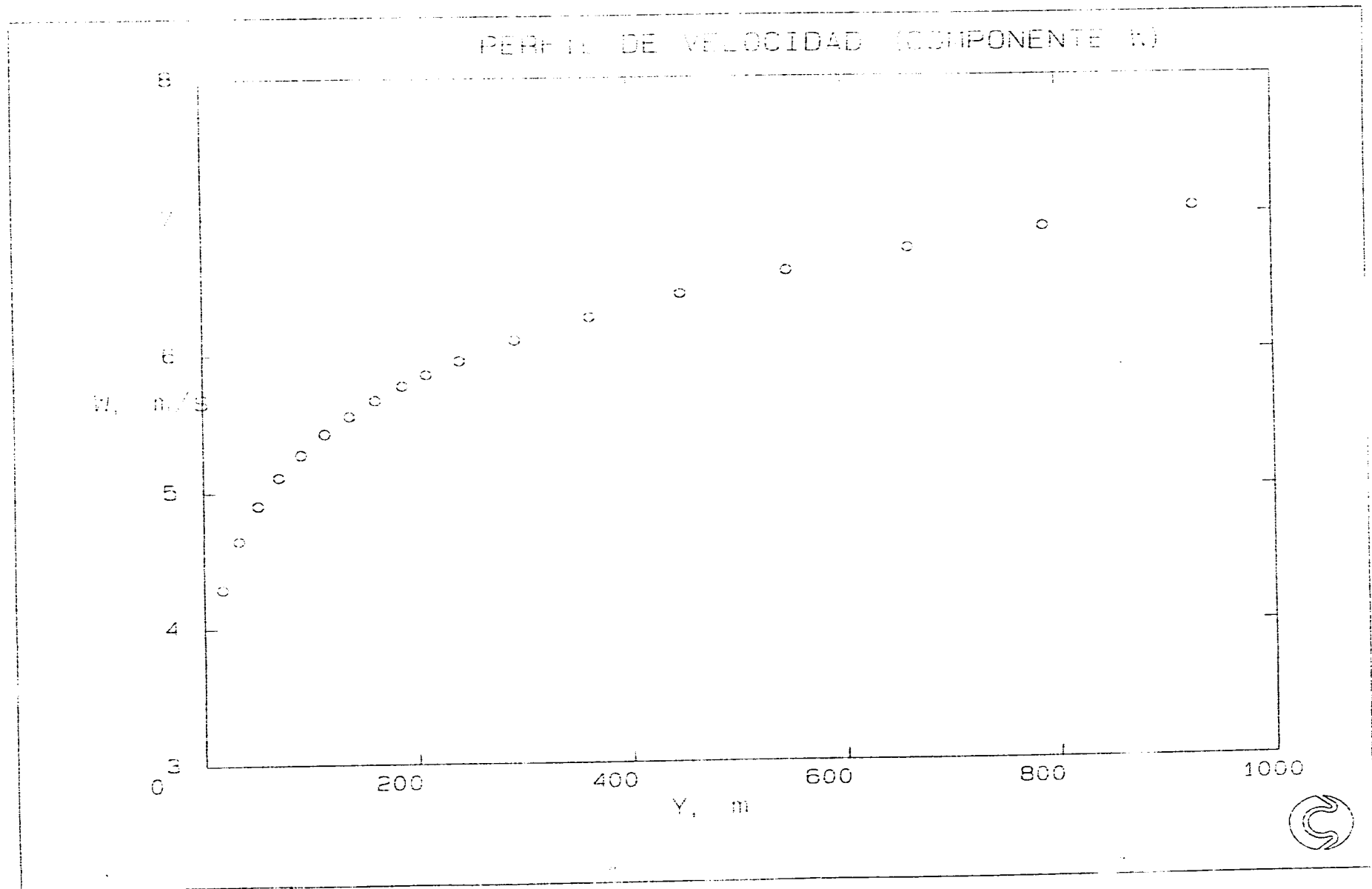


Figura 3.4 Perfil de velocidad (componente w)

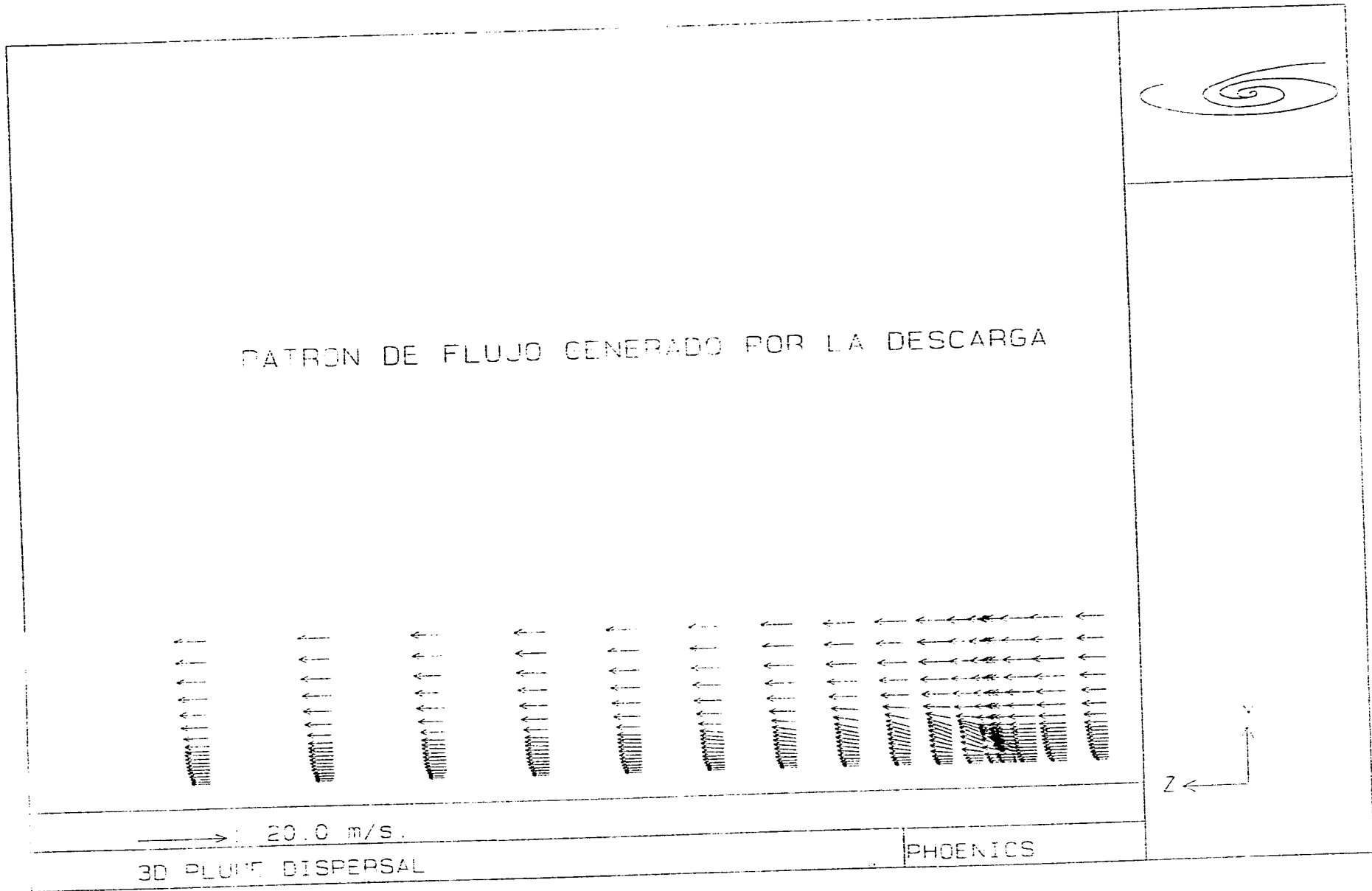


Figura 3.5 Patrón de flujo generado por la descarga

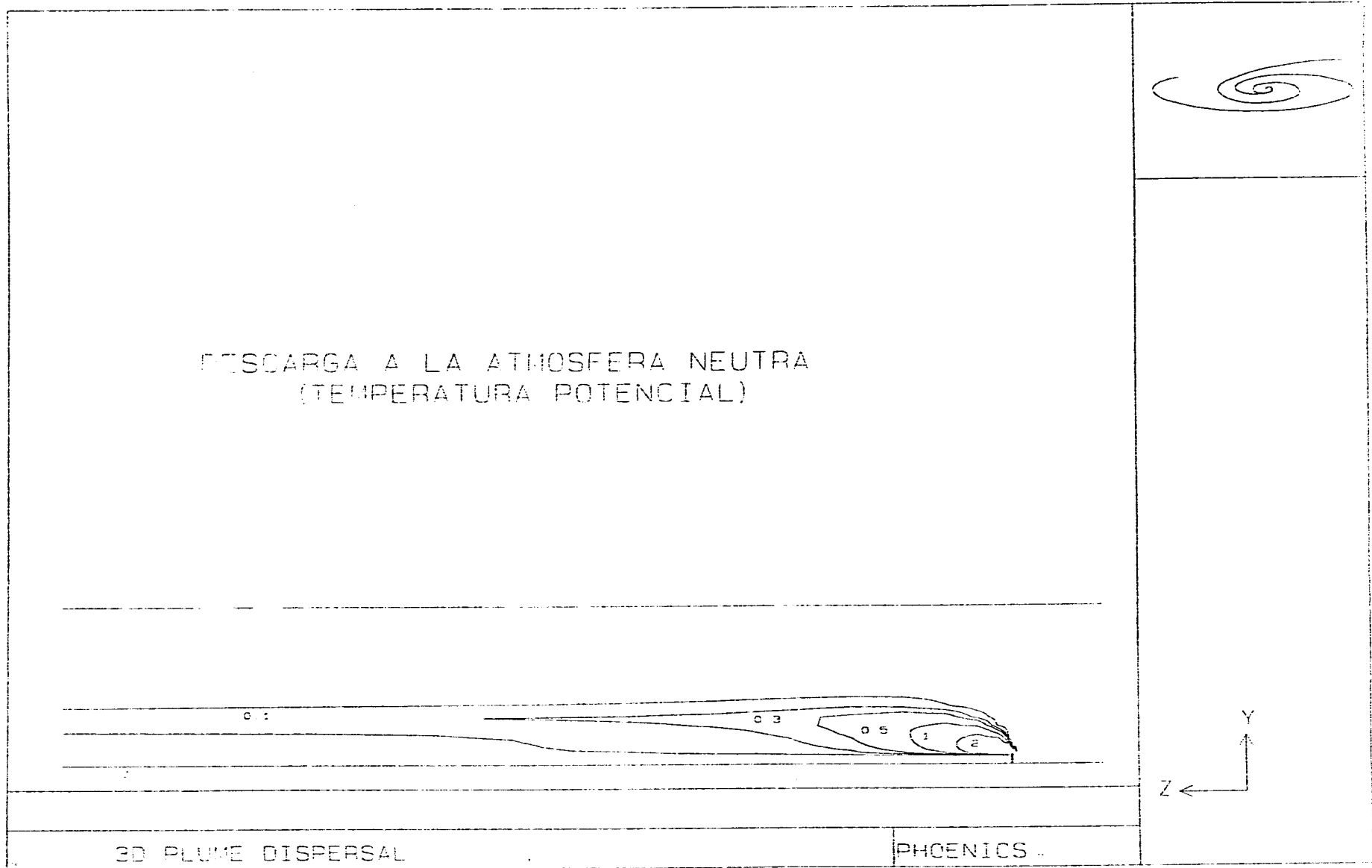


Figura 3.6 Descarga a la atmósfera neutra (temperatura potencial)

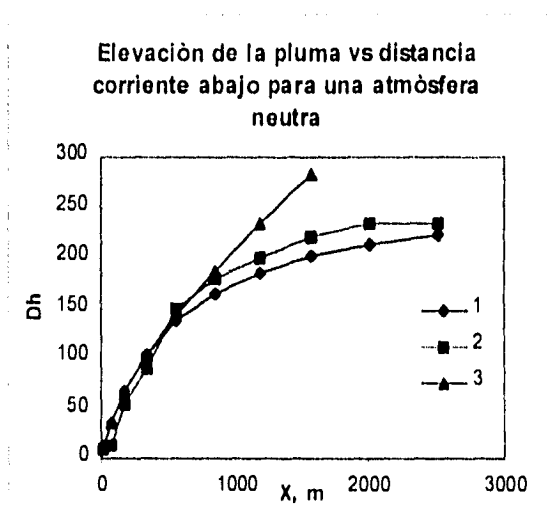


Figura 3.7 Comparación del modelo numérico con la teoría de Briggs
 (1-Fórmula de Briggs modificada; 2-Modelo numérico; 3-Teoría de Briggs)

LOCALIZACION DEL CENTRO DE LA PLUMA

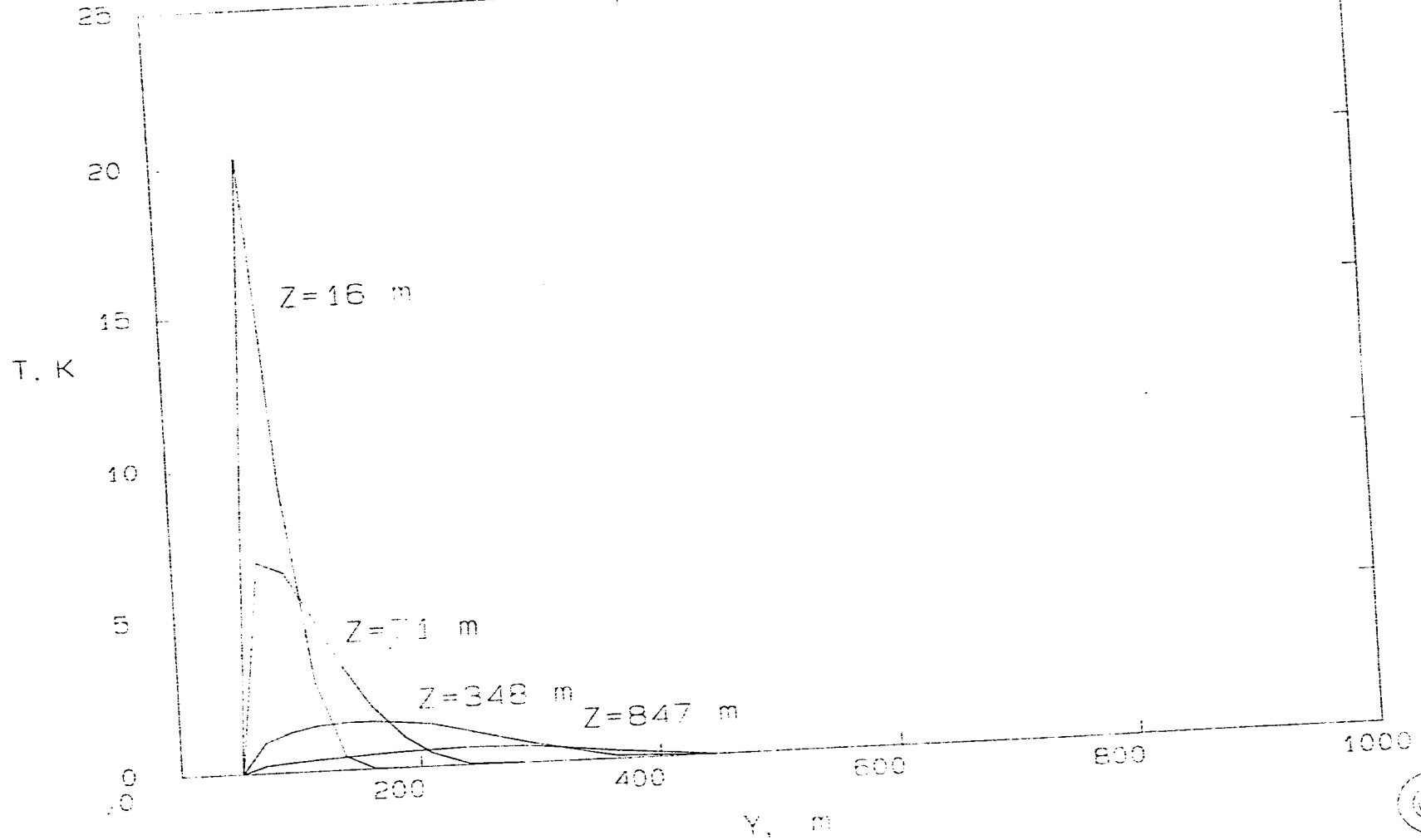
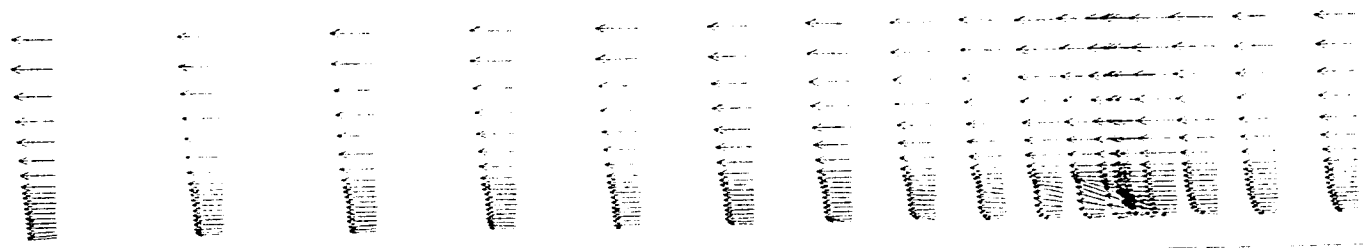


Figura 3.8 Localización del centro de la pluma





PERFIL DE VELOCIDAD PARA ATMOSFERA ESTABLE



→ 200 m/s

3D FLUX DISPERSAL

PHOENIX

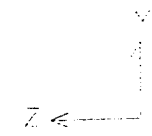


Figura 3.9 Perfil de velocidad para la atmósfera estable

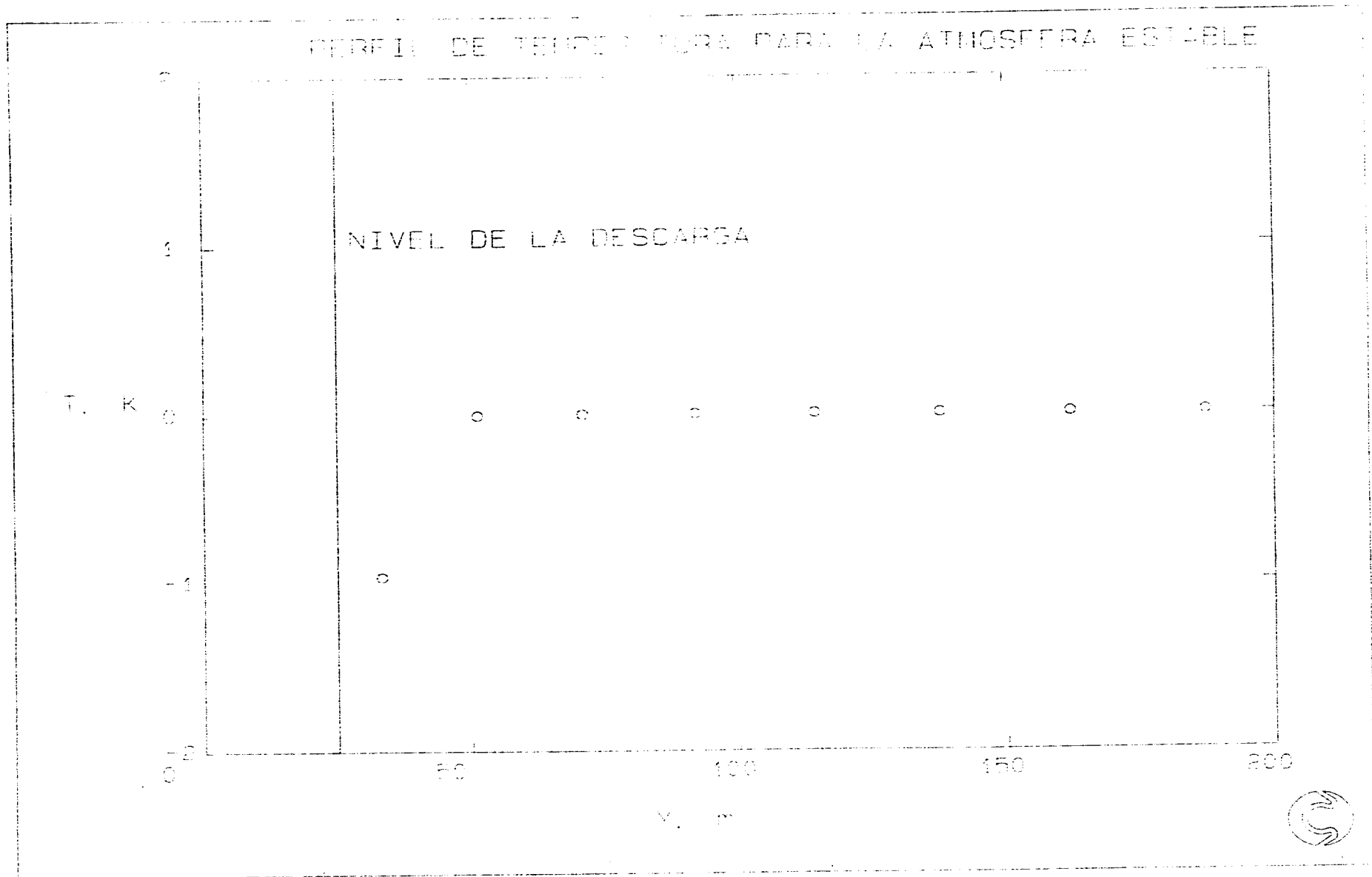
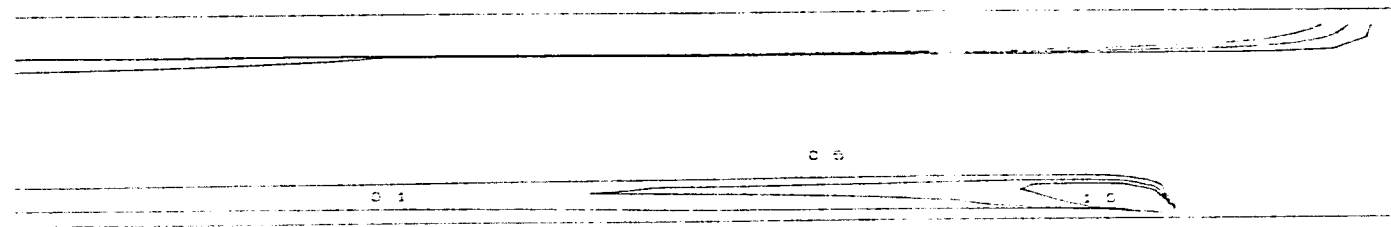


Figura 3.10 Perfil de temperatura para la atmósfera estable



PLUMA TÉRMICA EN ATMÓSFERA ESTABLE



3D PLUME DISPERSAL

PHOENICS

Figura 3.11 Pluma térmica en atmósfera estable

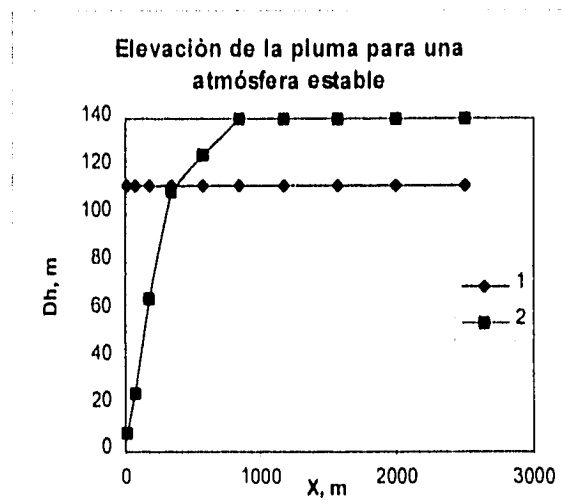


Figura 3.12 Predicciones de la elevación máxima de la pluma para una atmósfera estable

(1-teoría de Briggs, $\frac{d\theta}{dz} = 10 \text{ }^\circ\text{C}/100\text{m}$ 2-modelo numérico)

3.5 Ecuación de Estado y propiedades termofísicas para mezclas de gases ideales

Hay que recordar que el gas fugado hacia a la atmósfera, presenta propiedades físicas distintas al aire contenido en la atmósfera. Debido a esto, es necesario considerar el mezclado del gas emanado con el aire atmosférico. De ahí que haya que modificar el modelo anteriormente descrito.

3.5.1 Densidad de la Mezcla

La presión de la mezcla de gases ideales puede calcularse como

$$P_m = \rho_m \cdot \frac{R_u}{m_m} \cdot T_m \quad (3.56)$$

despejando la densidad de la mezcla, la ecuación queda

$$\rho_m = \frac{P_m}{R_u \cdot T} \cdot m_m \quad (3.57)$$

por lo que la densidad de la mezcla depende directamente de la masa molecular de la misma. Para calcular dicha masa molecular, es necesario conocer el porcentaje, másico o volumétrico, que ocupan los componentes dentro de la mezcla. Ya que la mezcla considerada consta básicamente de dos componentes, por conservación de masa, se tiene que

$$Y_1 + Y_2 = 1 \quad (3.58)$$

o bien

$$mf_1 + mf_2 = 1 \quad (3.59)$$

donde Y es la fracción volumétrica o molal, y mf_i la fracción másica de los componentes 1 y 2, respectivamente.

La relación existente entre la fracción molal Y y la fracción másica mf_i de una mezcla de gases es como sigue

$$mf_i = Y_i \cdot \frac{m_i}{m_m} \quad (3.60)$$

esto es, para una mezcla bicomponente de gases ideales

$$mf_1 = Y_1 \cdot \frac{m_1}{m_m} \quad (3.61)$$

$$mf_2 = Y_2 \cdot \frac{m_2}{m_m} \quad (3.62)$$

por lo que sustituyendo las ecuaciones (3.32) y (3.33) en (3.29), se obtiene que la masa molecular para una mezcla bicomponente de gases ideales se calcula como:

$$m_m = \left[\frac{m_1 \cdot m_2}{m_2(mf_1) + m_1(1 - mf_1)} \right] \quad (3.63)$$

o bien

$$m_m = \left[\frac{m_1 \cdot m_2}{m_2(1 - mf_2) + m_1(mf_2)} \right] \quad (3.64)$$

3.5.2. Otras Propiedades

Aplicando la ley de Gibbs y de Dalton de mezclas de gases ideales, se tiene que la energía interna específica de la mezcla se puede calcular como:

$$u_m = \sum_{i=1}^k mf_i \cdot u_i \quad (4.65)$$

Lo mismo sucede para las propiedades de entalpía, capacidades térmicas específicas, viscosidad y conductividad de la mezcla:

$$h_m = \sum_{i=1}^k mf_i \cdot h_i \quad (4.66)$$

$$Cp_m = \sum_{i=1}^k mf_i \cdot Cp_i \quad (4.67)$$

$$Cv_m = \sum_{i=1}^k mf_i \cdot Cv_i \quad (4.68)$$

$$\mu_m = \sum_{i=1}^k mf_i \cdot \mu_i \quad (4.69)$$

$$k_m = \sum_{i=1}^k mf_i \cdot k_i \quad (4.70)$$

4. SIMULACIÓN NUMÉRICA DE ACCIDENTES

Empleando los modelos de descarga y dispersión, descritos en los dos capítulos anteriores, se simularon varios accidentes relacionados con la ruptura de las líneas de conducción de hidrocarburos (propano y metano) con la finalidad de identificar los parámetros físicos que tienen influencia sobre la descarga y dispersión del gas fugado.

4.1 ACCIDENTE EN UNA LÍNEA DE TRANSPORTE DE METANO

4.1.1 Características del accidente y modelo de descarga

Se simuló el accidente de una línea de conducción similar al reportado por Botros y Jungowski /19/. Dicho accidente involucraba a una línea de transporte de metano con la siguientes características (ver tabla 2.1)

Tabla 2.1

D_p	D_s	L_{s1}	L_{s2}	L	A_{th}	T_i	P_i
0.203 m	0.097 m	1.3 m	0.7 m	25,523 m	0.00548 m ²	300K	40.89 bar

Así entonces, el modelo de descarga empleado para la simulación fue el modelo unidimensional (PIPE) /19/, descrito en el capítulo 2 (ver figura 4.1).

4.1.2 Modelo de dispersión

Se utilizó el mismo modelo numérico descrito en el capítulo tres, pero realizando las siguientes consideraciones:

- Se considera una descarga de gas puro hacia la atmósfera.
- La descarga se realiza hacia una atmósfera neutra.
- Las condiciones iniciales y de frontera se muestran en el capítulo 3.
- Las propiedades termodinámicas del fluido se calculan como aquellas existentes en una mezcla de gases ideales (aire-metano).
- Se empleó el modelo de turbulencia k-ε estándar.

4.1.3 Casos a simular

Se simuló un accidente asociado con la ruptura de una línea de transmisión de metano, para 12 distintas condiciones de descarga.

La tabla 4.1 muestra las condiciones bajo las cuales se simularon dichos accidentes.

Para el caso de la descarga de metano, se buscó observar la influencia de la velocidad del viento, la diferencia de temperatura existente entre la descarga y el medio ambiente (Botros y Jungowski /19/ mencionan que durante la descarga de metano, éste llega a presentar una

diferencia de - 12 K con respecto al medio ambiente), y la longitud de la tubería sobre la dispersión del gas.

Tabla 4.1 Condiciones de la descarga de metano a una atmósfera neutra

Caso	Velocidad del viento (m/s)	ΔT ($T_{amb}-T_{descarga}$) (K)	Longitud de la tubería (km.)
1	1	0	25523
2			12761.5
3		-15	25523
4			12761.5
5	3	0	25523
6			12761.5
7		-15	25523
8			12761.5
9	6	0	25523
10			12761.5
11		-15	25523
12			12761.5

4.1.4 Resultados

La velocidad másica de la descarga de metano, empleando el modelo unidimensional /19/, para dos diferentes longitudes de tubería puede ser observada de la figura 4.1. El tiempo total de la descarga depende directamente de la longitud de la tubería; siendo éste de aproximadamente 5,500 s para la tubería de longitud $L=25,523$ m y de aproximadamente 2,200 s para la tubería de la mitad de la longitud.

Las figuras 4.2 a, 4.2 b y 4.3 muestran el dominio computacional empleado para la simulación numérica del accidente. Dicho dominio simula la porción baja de la atmósfera en estudio, teniendo una longitud total de 13,010m, una altura de 1,000 m, y un espesor de 1,005 m. En la figura 4.2a se observa una vista de perfil del dominio. La figura 4.2b enseña un corte transversal de la mitad del dominio. La discretización de las celdas aumenta conforme se acerca al punto de la descarga.

La figura 4.3 muestra un acercamiento a la zona de la descarga, vista tridimensionalmente.

Las condiciones, iniciales y en el dominio, del campo de velocidad, densidad, energía cinética turbulenta, rapidez de la disipación de la energía se muestran en las figuras 4.4, 4.5, 4.6a y 4.6b (Grundberg /31/). La figura 4.7 muestra el perfil de temperatura para una atmósfera neutra.

Caso No. 1

La elevación, o descenso, de la nube de metano descargado depende principalmente de 7 factores importante, los cuales son: a)inercia del chorro (cantidad de movimiento) de gas que descarga a una atmósfera; b)velocidad del viento (convección); c)flotación de la nube de gas

(debida a la variación la densidad, producto de la diferencia de concentraciones); d) turbulencia atmosférica; e) turbulencia generada por el chorro; f) fricción; g) difusión de masa (Metano en aire).

La evolución de los vectores de velocidad para el caso 1 se muestran en la figura 4.8. Como se había visto en el capítulo 2, la velocidad de la descarga permanece sónica casi todo el tiempo que dura la descarga ($t_{\text{sónico}} \cong 4,600\text{s}$; $t_{\text{total}} \cong 5,500\text{s}$).

En la figura 4.9 se observa la distribución de concentraciones en el plano central de la pluma.

En la zona cercana a la ruptura, los efectos de inercia y turbulencia generados por el chorro, y de flotación llegan a ser predominantes en el ascenso de la pluma, ya que la cantidad de movimiento del chorro en este instante es alta. Además, debido a que el metano es menos denso que el aire, la nube de aire-metano tiende a elevarse hasta una altura en donde la densidad del aire y la de la mezcla se equilibran. Esto puede ser visto en las figuras 4.9 a, 4.10 a y 4.11 a, las cuales muestran la distribución de concentraciones, energía cinética turbulenta y densidades, respectivamente, 1,305 s después de ocurrida la descarga al dominio en estudio. En la medida que la pluma se aleja de la zona de la ruptura, la turbulencia atmosférica, la fricción y la velocidad del viento llegan a ser los factores predominantes sobre la dispersión y elevación de la pluma.

Conforme el tiempo transcurre, la descarga de gas disminuye (ver fig. 4.1), y los términos de cantidad de movimiento y turbulencia generados por el chorro se ven reducidos (figuras 4.9b, 4.10b y 4.11b). Por lo que, los efectos debidos a fricción, turbulencia atmosférica y convección empiezan a ser los predominantes. El término de flotación de la nube (mezcla del gas metano con el aire) también se ve afectado por disminución de la descarga; así como por la dispersión de éste en la atmósfera, debida al viento existente principalmente. De ahí que la pluma alcance una menor altura. En las figuras 4.9b, 4.10b y 4.11b se muestran la distribución de concentraciones, energía cinética turbulenta y densidades en el plano central de la pluma, una vez transcurridos 4,875 s de iniciada la descarga.

Finalmente, una vez terminada la descarga, los efectos por turbulencia e inercia del chorro se ven suprimidos; siendo así la convección del viento, la flotación de la nube, la fricción y la turbulencia atmosférica las principales causas de la dispersión de la nube de gas. Esto puede ser visto en las figuras 4.9c, 4.10c y 4.11c, en donde se puede observar cómo la nube de gas (metano-aire) se mueve en dirección corriente abajo de la ruptura.

Hay que mencionar que, durante todo el tiempo que dura la descarga, existe una zona corriente arriba de la descarga en donde se observa una presencia del gas, esto es debido principalmente al fenómeno de difusión de masa, ya que en la zona previa a la descarga, se tiene una concentración de propano del 0%.

En las figuras 4.12, 4.13 y 4.14 se muestra la evolución tridimensional de la pluma, empleando iso-líneas de concentración másica. También, en dichas figuras se presenta el desarrollo del corte transversal de la pluma, así como la forma que adquiere la pluma.

En la zona cercana a la descarga, ver fig. 4.12b, los efectos debidos a: convección del viento, fricción, cantidad de movimiento y turbulencia del chorro generan una pluma con las siguientes características:

La parte superior del corte de la pluma, ver figura 4.12 c, es un poco más ancha que en la sección intermedia del mismo, ésto debido a que el flujo másico del gas, instantes antes, era mayor que para este instante, por lo que dicho ensanchamiento es debido a esta diferencia en flujos másicos, ya que el gas no puede elevarse a una altura mayor.

Por otro lado, en la sección media-baja a baja, se puede observar un ensanchamiento de la pluma, causado por la turbulencia generada por la descarga del chorro, principalmente, y la fricción ejercida por la superficie terrestre.

En la zona lejana a la ruptura, los efectos de cantidad de movimiento y turbulencia generados por el chorro se ven disminuidos; predominando así los efectos convectivo del viento, de fricción y de turbulencia atmosférica. De ahí que exista una mayor dispersión del gas, y la pluma se vea adelgazada en su estela.

Posteriormente, a los 4,875 s de iniciada la descarga, fig. 4.13 c, se observa que la pluma se adelgaza en la parte superior, pero manteniéndose ancha en su parte media-inferior. Dicho adelgazamiento se le atribuye a la disminución de la descarga, así como a una mayor dispersión del gas, debida a la convección del viento. El que se mantenga ancha en la parte media-inferior, se le atribuye a los efectos debidos a la fricción y a la turbulencia generada en la zona cercana a la superficie terrestre (atmosférica).

Sí se observa con detenimiento, figs. 4.13a y 4.13 b, la pluma generada es más delgada en la zona cercana (corriente abajo) a la ruptura que en la mitad de la longitud del dominio; esto es debido a que la cantidad de gas descargado unos instantes atrás, era mayor que la descargada en este instante.

Una vez terminada la descarga, la pluma se sigue moviendo en dirección corriente abajo de la ruptura, en forma de nube. Lo que se observa realmente en la fig. 4.14a, es la cola de la nube de gas descargado, después de 9,000 s de haberse iniciado la descarga.

Caso No. 2

En este caso se simuló una descarga de gas metano hacia la atmósfera, con condiciones parecidas a las mostradas en el caso No. 1. La única variación que se realizó fué en la longitud de la tubería. La longitud para este caso es la mitad de la longitud total de la tubería del caso anterior (o sea $L=12,761.5$ m).

De la figura 4.1 se puede deducir que el tiempo total de la descarga se reduce a menos de la mitad del tiempo de la descarga para el caso No. 1. Esto se ve reflejado en las figuras 4.15 y 4.16, en donde al inicio (fig. 4.15 a) los efectos debidos a la inercia del chorro, turbulencia generada por la descarga (fig. 4.17), y los de flotación son más importantes que los de fricción, turbulencia atmosférica, o los convectivos. Pero a medida que la descarga disminuye (figuras 4.15b y 4.15 c) los primeros se ven reducidos, predominando así en mayor medida estos últimos. Además, cabe recordar que la cantidad de metano descargado para éste caso, es menor que en el caso previo, por lo que al mezclarse con el aire, éste se dispersa más rápidamente.

Las figuras 4.18, 4.19 y 4.20, al igual que las figs. 4.12, 4.13 y 4.14, muestran la evolución de la pluma de metano empleando iso-líneas de concentración. La diferencia entre ambas, radica en que estas últimas muestran el desarrollo de la pluma de metano de una línea de conducción de longitud menor.

Al igual que en las figuras anteriores, durante los primeros instantes los efectos de cantidad de movimiento y la turbulencia generados por el chorro, son las principales causas del perfil tomado por la pluma. Pero a diferencia del caso No. 1, la dispersión del gas ocurre en un tiempo menor, debido a que la descarga de gas es menor que en el anterior caso. Además, el efecto convectivo del viento empieza a ser predominante durante un período de tiempo mayor.

De todo lo anterior se puede deducir que, mientras menor sea la longitud de la tubería rota, la dispersión de la nube ocurrirá más rápidamente.

Caso No. 3

Como se mencionó anteriormente, con la finalidad de observar la influencia de la diferencia de temperatura existente entre la descarga y la atmósfera, en un caso similar al No. 1, se realizó la simulación de un caso que contemple dicha diferencia. La evolución de la pluma se muestra en la figura 4.21. Y como se observa, no existe gran diferencia con respecto al caso No. 1 (ver figura 4.9). Esto puede ser corroborado en la figura 4.22, la cual muestra el desarrollo del perfil de temperatura, del dominio en estudio, en el plano central de la pluma. En dicha figura se muestra que la diferencia de temperatura existente en la pluma, no llega a presentar una gran influencia sobre la atmósfera cercana (de entre 0.5 a 0.7 K). Y a medida que la descarga disminuye, ésta tiende a ser nula (figuras 4.22b y 4.22c).

Para los casos sucesivos, en donde se simularon accidentes de descarga de metano a una menor temperatura que la del medio ambiente, 4, 7, 8, 11 y 12, se obtuvo el mismo resultado que el obtenido en el caso No. 3: la diferencia de temperatura no es un factor importante para la simulación de un accidente como éste.

Caso No. 5

Con la finalidad de observar la influencia del efecto convectivo del viento sobre la evolución y dispersión de la pluma, se modificó la condición de velocidad del viento en el dominio en estudio.

En este caso se tienen las mismas condiciones que aquellas empleadas en el caso No. 1, pero con una condición de velocidad de viento mayor, $V=3$ m/s.

Los resultados de la simulación se muestran en la figura 4.23. En dicha figura se observa cómo el efecto convectivo no permite la libre elevación de la pluma (como en el caso No. 1), y a medida que el tiempo pasa, fig. 4.23 a y 4.23 b, dicho parámetro es el más predominante.

Una condición de viento moderado, 3 m/s, es buena para la dispersión de la nube de gas generado por la descarga.

Caso No. 9

Este caso es similar al No. 5, pero aquí la condición de viento se modificó a una condición de viento moderado-alto, 6 m/s.

La figura 4.24 muestra la evolución de la distribución de la concentración de la pluma.

Debido al gran efecto convectivo del viento, la pluma permanece casi pegada al suelo, fig. 4.24a. Y conforme el tiempo pasa, existe una mejor dispersión del gas en la atmósfera, figs. 4.24b y 4.24c.

Por lo que la condición de viento moderado-alto es un factor muy favorable para la dispersión del gas en la atmósfera.

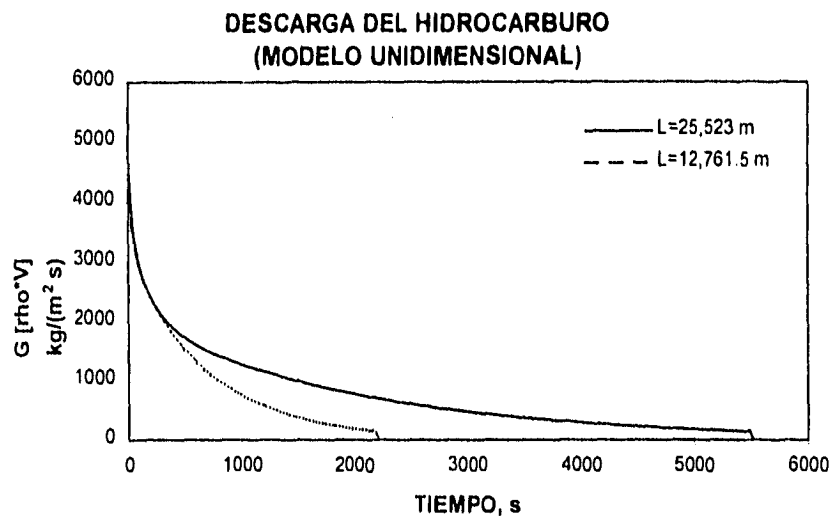


Figura 4.1 Velocidad másica de la descarga del hidrocarburo (Modelo Unidimensional)

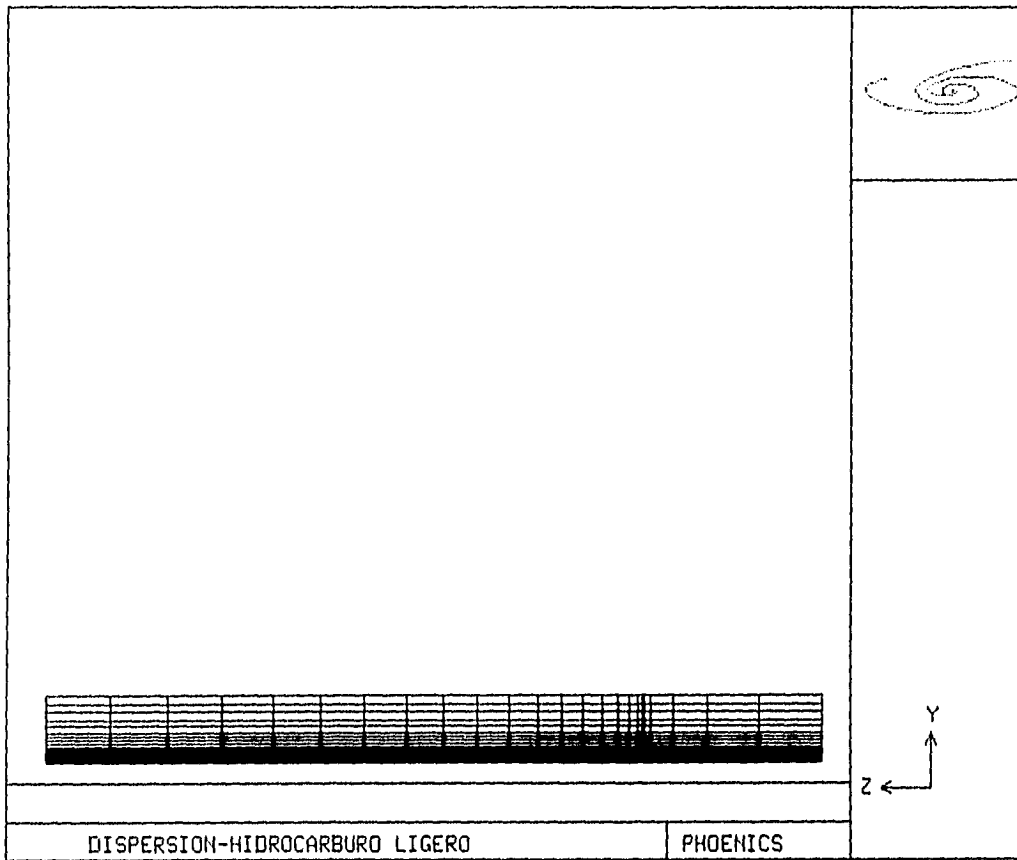


Figura 4.2 a Dominio computacional en estudio (Perfil). Longitud, $z=13,000$ m.

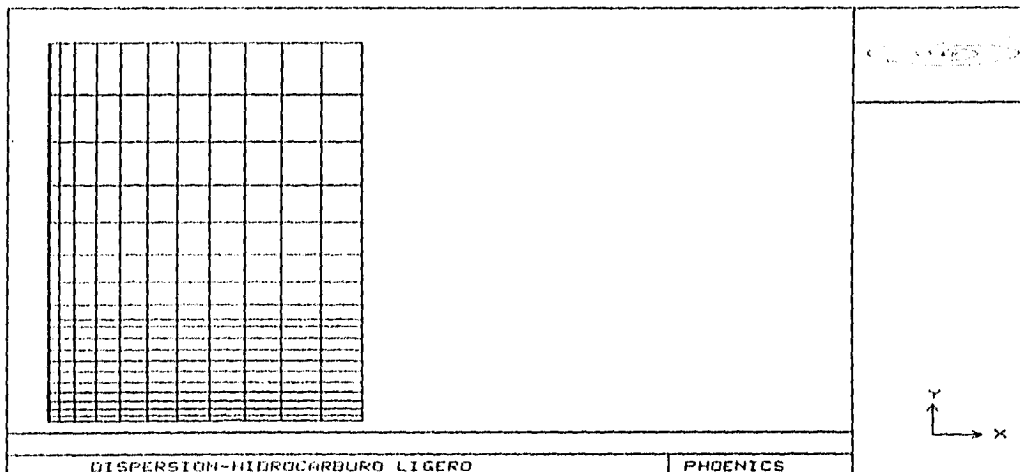


Figura 4.2 b Dominio computacional en estudio (Corte transversal). Altura, $y = 1,000$ m; Acho, $x = 500$ m.

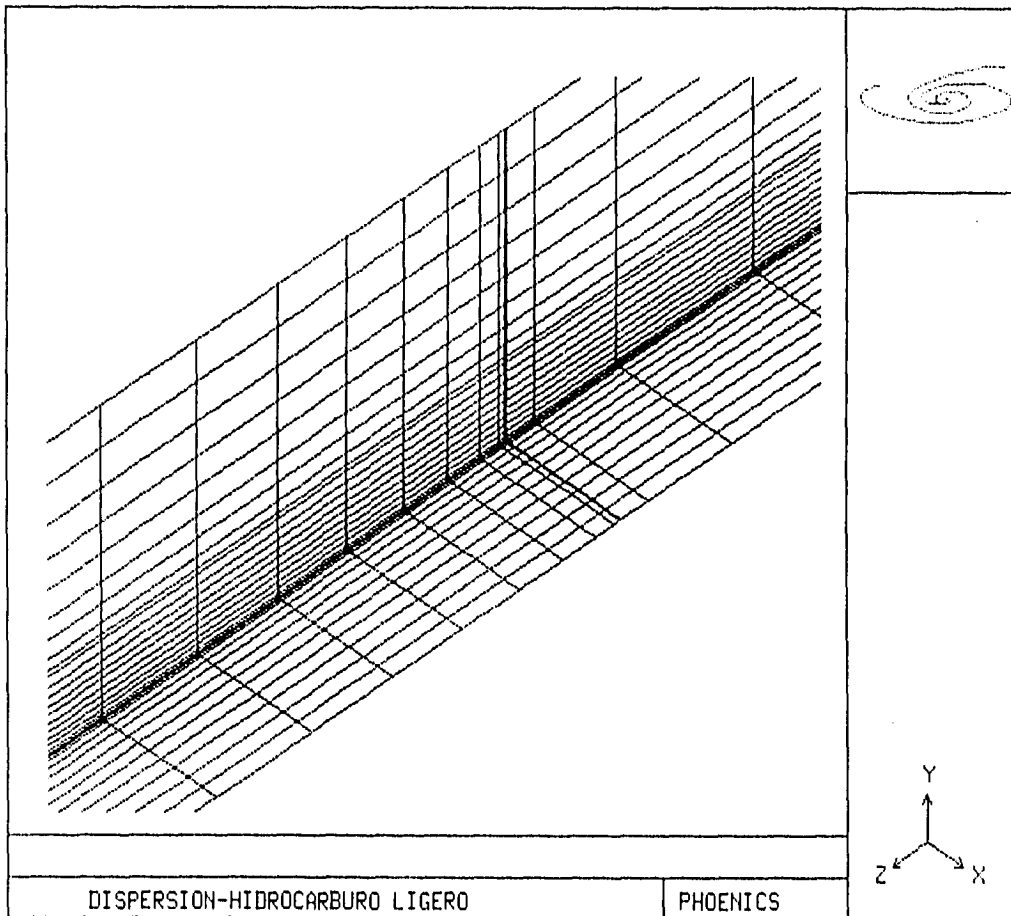


Figura 4.3 Dominio computacional en estudio (Tridimensional). Zona de la descarga.

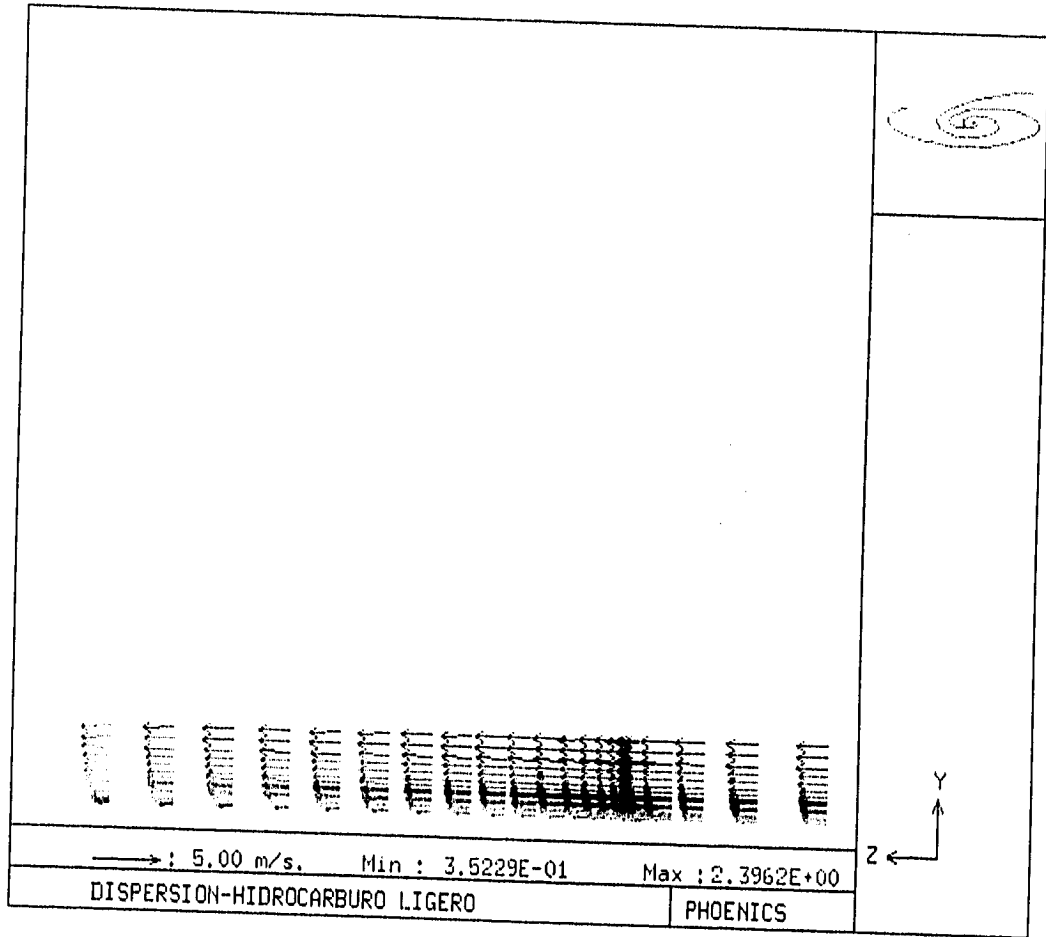


Figura 4.4 Perfil de velocidades en una atmósfera neutra. Longitud L=13,000 m.

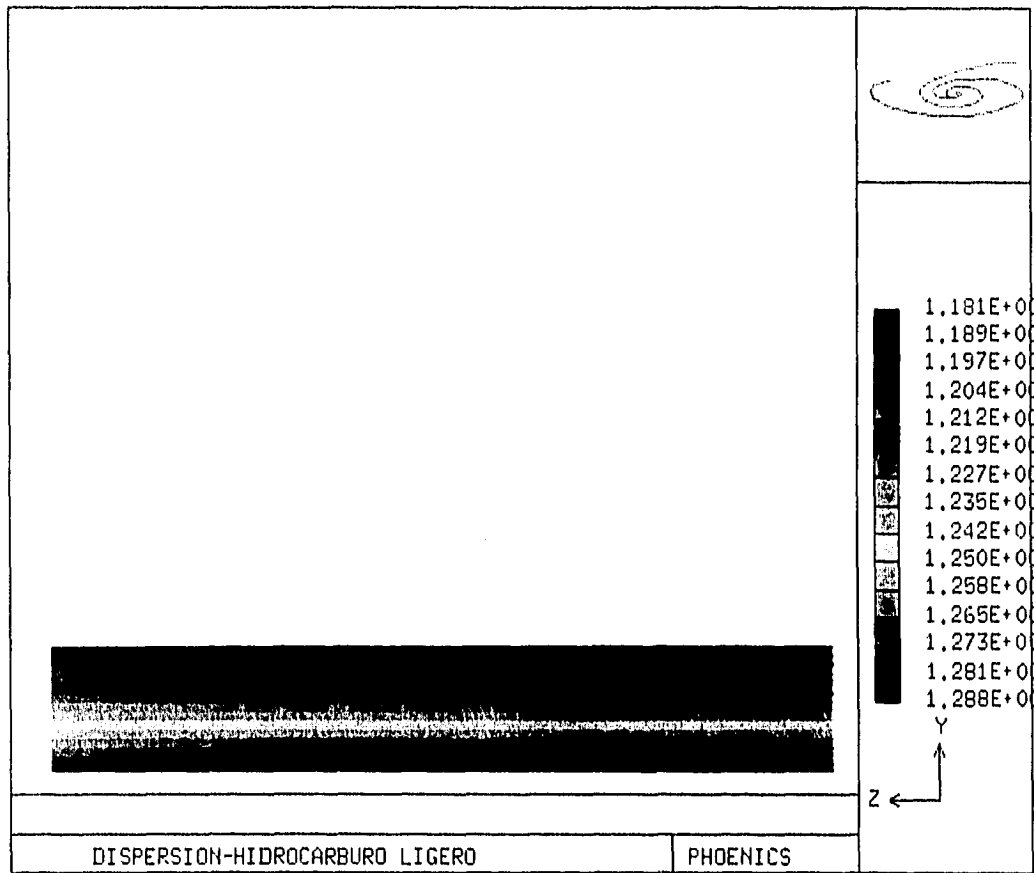


Figura 4.5 Perfil de densidad del aire en una atmósfera neutra. Longitud L=13,000 m.

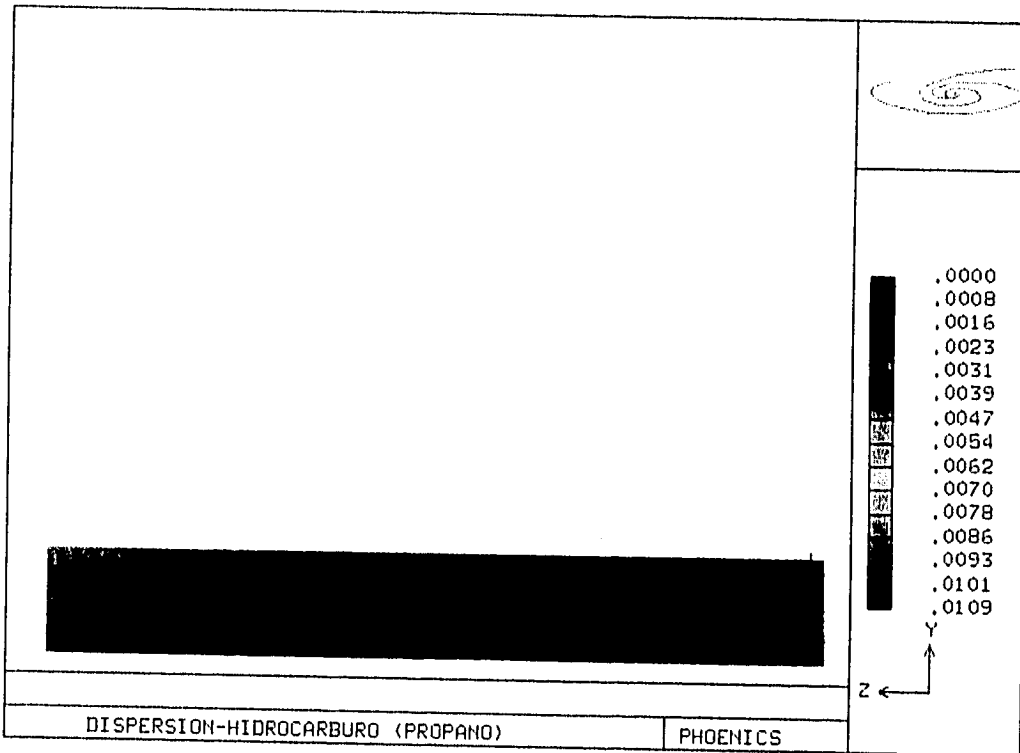


Figura 4.6a Perfil de la energía cinética turbulenta en una atmósfera neutra /31/. Longitud L=13,000 m.

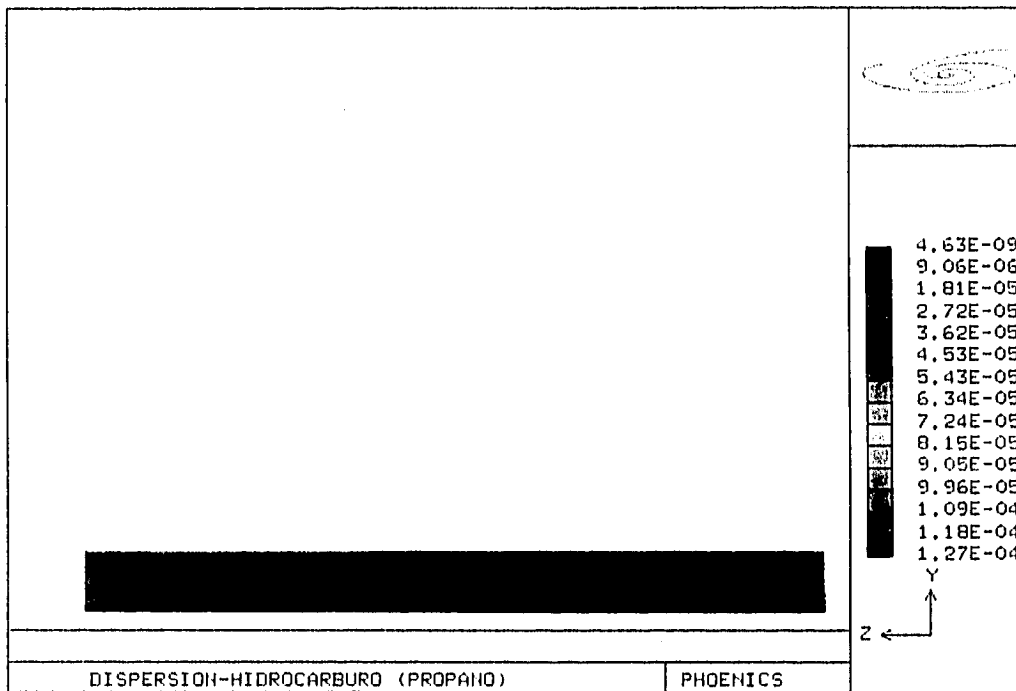


Figura 4.6b Perfil de la rapidez de disipación de la energía en una atmósfera neutra /31/. Longitud L=13,000 m.

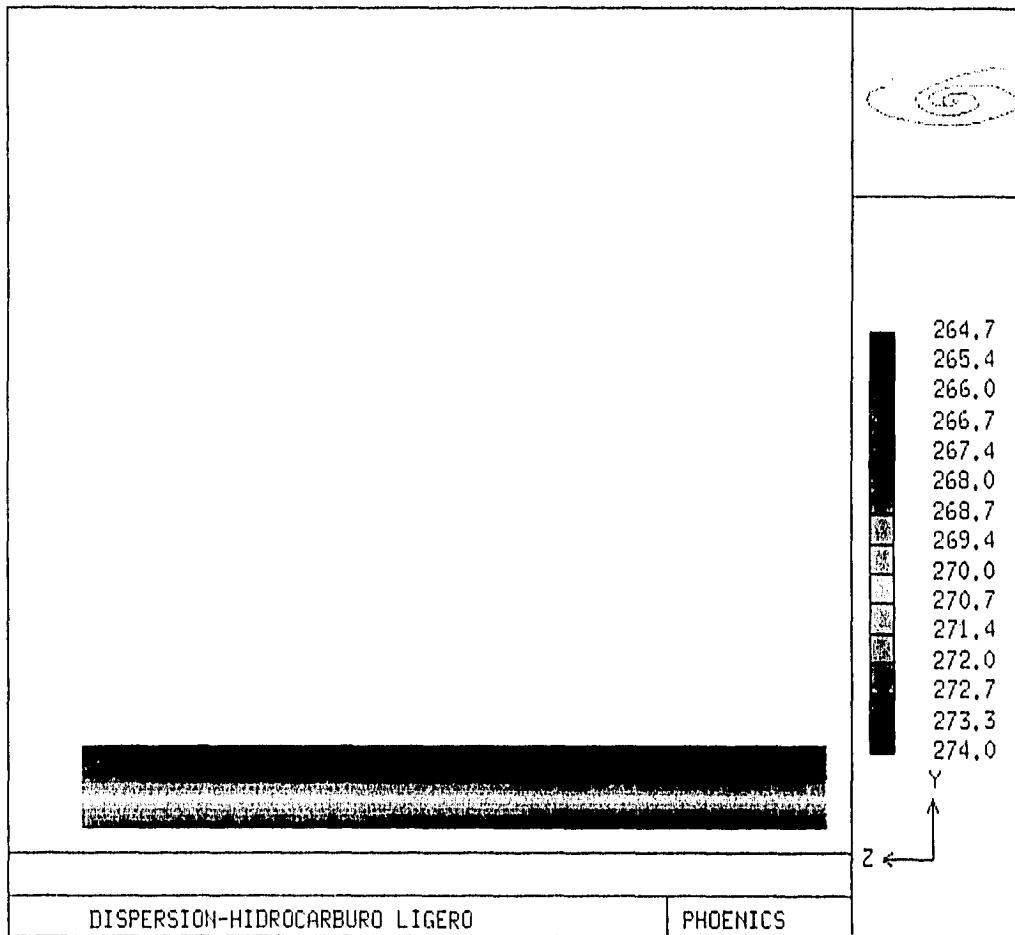


Figura 4.7 Perfil de temperatura en una atmósfera neutra. Longitud L=13,000 m.

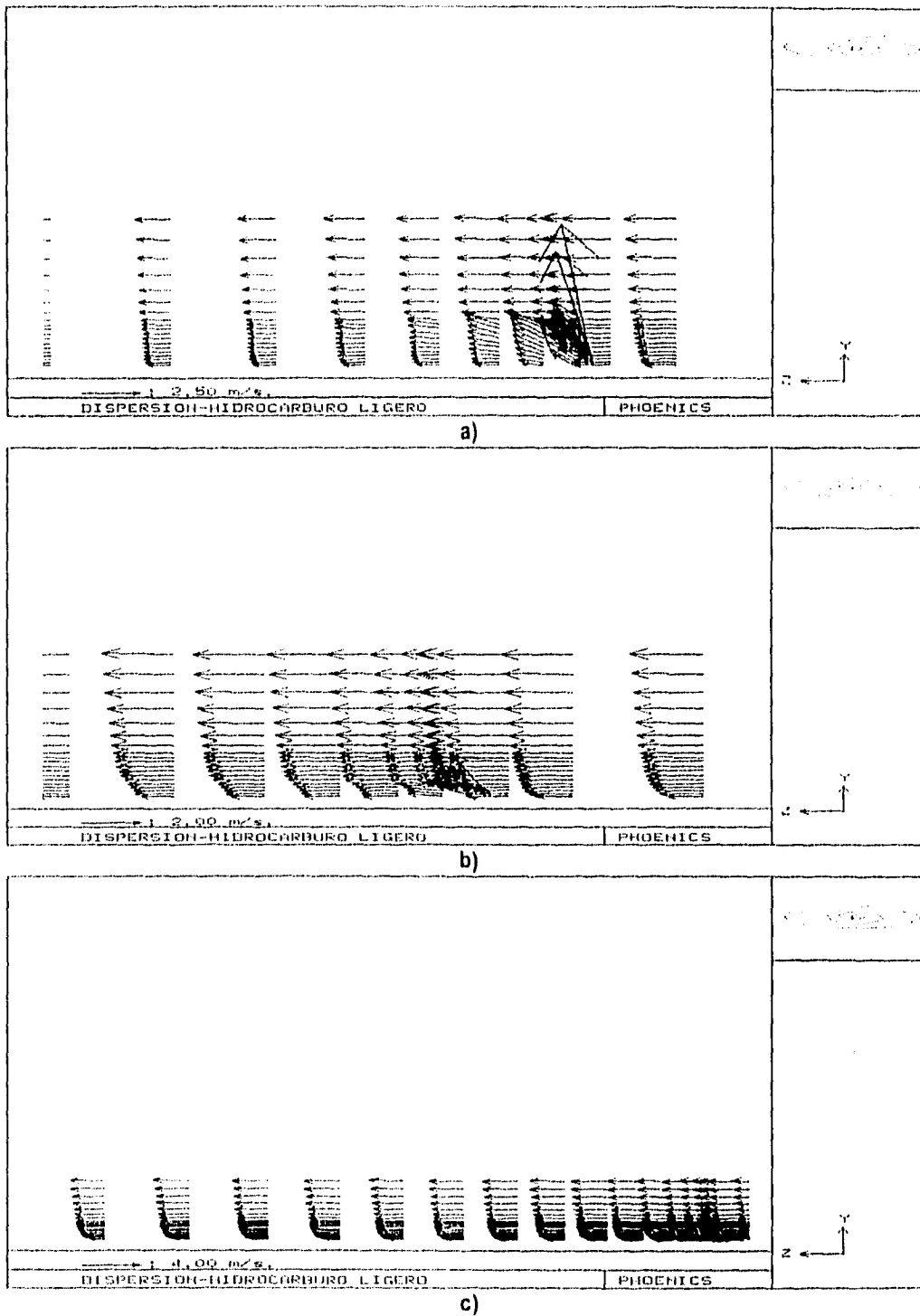


Figura 4.8 Vectores de velocidad durante una descarga de metano a una atmósfera neutra (a)1,305 s; b)4,875 s; c)9,000 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 5,000 s.).
 Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; Longitud de la tubería L=25,523 m.

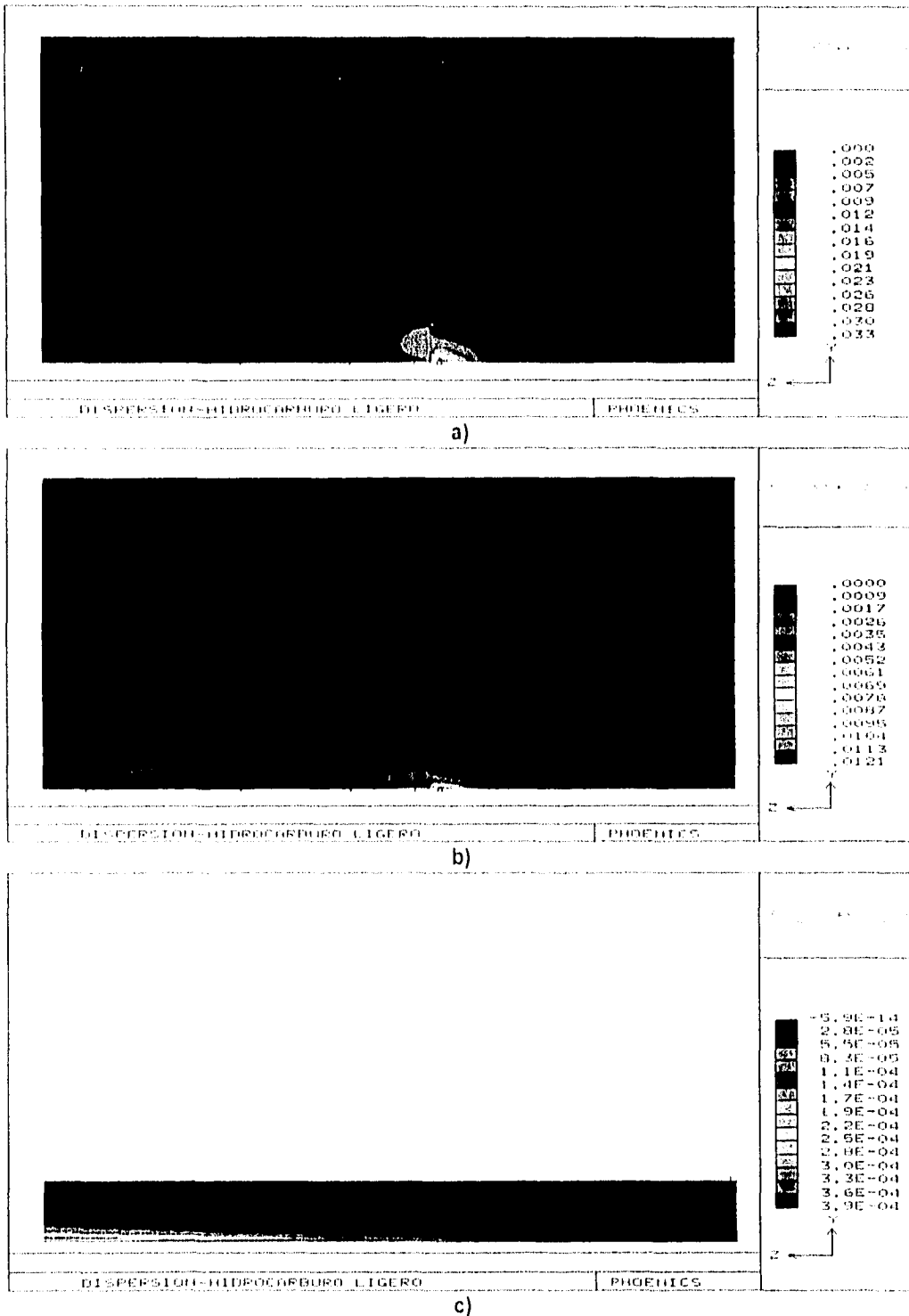


Figura 4.9 Concentración de metano durante su descarga a una atmósfera neutra. (a)1,305 s;b)4,875 s;c)9,000 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 5,000 s.).
 Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; L=25,523 m.

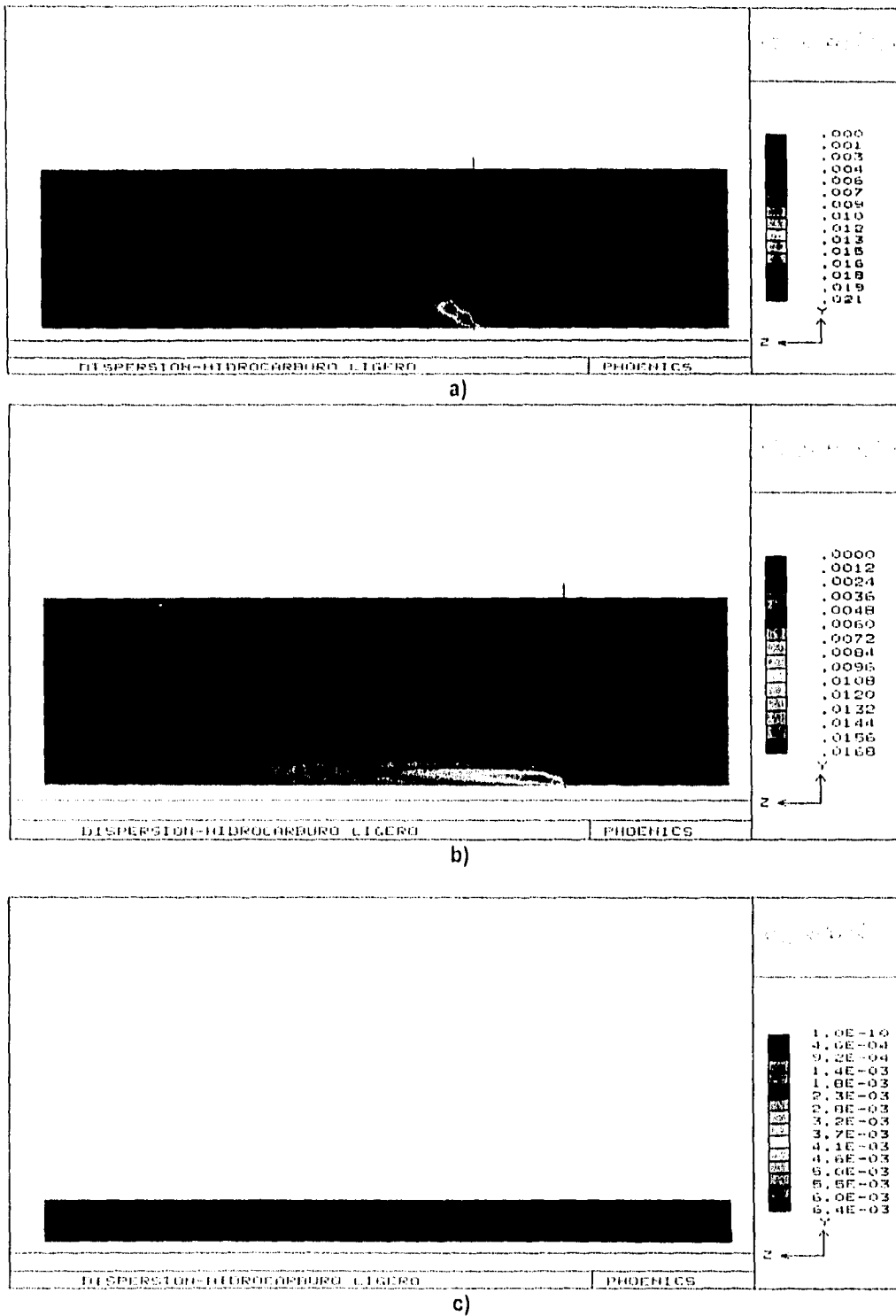


Figura 4.10 Perfil de energía cinética turbulenta, en el plano central de la pluma, durante su descarga a una atmósfera neutra. (a)1,305 s;b)4,875 s;c)9,000 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 5,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; L=25,523 m.

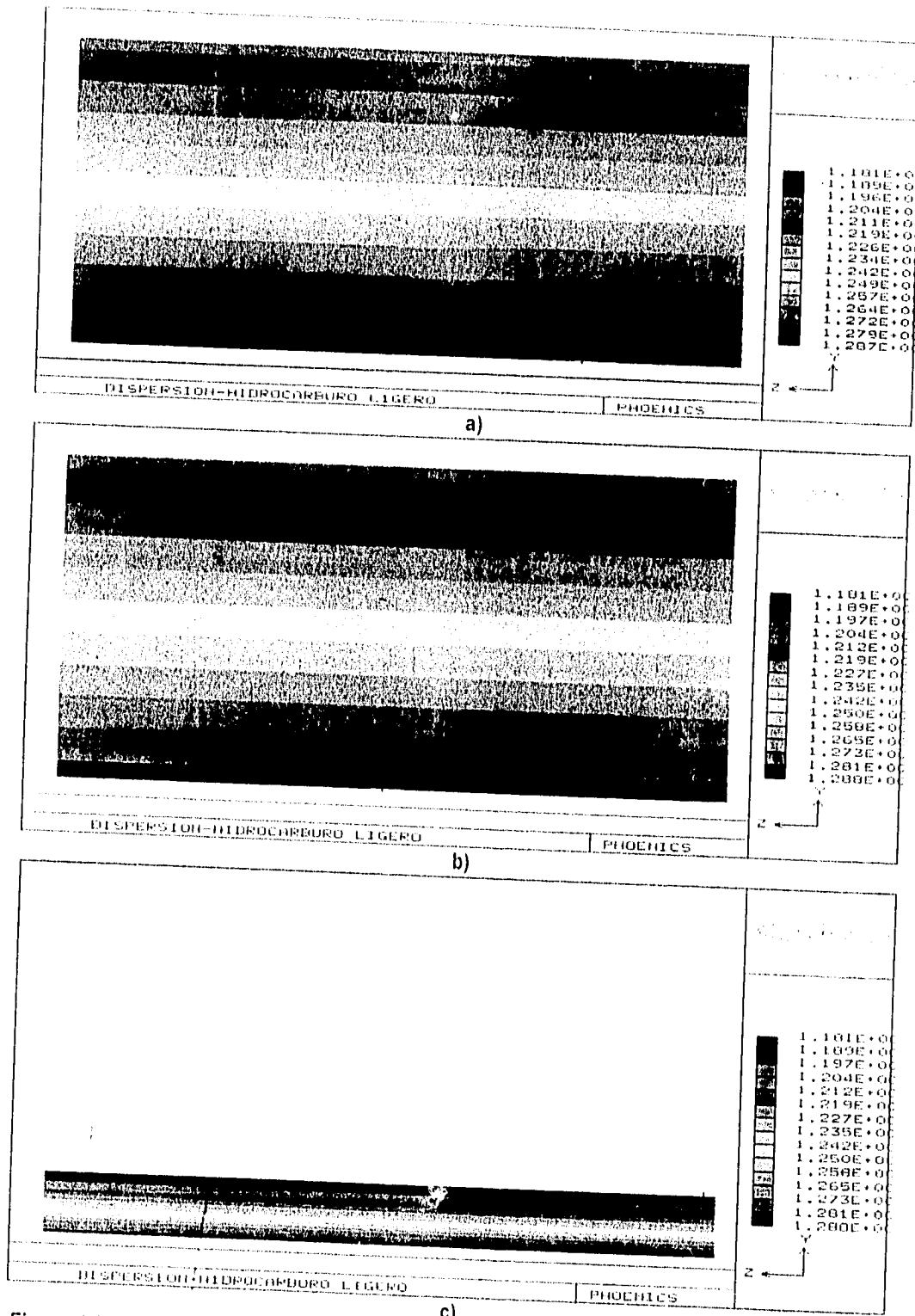


Figura 4.11 Perfil de densidad de la mezcla aire-metano durante la descarga a una atmósfera neutra. (a)1,305 s; b)4,875 s; c)9,000 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 5,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; AT descarga = 0.0 K;L= 25,523 m.

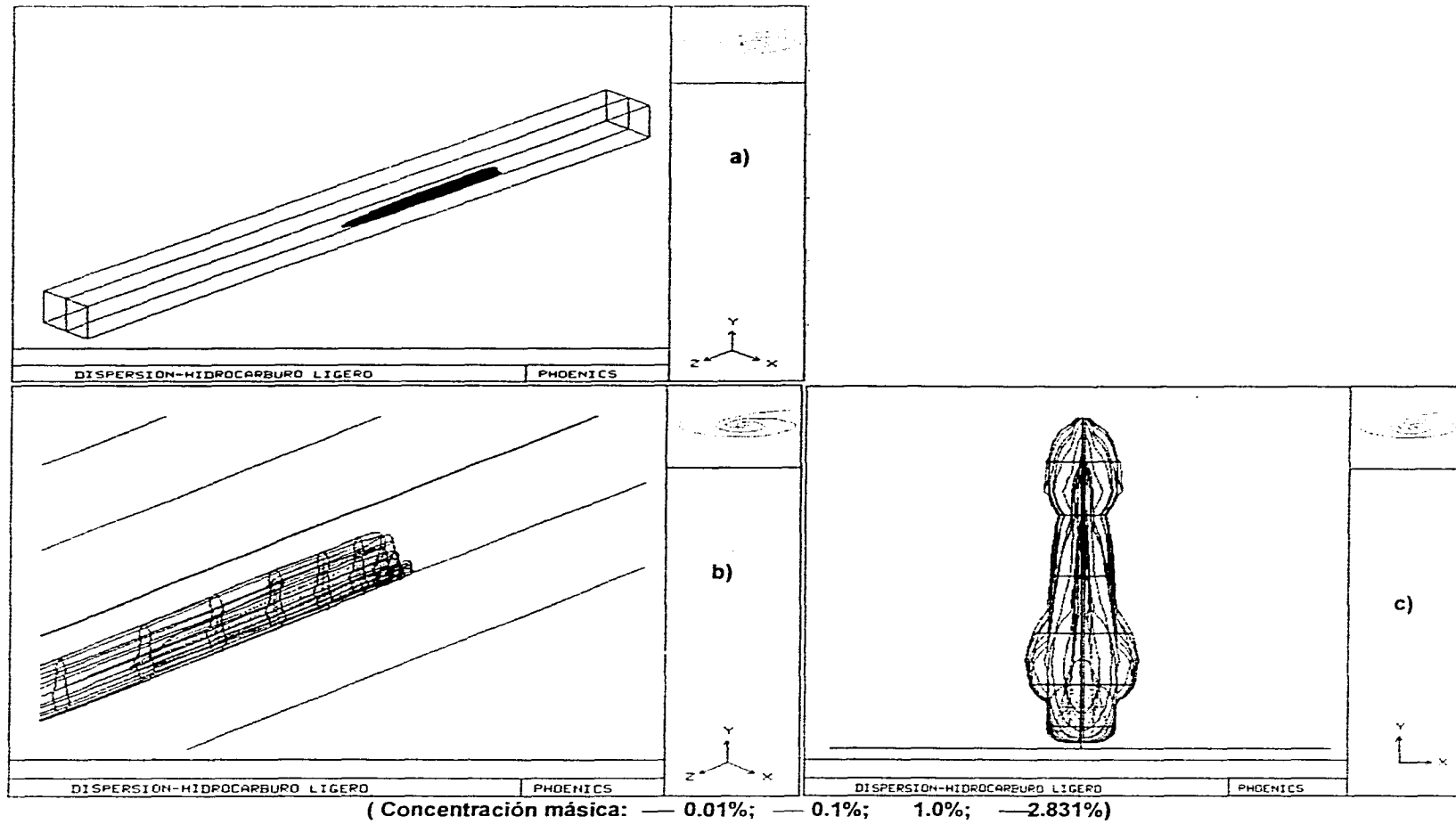


Figura 4.12 Líneas de iso-concentración de metano después de 1,305 s de iniciada la descarga a una atmósfera neutra. a) Vista global tridimensional; b) Acercamiento a la vista 3D; c) Corte transversal de la pluma. Velocidad del viento 1 m/s; $\Delta T_{\text{descarga}} = 0.0 \text{ K}$; $L = 25,523 \text{ m}$.

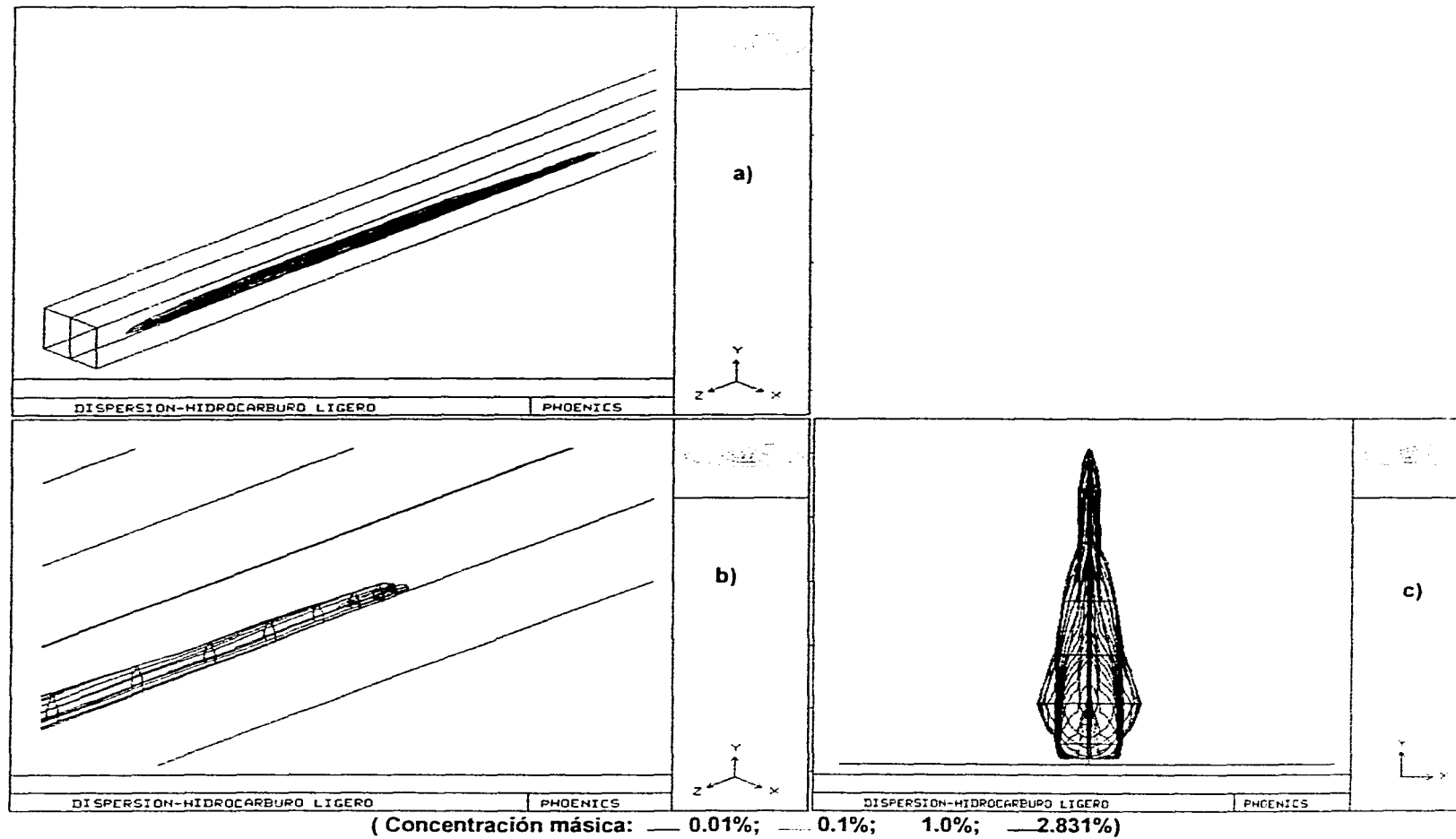
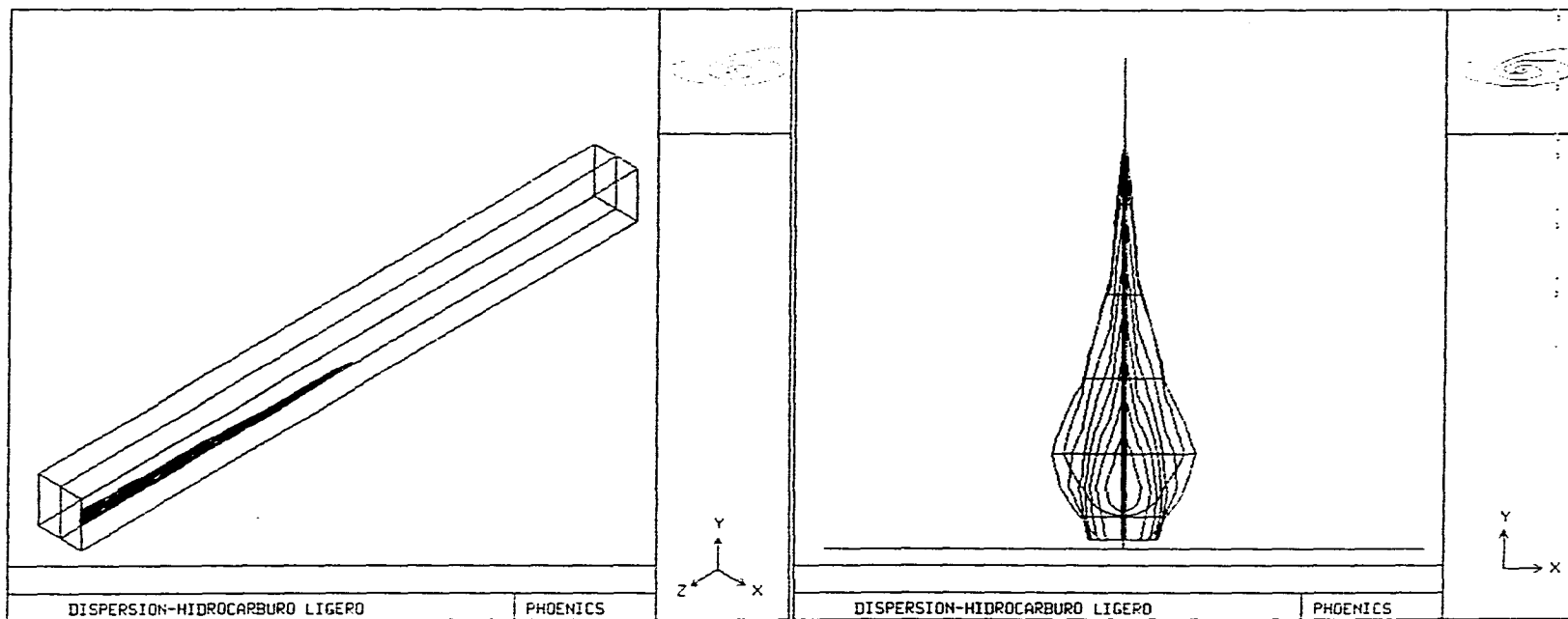


Figura 4.13 Líneas de iso-concentración de metano después de 4,875 s de iniciada su descarga a una atmósfera neutra. a) Vista global tridimensional; b) Acercamiento a la vista 3D; c) Corte transversal. Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; L=25,523 m.



a)

b)

(Concentración mástica: — 0.01%; — 0.1%; 1.0%; —2.831%)

Figura 4.14 Líneas de iso-concentración de metano después de 9,000 s de iniciada su descarga a una atmósfera neutra. a)Vista global tridimensional; b)Corte transversal. Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; L=25,523 m.

EVA ROSA DE LOS ANGELES
 2014

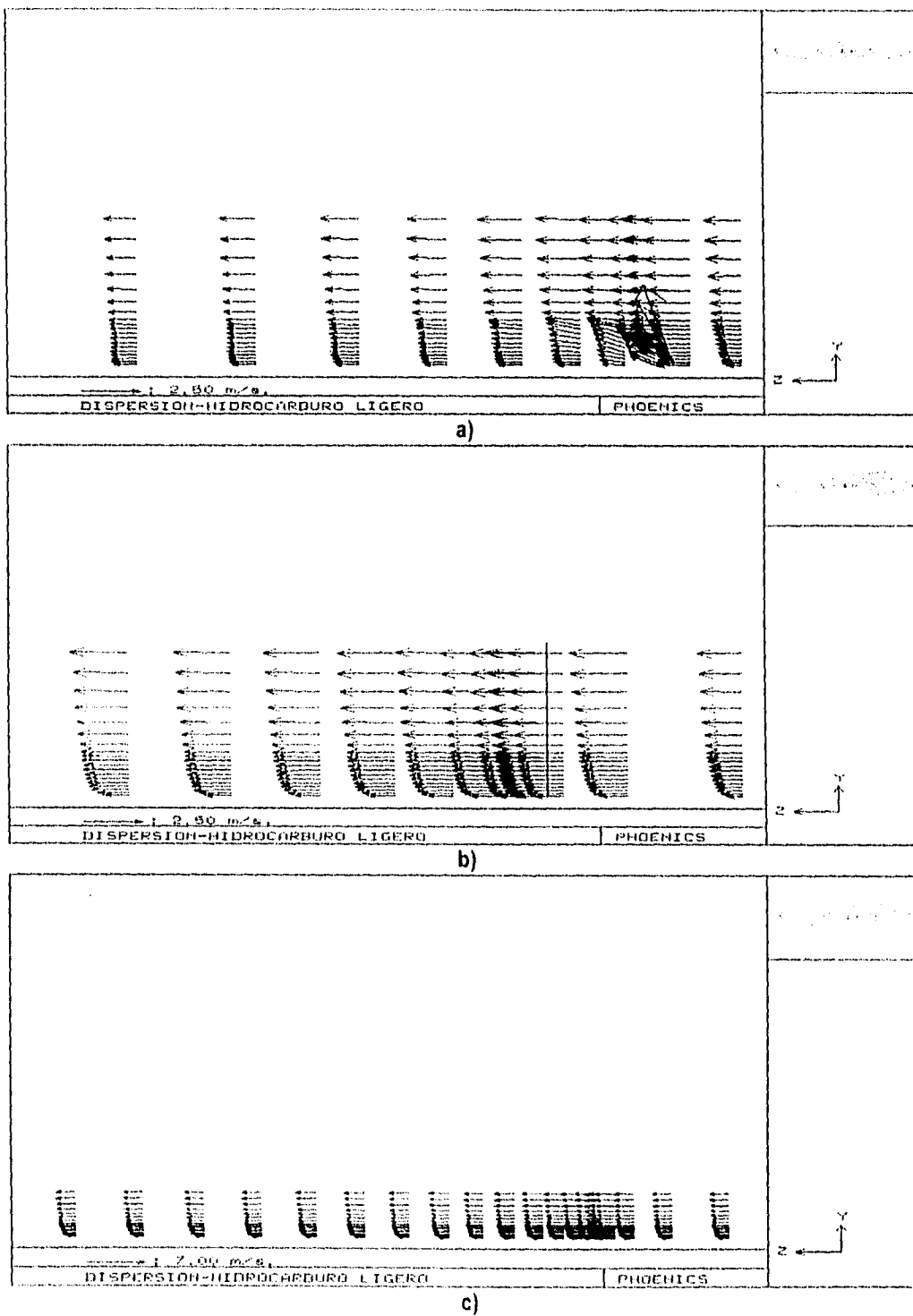
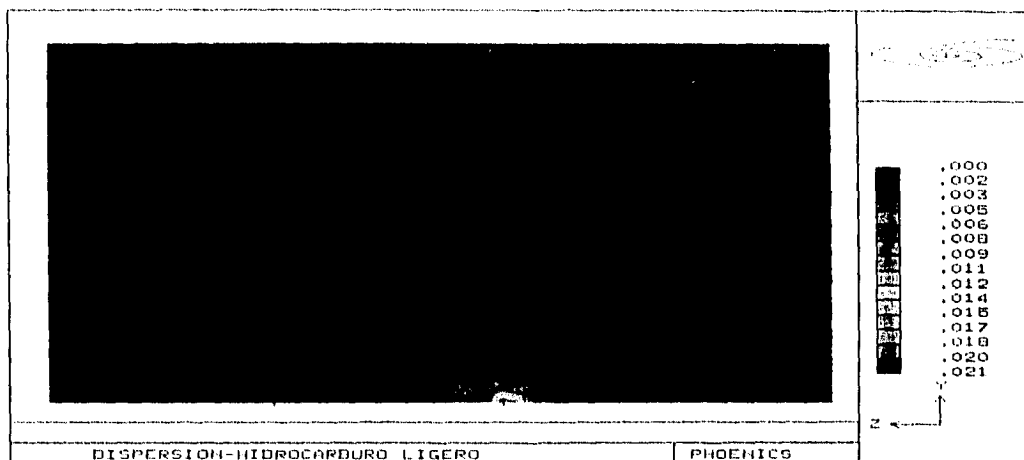
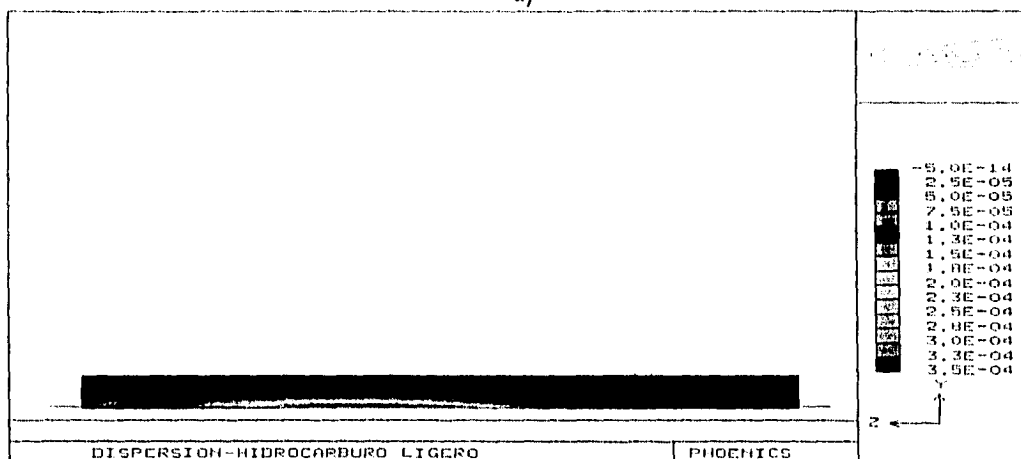


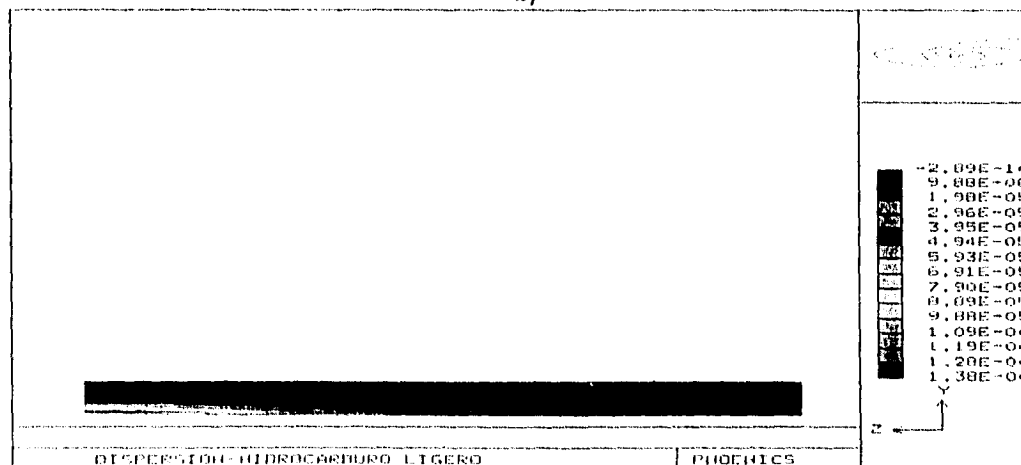
Figura 4.15 Vectores de velocidad durante una descarga de metano a una atmósfera neutra (a) 1,305 s; b) 4,875 s; c) 9,000 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 5,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; Longitud de la tubería $L=12,761.5$ m.



a)



b)



c)

Figura 4.16 Concentración de metano durante su descarga a una atmósfera neutra. (a)1,305 s;b)4,875 s;c)9,000 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 5,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; L=12,761.5 m.

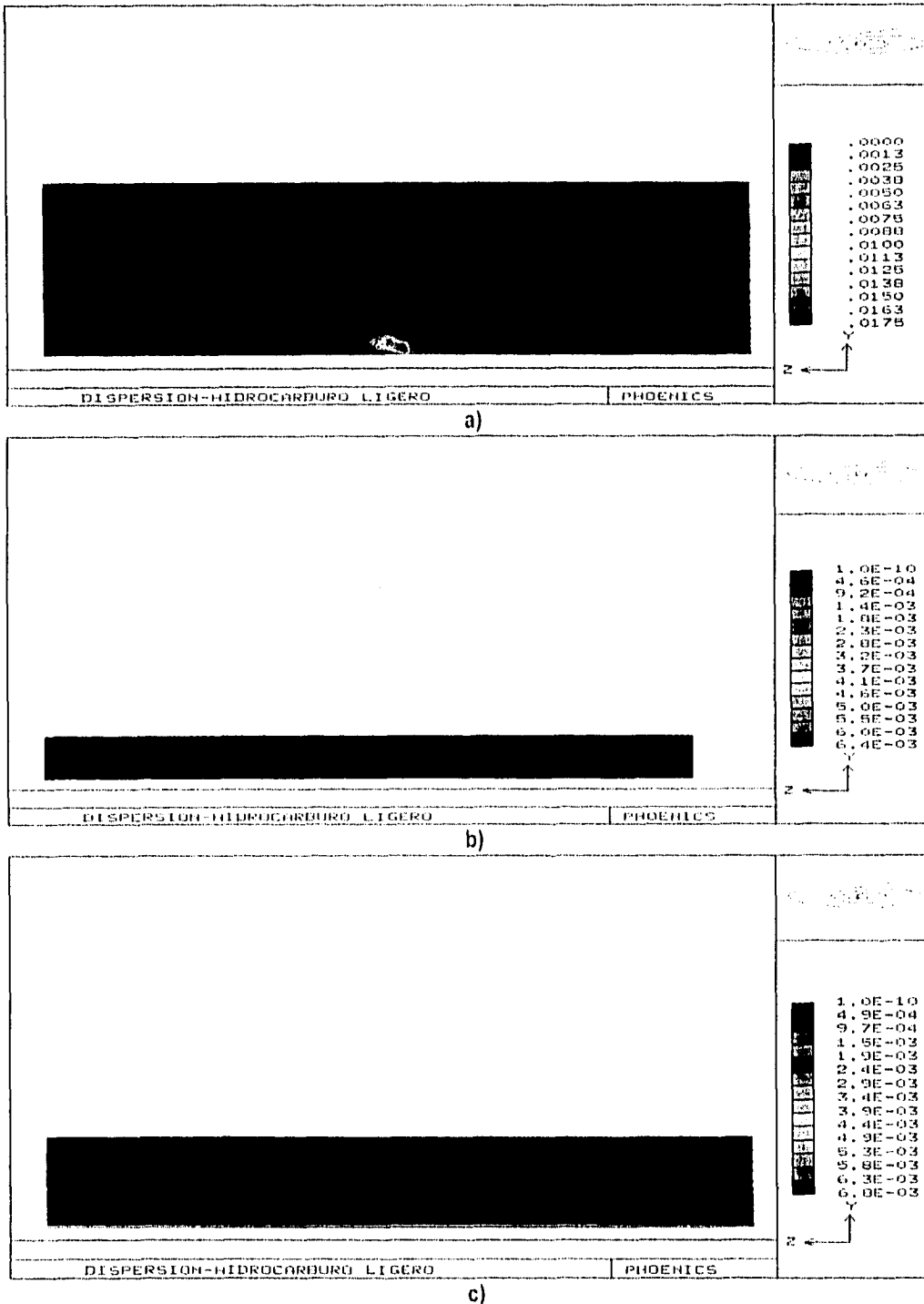
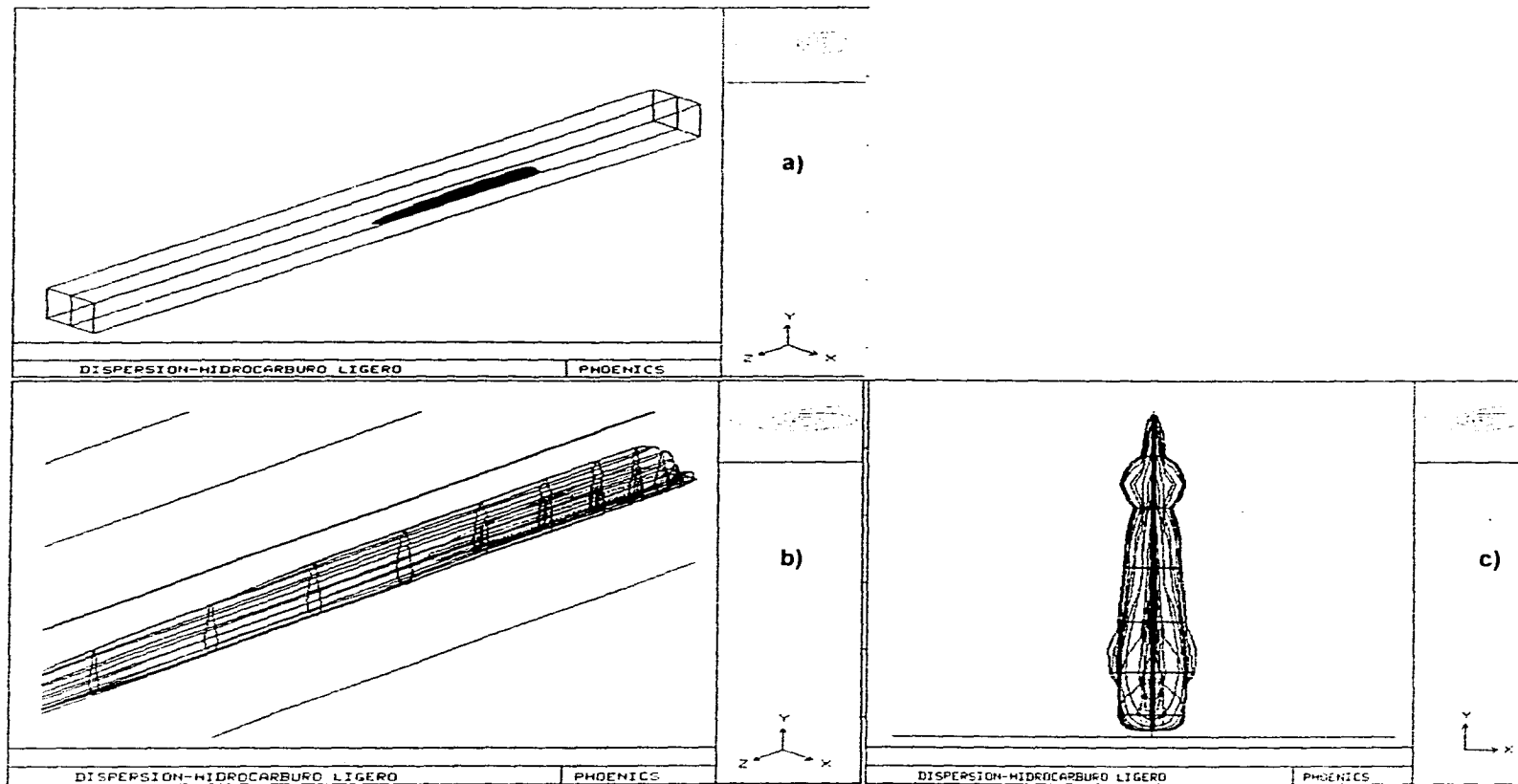


Figura 4.17 Perfil de energía cinética turbulenta, en el plano central de la pluma, durante su descarga a una atmósfera neutra. (a)1,305 s;b)4,875 s;c)9,000 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 5,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; $L=12,761.5$ m.



(Concentración másica: — 0.01%; — 0.1%; — 1.0%; — 2.831%)

Figura 4.18 Líneas de iso-concentración de metano después de 1,305 s de iniciada su descarga a una atmósfera neutra. a) Vista global tridimensional; b) Acercamiento a la vista 3D; c) Corte transversal. Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; $L=12,761.5$ m.

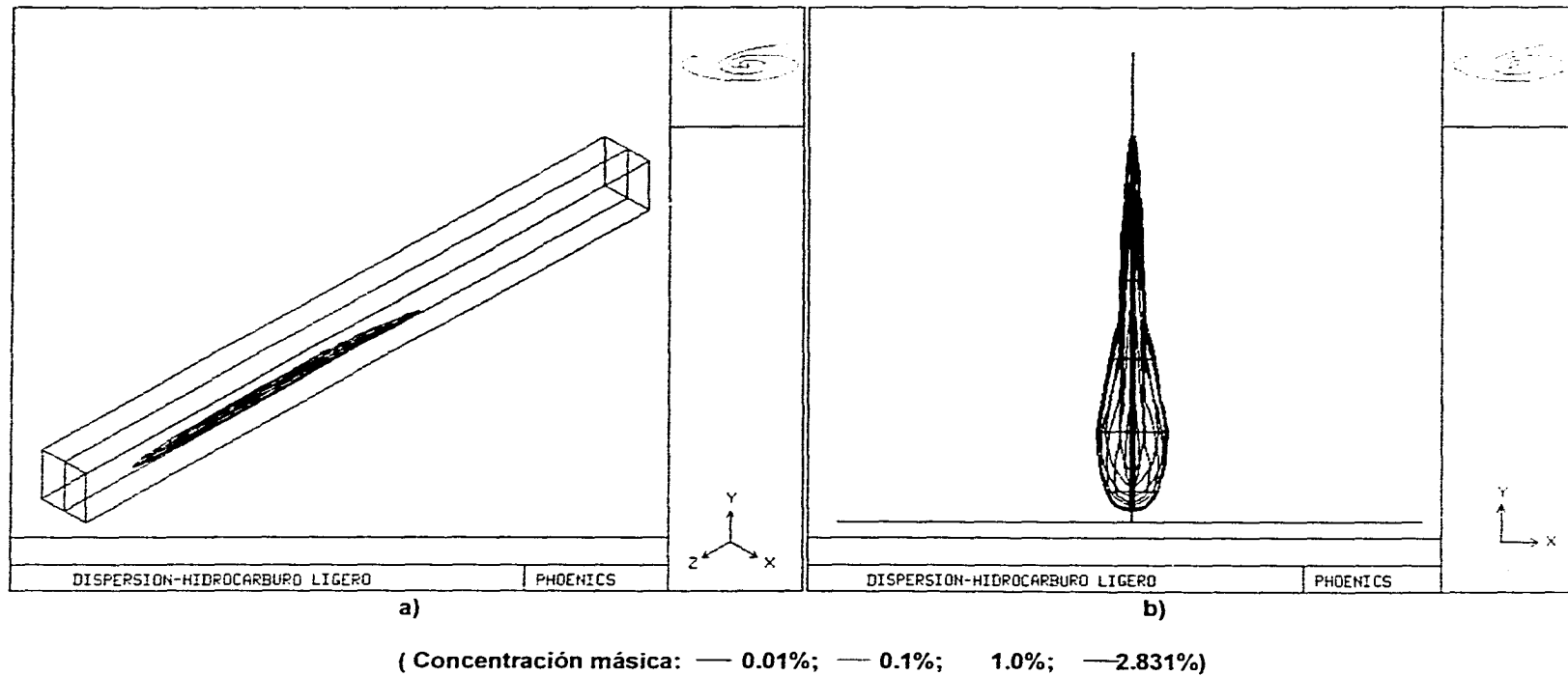


Figura 4.19 Líneas de iso-concentración de metano después de 4,875 s de iniciada su descarga a una atmósfera neutra. a) Vista global tridimensional; b) Corte transversal. Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; L=12,761.5 m.

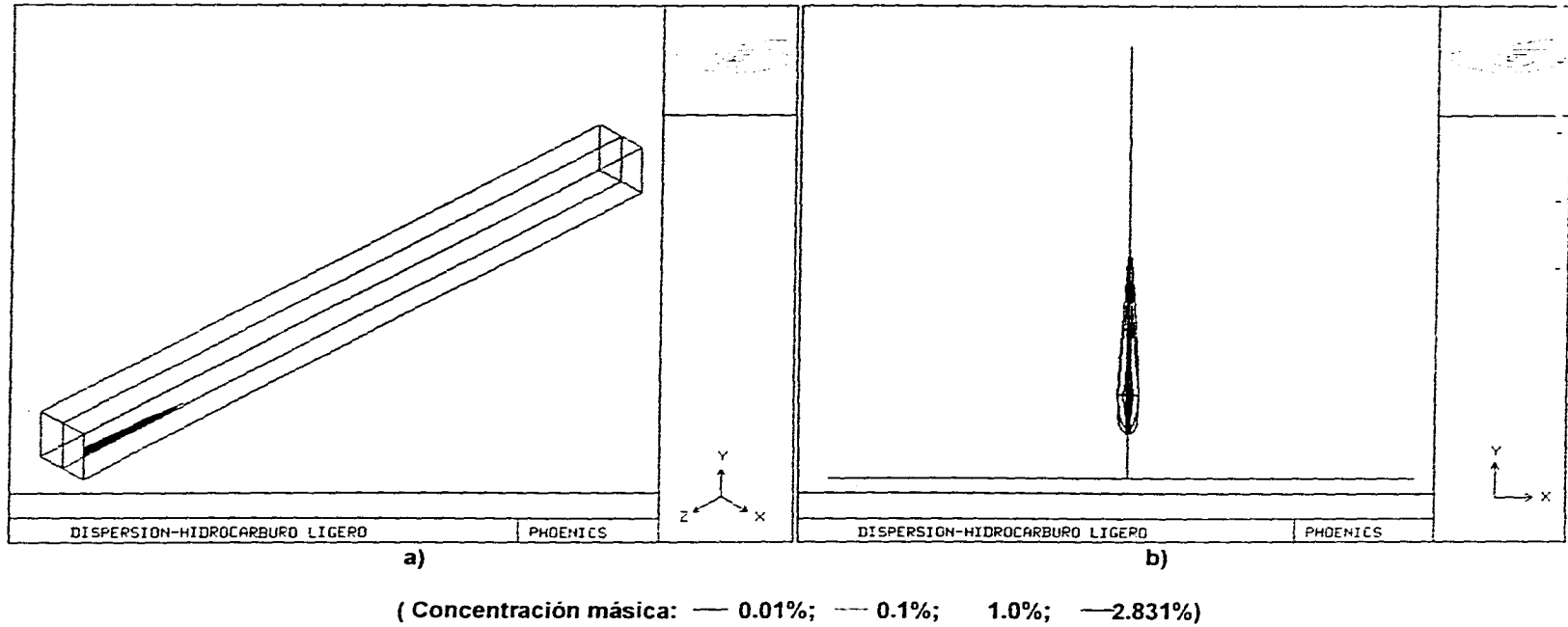


Figura 4. 20 Líneas de iso-concentración de metano después de 9,000 s de iniciada su descarga a una atmósfera neutra. a)Vista global tridimensional; b)Corte transversal. Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; L=12,761.5 m.

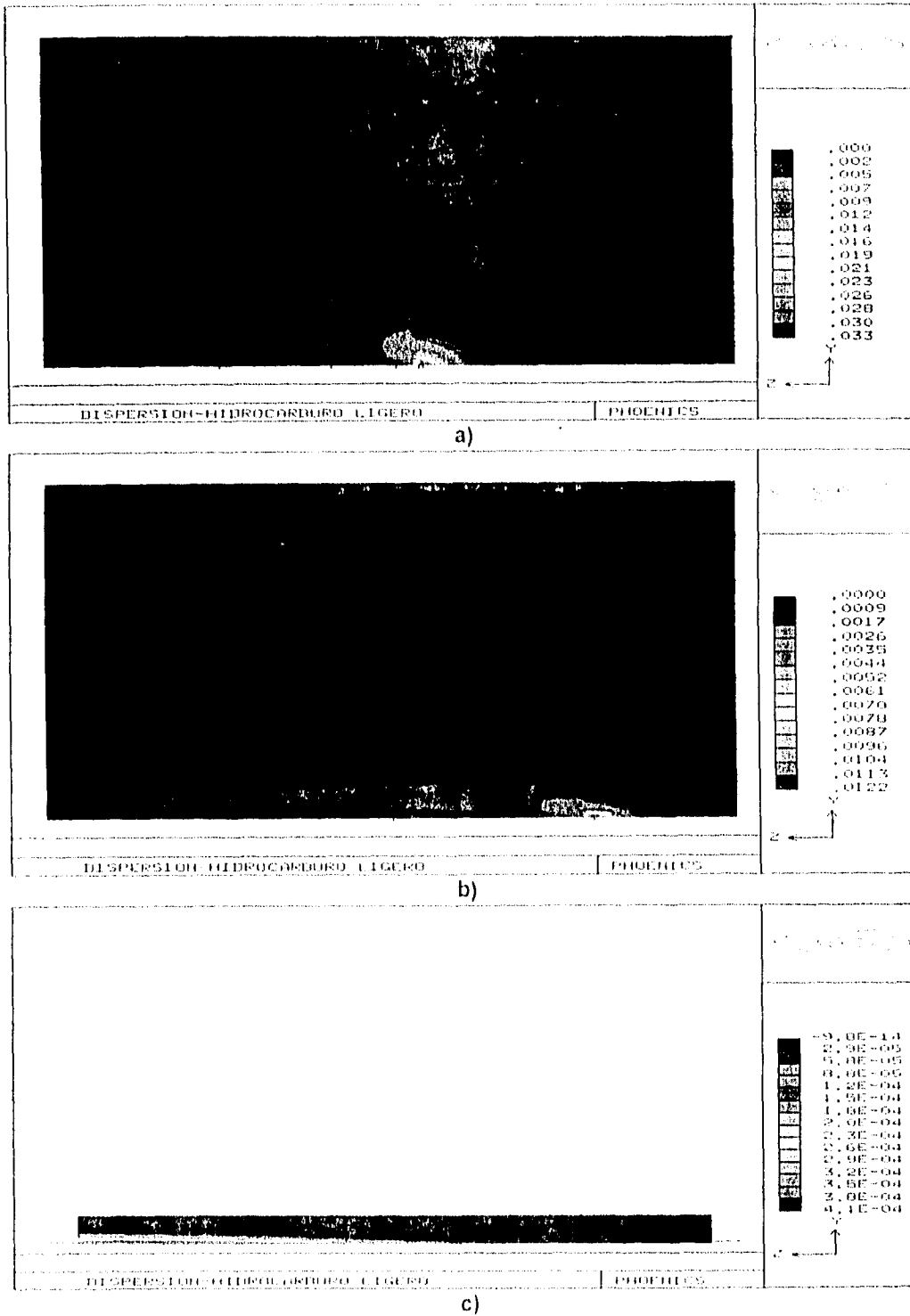


Figura 4.21 Concentración de metano durante su descarga a una atmósfera neutra. (a)1,305 s; b)4,875 s; c)9,000 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 5,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = -15.0 K; L=25,523 m.

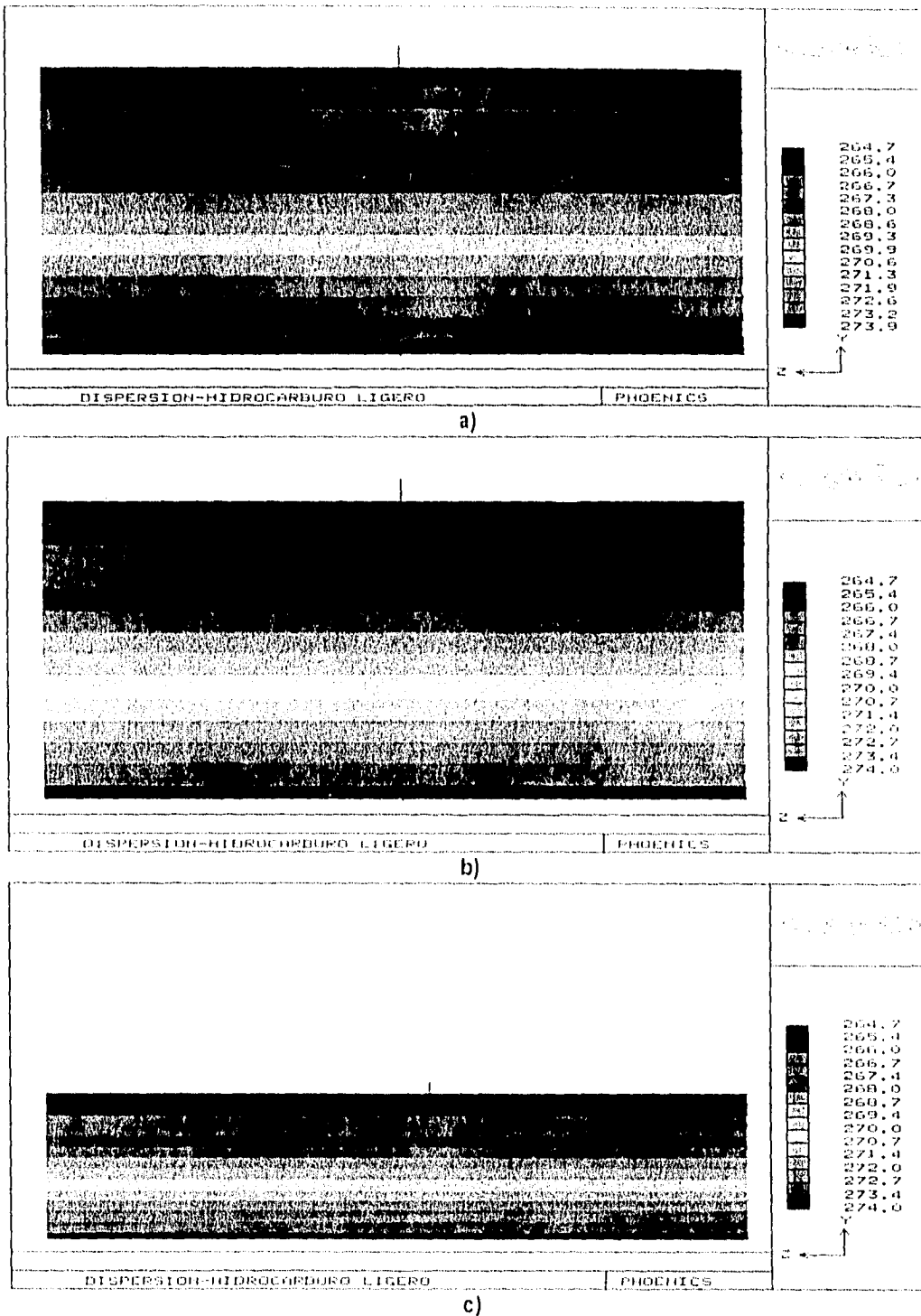
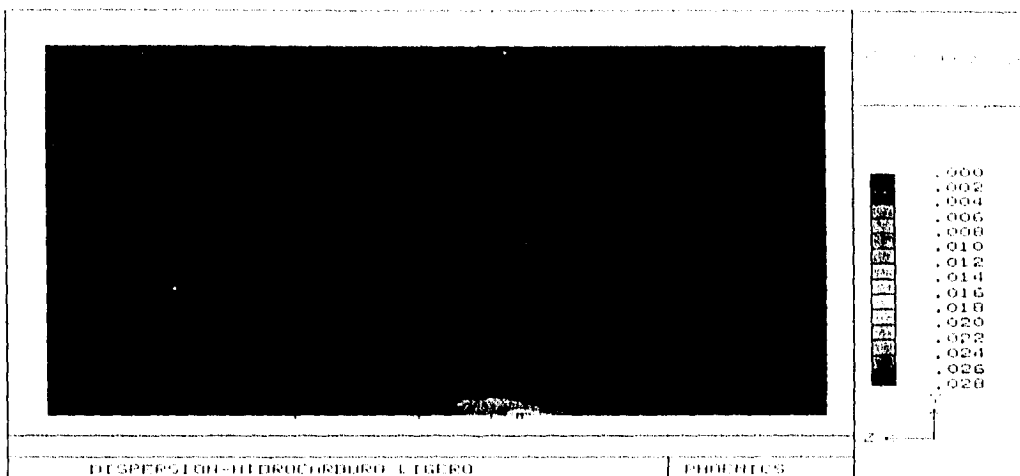


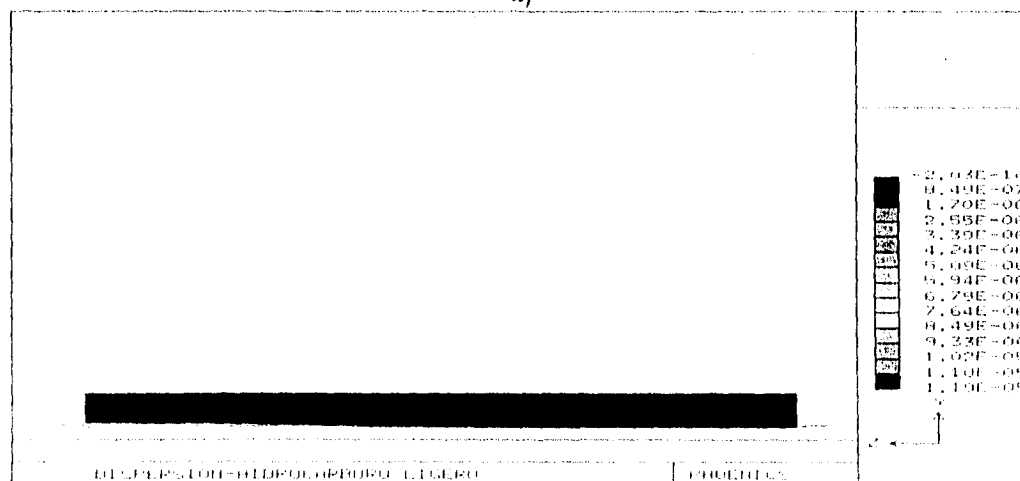
Figura 4.22 Perfil de temperatura durante la descarga de propano a una atmósfera neutra. (a)1,305 s; b)4,875 s; c)9,000 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 5,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = -15.0 K; L=25,523 m.



a)



b)



c)

Figura 4.23 Concentración de metano durante su descarga a una atmósfera neutra. (a)1,305 s; b)4,875 s; c)9,000 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 5,000 s.). Velocidad del viento 3 m/s; AT descarga = 0.0 K; L=25,523 m.

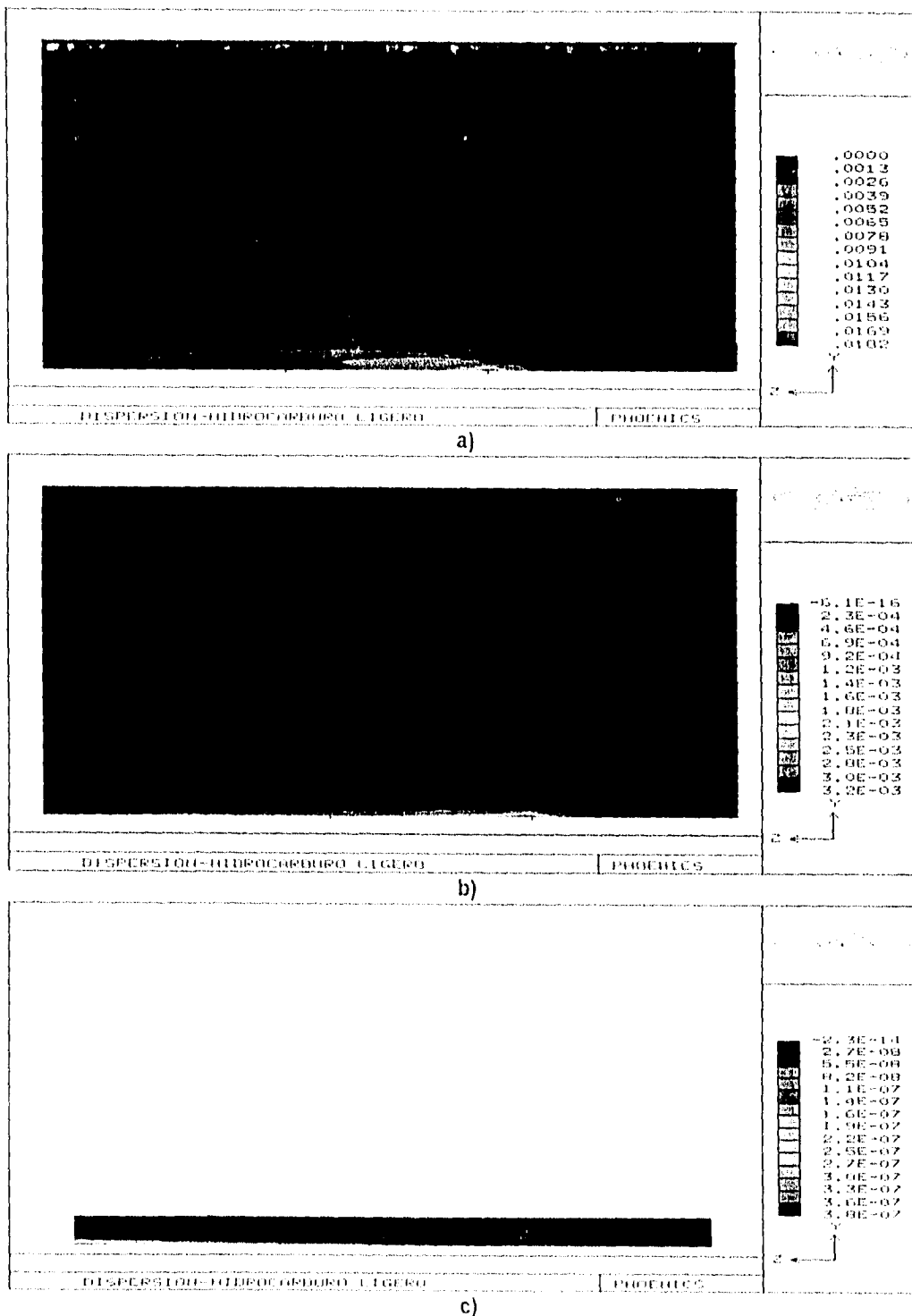


Figura 4.24 Concentración de metano durante su descarga a una atmósfera neutra. (a)1,305 s; b)4,875 s; c)9,000 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 5,000 s.). Velocidad del viento 6 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; L=25,523 m.

4.2 ACCIDENTE EN UNA LÍNEA DE TRANSPORTE DE PROPANO

También se realizó la simulación en un accidente de una línea de transporte de propano, para varias condiciones de descarga. Dicho accidente involucraba a una línea de transporte con la siguientes características (ver figura 2.7)

D_p	L	A_{th}	T_i	P_i
0.287 m	30,000 m	0.0647 m ²	294.4K	8.5 bar

El propano es conducido en forma líquida a través de ductos. Así entonces, el modelo de descarga empleado para la simulación fue el modelo de descarga bifásica desarrollado por Fairuzov, et al. /43/, descrito anteriormente en el capítulo 2, ver figura 4.25.

4.2.2 Modelo de dispersión

Al igual que en el accidente de la línea de metano, se simuló un accidente empleando el modelo numérico descrito en el capítulo tres, pero realizando las siguientes consideraciones:

- Se considera que el líquido se ha evaporado por completo en el extremo de la ruptura, descargándose así puro gas.
- La descarga se realiza hacia una atmósfera neutra.
- Las condiciones iniciales y de frontera se muestran en el capítulo 3.
- Las propiedades del fluido se calculan como aquellas existentes en una mezcla de gases ideales (aire-propano).
- Se empleó el modelo de turbulencia k- ϵ estándar.

4.2.3 Casos a simular

Se simularon un total de 6 distintos tipos de accidentes de descarga de propano a una atmósfera neutra.

La tabla 4.2 muestra las condiciones bajo las cuales se simularon dichos casos.

Fairuzov, Erosa y Rosas /45/ reportan que durante la descarga bifásica de propano, existe una disminución importante en la temperatura de éste, de hasta -30 K, por lo que sería importante observar la influencia, si existiera alguna, de dicha caída de temperatura sobre la dispersión del gas fugado.

Tabla 4.2 Condiciones de la descarga de propano a una atmósfera neutra

Caso	Velocidad del viento (m/s)	ΔT ($T_{amb} - T_{descarga}$) (K)	Longitud de la tubería (km.)
1	1	0	30
2		-30	30
3	3	0	30
4		-30	30
5	6	0	30
6		-30	30

4.2.4 Resultados

La velocidad másica de la descarga de propano, utilizando el modelo bifásico /43/, puede ser observada de la figura 4.25. El tiempo total de la descarga bifásica dura 50,000 s.

Al igual que para el accidente de una línea de metano, las figuras 4.2 a, 4.2 b y 4.3 muestran el dominio computacional empleado para la simulación numérica del accidente.

Las condiciones, iniciales y del dominio, de campo de velocidad, densidad, energía cinética turbulenta (k_e), rapidez de disipación de la energía, son las mismas que las que se muestran en las figuras 4.4, 4.5, 4.6a y 4.6b (Grundberg /31/). La figura 4.7 muestra el perfil de temperatura de la atmósfera simulada (neutra).

Caso No. 1

El desarrollo de los vectores de velocidad para este caso se muestran en la figura 4.26. La velocidad de la descarga puede ser observada en la figura 4.25 b.

En la figura 4.27 se puede observar la distribución de concentraciones de metano, en la línea central de la pluma. En ésta se observa que el propano descargado, se eleva hasta una cierta altura equivalente a la energía (por unidad de masa) obtenida de la suma de los efectos por cantidad de movimiento del chorro, convección del viento, turbulencia generada por el chorro, flotación debida a la diferencia de densidades, turbulencia atmosférica, fricción, y difusión de masa.

En un principio, la cantidad de movimiento (fig. 4.27a) y turbulencias (fig. 4.29a) generadas por el chorro son la principal fuente de la energía (por unidad de masa); pero conforme dicha fuente se ve disminuida (fig. 4.27 b) los efectos causados por la flotabilidad de la mezcla, la turbulencia atmosférica y la fricción llegan a ser los predominantes. Esto debido a que el propano es más pesado que el aire, y al ser éste mezclado con el aire, dicha mezcla tiende a descender. Lo anterior es más fácil de entender observando la figura 4.28. Dicha figura muestra la distribución de la densidad en el plano central de la pluma, para el dominio en estudio. Después de un tiempo de iniciada la descarga, 3,470 s después de iniciada la ruptura, se observa la influencia del chorro sobre la atmósfera cercana, pero a medida que la intensidad del chorro disminuye, la mezcla aire-propano tiende a caer casi de inmediato, fig. 4.28b, para así finalmente permanecer pegada a la superficie terrestre. De ahí que para éste caso la turbulencia atmosférica, la fricción y la flotabilidad jueguen un papel importante durante la simulación de la dispersión del gas.

No obstante que éstos últimos parámetros no llegan a ser importantes durante los primeros instantes de la descarga, dichos efectos llegan a tener mayor importancia que los inerciales o de turbulencia generados por el chorro en los últimos instantes de la misma.

Una vez terminada la descarga, la nube de gas fugado se mueve en dirección corriente abajo del rompimiento, hasta dispersarse completamente.

Las figuras 4.30, 4.31 y 4.32 ilustran la evolución tridimensional de la pluma de propano, mediante iso-líneas de concentración. También en dichas figuras se muestran los cortes transversales del desarrollo de la pluma.

Durante los primeros instantes, fig. 4.30, se observa en la zona cercana a la descarga una gran influencia por parte de la cantidad de movimiento y turbulencia generadas por el chorro.

De ahí que en ésta zona la pluma tenga una sección transversal ancha.

Pero a medida que la nube de gas va cayendo a lo largo del dominio, la sección central de la pluma se ve adelgazada. Ya que la nube de gas no puede elevarse, por ser más pesada que

el aire, ésta empieza a dispersarse mayormente en la dirección transversal, hasta ocupar casi todo el espesor del dominio en estudio (ver figs. 4.30 a y 4.30 b).

Conforme el tiempo pasa, la descarga de gas se ve disminuida, por lo que la mayor influencia ejercida sobre la dispersión del gas en el dominio, la generan principalmente la convección del viento, la flotación y la turbulencia. En la figura 4.31 se observa lo escrito anteriormente, ya que la altura y espesor de las grandes concentraciones se ven reducidas. Y el espesor de las plumas de menores concentraciones se ve incrementado en la parte cercana al suelo, sin olvidar los efectos causados por la inercia de la pluma.

Finalmente, el fin de la descarga se ve totalmente influenciado por la disminución y terminación de ésta. Ya que a medida que dicho efecto se ve nulificado (ver figura 4.31), el espesor de la pluma se va reduciendo, hasta desaparecer. Por lo que el gas contenido en el dominio empieza a dispersarse mediante los procesos de convección del viento, inercia de la nube y difusión de masa. De ahí que la pluma se mueva en dirección corriente abajo del rompimiento, hasta dispersarse totalmente.

De las figuras 4.30, 4.32 y 4.32, también puede observarse que el perfil de la pluma es semejante al perfil logrado mediante modelos gaussianos. Esto es debido, principalmente, a que la superficie terrestre modelada es plana, además de que solamente se cuenta con una fuente de descarga.

Cabe señalar que, al igual que para el metano, existe una zona cercana, corriente arriba de la ruptura, en donde se observa una concentración de masa importante (aún cuando la principal causa de la dispersión es el fenómeno convectivo del viento). Dicho fenómeno es atribuido al de transporte de masa (difusión) hacia la zona mencionada.

Caso No. 2

Al igual que para el metano, con la finalidad de observar la influencia de la diferencia de temperatura existente, entre la descarga y la atmósfera, se simuló este caso.

El desarrollo de la pluma se muestra en la figura 4.33 y el perfil de temperatura en el plano central de la pluma se muestra en la figura 4.34.

En un principio, 3,470 s después de iniciada la descarga (fig. 4.34 a), se observa que existe una muy ligera influencia de la temperatura sobre la zona afectada por la descarga (de entre 3 y 4 K); pero posteriormente dicha influencia llega a desaparecer (figs. 4.34 b y 4.34 c). Si se comparan las figuras 4.33 y 4.27, se observa que no existe una mínima diferencia en los contornos de concentración. Por lo que podemos considerar que es posible simular una descarga de un hidrocarburo despreciando los efectos por diferencia de temperatura en la zona de la descarga.

Para los casos 4 y 6, en donde también se involucró una diferencia de temperatura para la descarga, se observaron resultados parecidos al descrito arriba.

Caso No. 3

Con la finalidad de observar la influencia del efecto convectivo del viento sobre la evolución y dispersión de la pluma de propano, se modificó la condición de velocidad del viento en el dominio en estudio.

Aquí se tienen las mismas condiciones que las empleadas en el caso No. 1, pero con la diferencia de que la condición de velocidad de viento es mayor, 3 m/s.

Los resultados de la simulación se muestran en la figura 4.35. En ésta se observa cómo el efecto convectivo ejerce una influencia sobre la pluma, no permitiendo que se eleve a la misma altura que para el caso No. 1, y a medida que el tiempo pasa, fig. 4.35 b y 4.35 c, dicho factor llega a ser uno de los más predominantes.

Caso No. 5

Este caso es similar al No. 3, pero aquí la condición de viento se modificó a una condición de viento moderado-alto, 6 m/s.

La figura 4.36 muestra la evolución de la distribución de la concentración de la pluma.

Debido al gran efecto convectivo del viento, la pluma permanece casi pegada al suelo, fig. 4.36 a. Y a medida que el tiempo pasa, la pluma se cae aún más, figs. 4.36 b y 4.36c.

Por lo que la condición de viento moderado-alto, al igual que para el metano, es un factor de gran influencia sobre la evolución de la pluma y dispersión del gas en la atmósfera.

Desplazamiento de la Frontera Baja de Inflamabilidad (propano)

Debido al alto riesgo existente durante la fuga del gas, por una posible explosión en la zona cercana a la ruptura, es necesario conocer el área afectada por la descarga en donde prevalecen las condiciones de inflamabilidad del propano.

Por límite de inflamabilidad entendemos: a las condiciones (de concentración, presión y temperatura) bajo las cuales el hidrocarburo, en presencia de aire u otro comburente, puede hacer explosión.

Los límites alto y bajo de inflamabilidad para el propano son 13.77 y 3.16 % respectivamente (concentración másica en presencia de aire, @ P_{atm}).

La frontera baja de inflamabilidad se define como la distancia máxima a la cual podemos encontrar el límite bajo de inflamabilidad. Ya que, para el propano, la frontera alta de inflamabilidad puede ser situada justo en el punto de ruptura.

En las figuras 4.37, 4.38 y 4.39 se puede observar la evolución de la frontera baja de inflamabilidad de la pluma de propano, en una atmósfera neutra.

La figura 4.34 muestra la altura máxima que alcanza la frontera, para varios instantes. En un inicio se cuenta con la mayor altura, debido a que se descarga una mayor cantidad de gas al inicio del proceso. Posteriormente dicha altura se ve disminuida, hasta desaparecer. De esta figura también se puede observar la influencia, por convección, que ejerce el viento sobre la altura de la descarga. Ya que para una condición de viento de 3 m/s, la máxima altura alcanzada se reduce a casi la mitad de la altura máxima alcanzada por la de 1 m/s. Lo mismo ocurre para la condición de viento de 6 m/s, la cual alcanza una altura máxima de casi 1/3 de la altura alcanzada por la pluma sometida a un viento de 1 m/s. Todo lo anterior lleva a deducir que: a mayor velocidad del viento, menor será la altura que pueda alcanzar la pluma descargada.

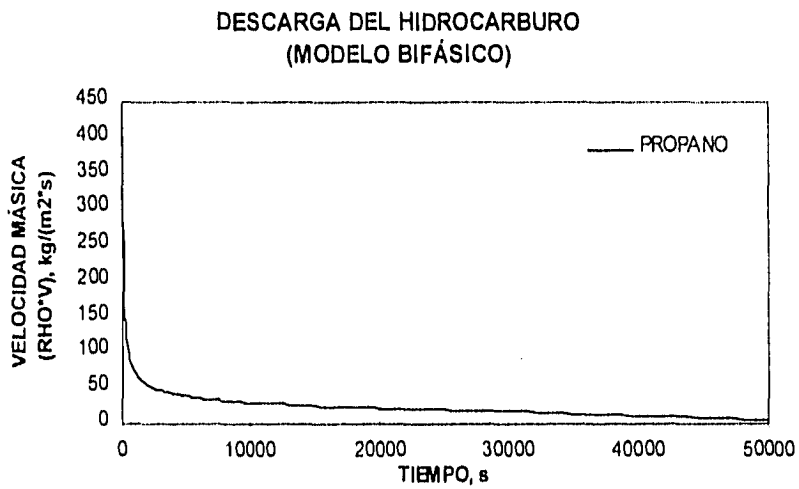
Por otro lado, en la figura 4.35 podemos observar la evolución del radio máximo de la frontera de inflamabilidad respecto al tiempo. Al igual que para la altura máxima de la frontera, se observa que el efecto convectivo juega un papel importante en la propagación transversal de la pluma. Ya que en la medida que la descarga de gas se ve disminuida, la diferencia existente entre el radio máximo alcanzado por la pluma para una condición de viento de 3 m/s, respecto a la de 1 m/s, llega a ser de la mitad. Mientras que para la condición de viento de 6 m/s, dicha diferencia llega a ser del 100 %.

Finalmente, en la figura 4.36 se muestra la distancia máxima, corriente abajo del rompimiento, alcanzada por la frontera de inflamabilidad. Se observa que la máxima distancia se da para una condición de viento de 1 m/s. Y la mínima, para una condición de viento de 6 m/s.

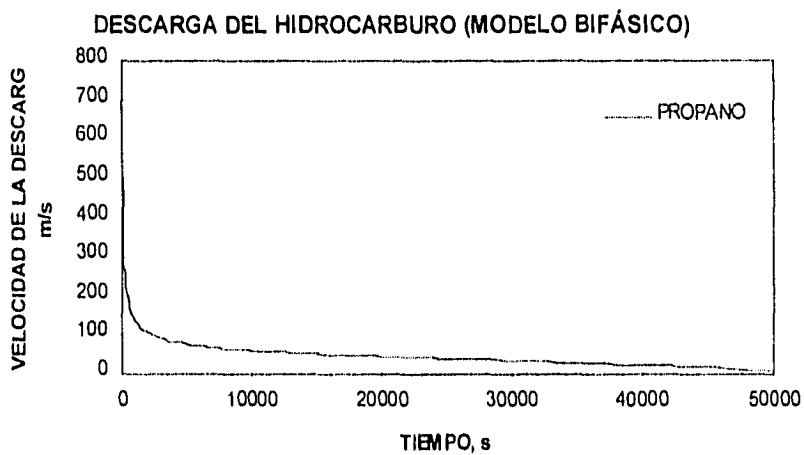
Para la condición de viento de 1 m/s se observa que el efecto convectivo no llega a ser predominante durante los primeros instantes de la descarga, ya que la energía, en forma de cantidad de movimiento, obtenida del chorro es suficiente para poder elevar una nube de gas propano. Pero a medida que dicha cantidad de movimiento se ve disminuida, la nube de gas tiende a caer, teniendo una mayor dispersión en forma transversal y longitudinal, que en la vertical. Cabe mencionar que durante los primeros instantes, la baja convección del viento provoca una baja dispersión del gas en dirección longitudinal. Por lo que en un principio la nube de gas se va moviendo lentamente en dirección corriente abajo de la ruptura. De ahí que durante los primeros 25,000 s no exista un incremento en la distancia máxima de la frontera de inflamabilidad. Una vez que la descarga se ve disminuida, la pluma empieza a caer y a moverse en dirección del flujo, por lo que la frontera de inflamabilidad se ve incrementada (25,000 - 35,000 s de iniciada la descarga). Una vez disminuida y terminada la descarga (35,000 -50,000 s), dicha frontera se ve reducida, al grado de desaparecer.

Algo semejante a lo antes descrito ocurre para las plumas con condiciones de viento de 3 y 6 m/s. Pero para estos casos el efecto convectivo del viento juega un papel importante en el desplazamiento de la frontera, ya que a mayor condición del viento (6 m/s), la distancia máxima de la frontera ocurre en un tiempo relativamente corto, 20,000 s después de iniciada la descarga. Mientras que para la condición de 3 m/s, la distancia máxima de la frontera baja de inflamabilidad ocurre aproximadamente a casi la mitad del tiempo de la descarga, 30,000 s.

Por lo que la propagación de la frontera baja de inflamabilidad depende en gran medida de las condiciones, de descarga y velocidad de viento, predominantes en el medio simulado.

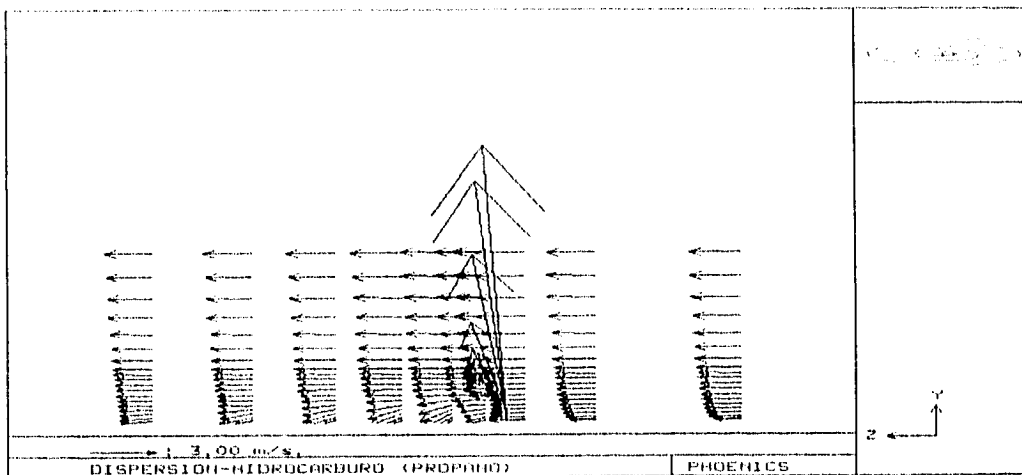


(a)

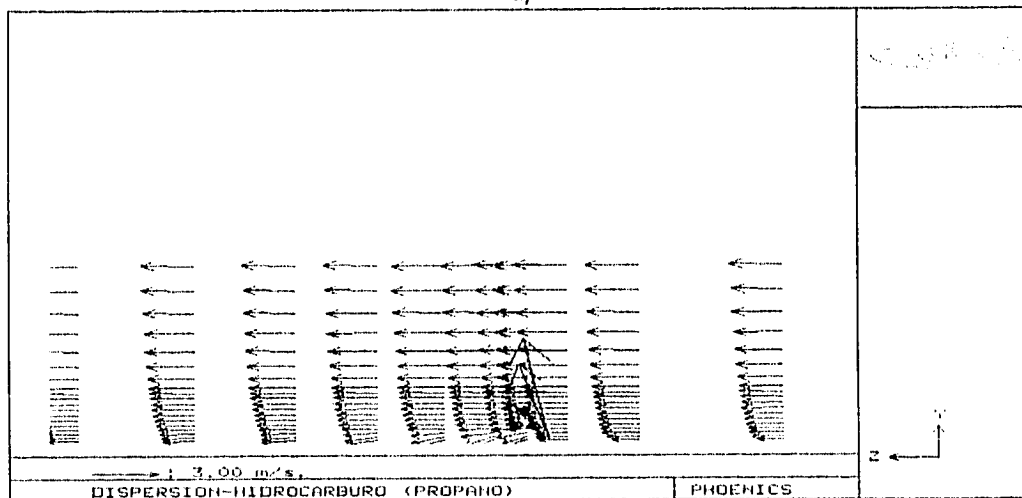


(b)

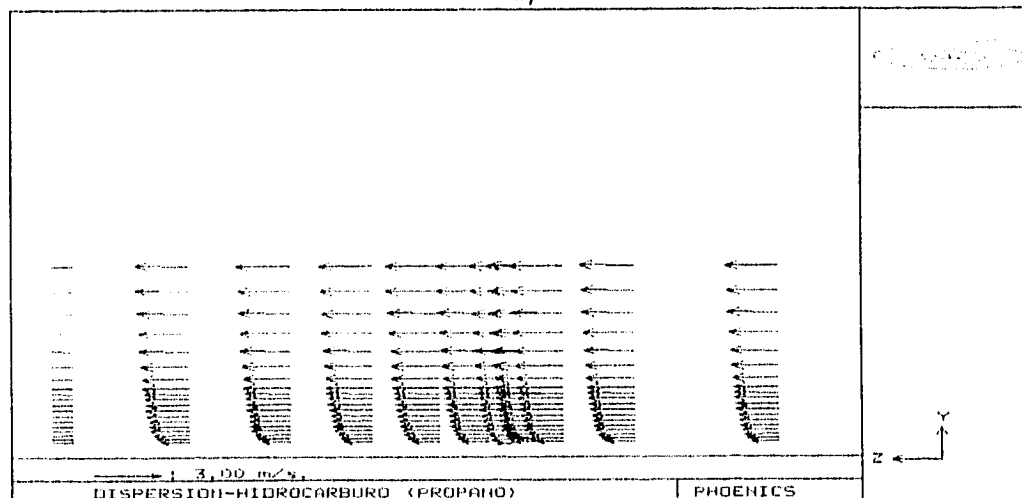
Fig. 4.25 Velocidad másica (a) y Velocidad de la descarga (b) de propano utilizando el modelo de flujo bifásico /43/.



a)

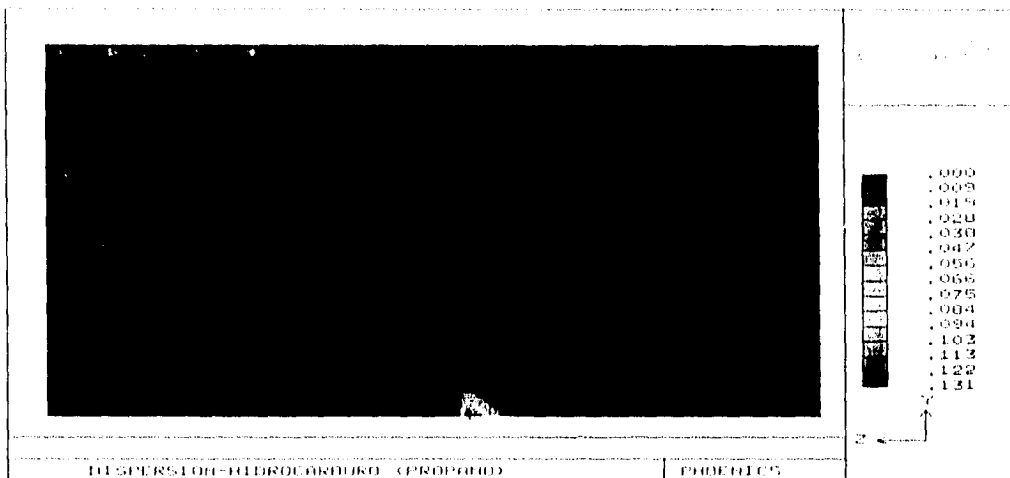


b)

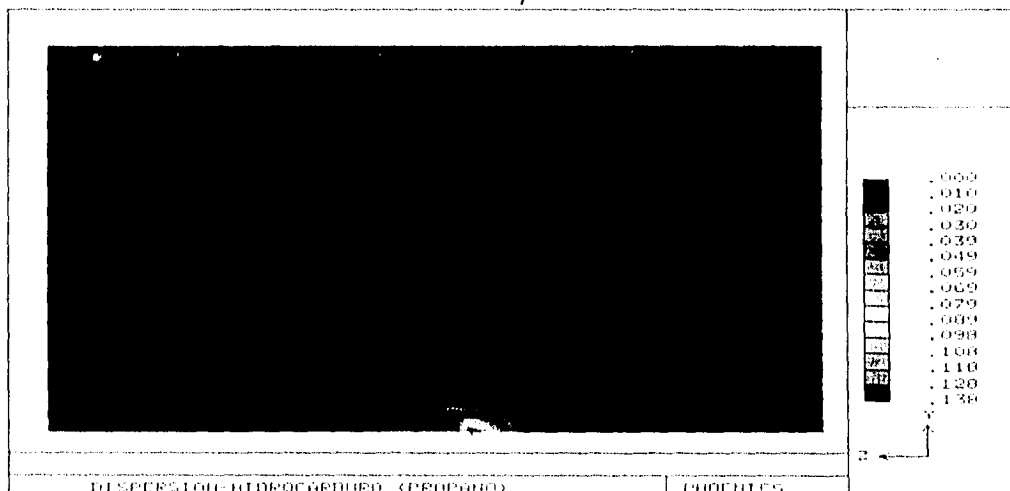


c)

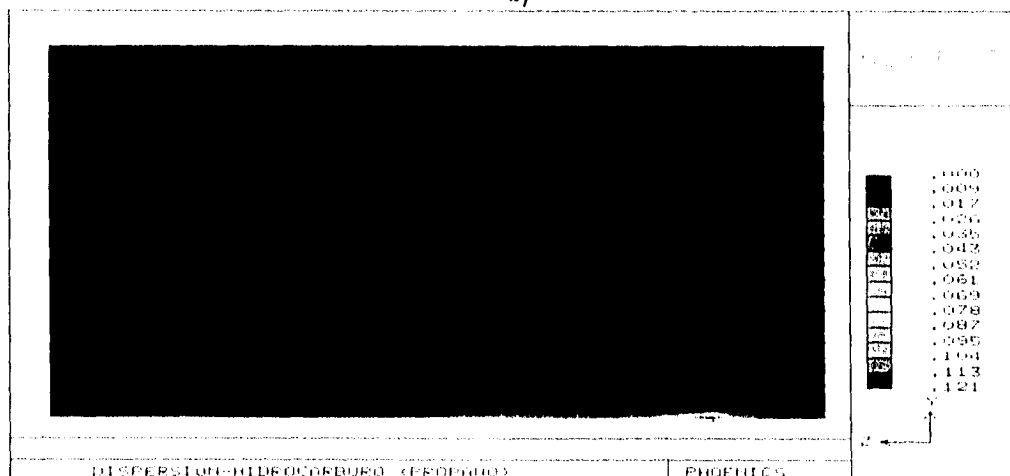
Figura 4.26 Vectores de velocidad durante una descarga de propano a una atmósfera neutra. (a) 3,470 s; b) 23,941 s; c)48,466 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 50,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K



a)

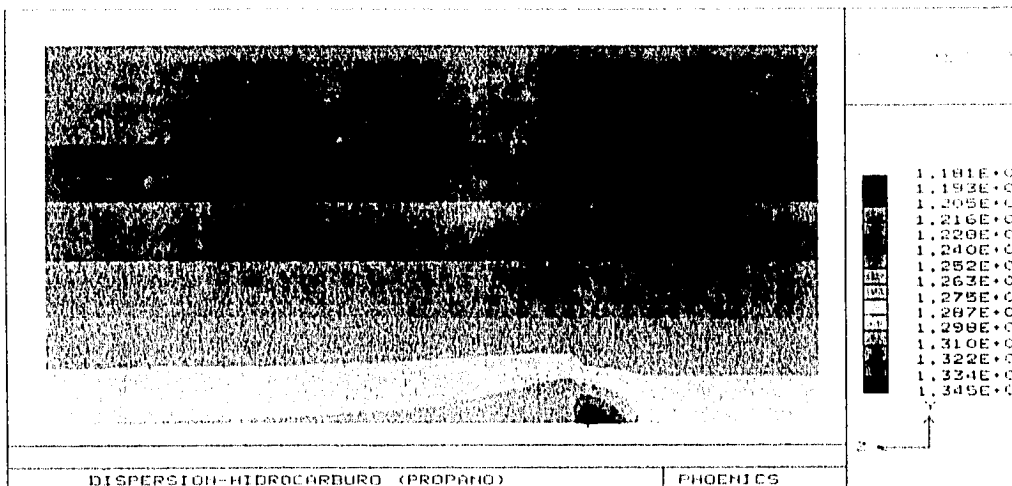


b)

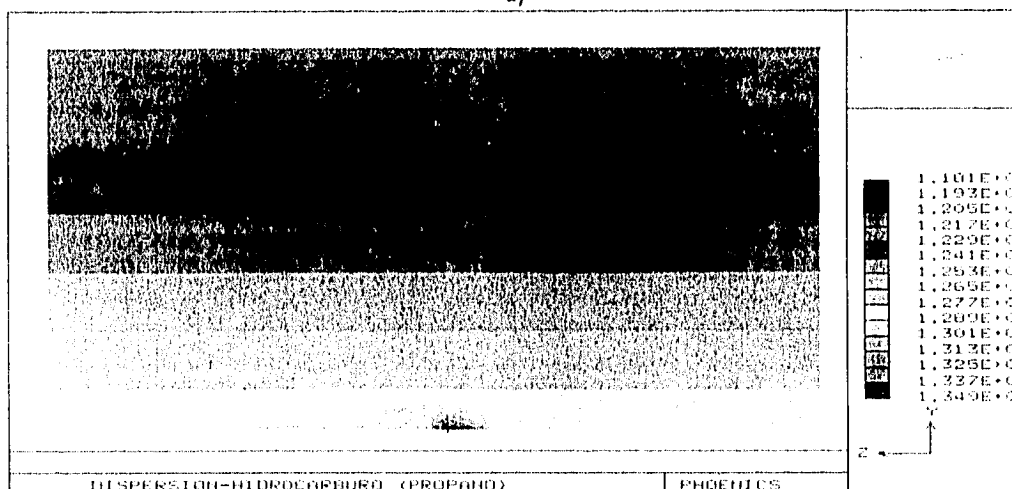


c)

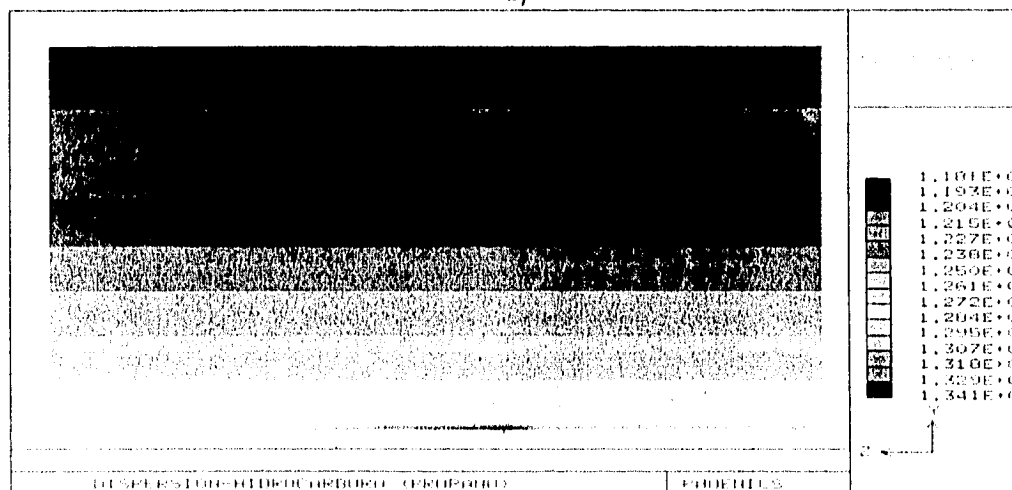
Figura 4.27 Concentración de propano durante su descarga a una atmósfera neutra. (a) 3,470 s del inicio de la descarga;b) 23,941 s del inicio de la descarga;c)48,466 s. Tiempo total de la descarga 50,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K



a)



b)



c)

Figura 4.28 Perfil de densidad de la mezcla aire-propano durante la descarga a una atmósfera neutra. (a) 3,470 s; b) 23,941 s; c)48,466 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 50,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K

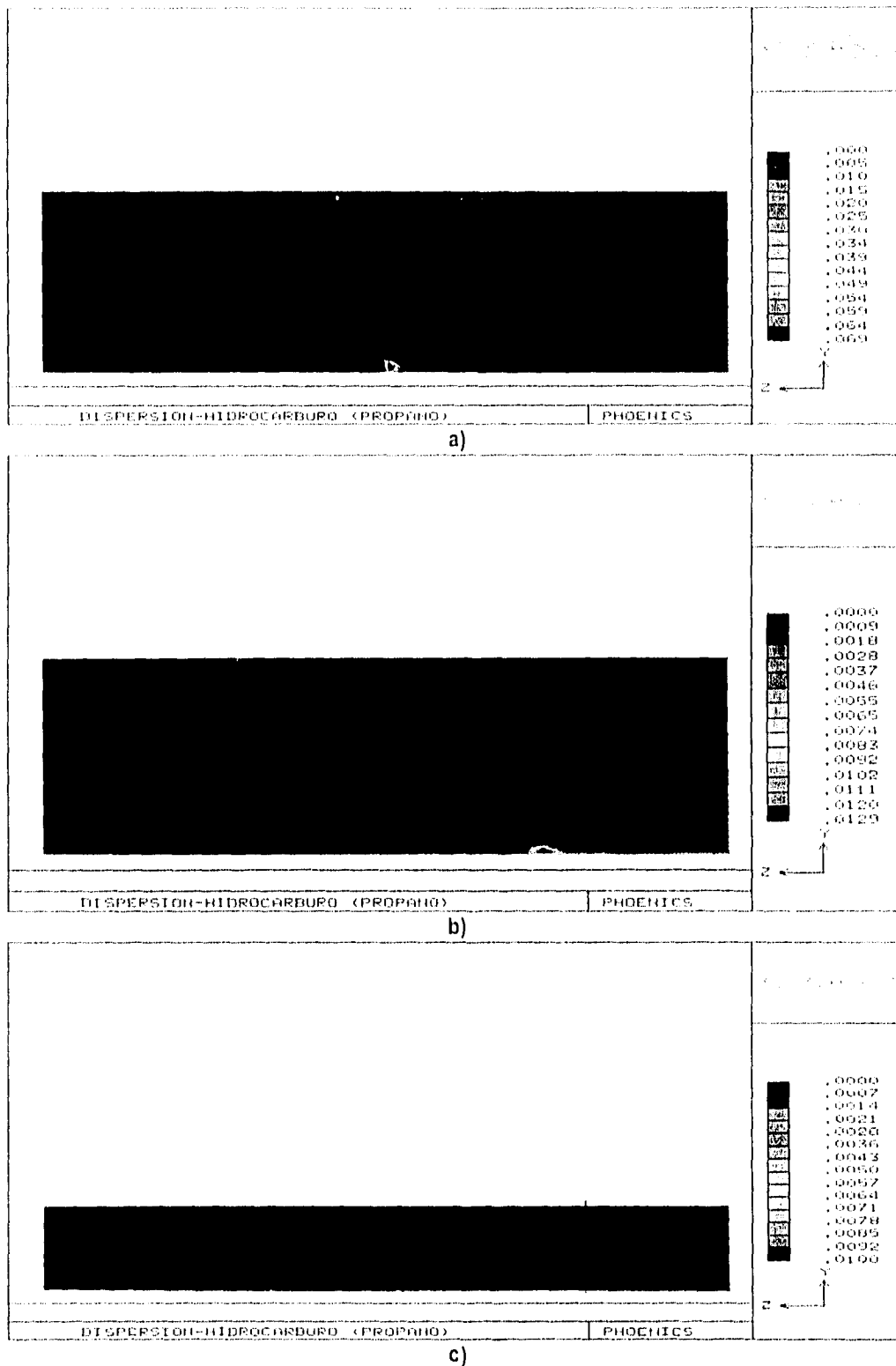


Figura 4.29 Perfil de energía cinética turbulenta de la mezcla aire-propano durante la descarga a una atmósfera neutra. (a) 3,470 s; b) 23,941 s; c)48,466 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 50,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K

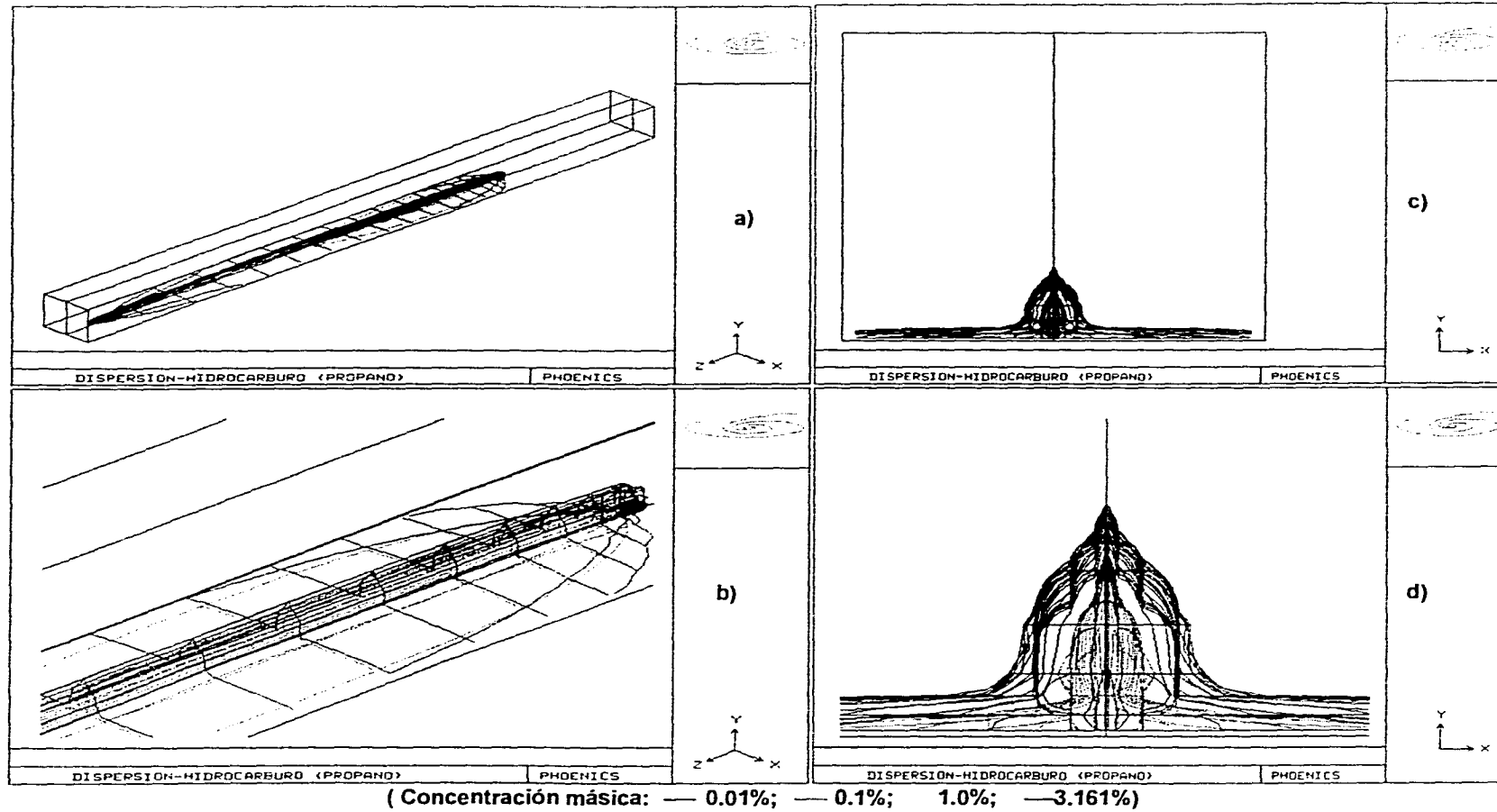


Figura 4.30 Líneas de iso-concentración de propano después de 3,470 s de iniciada su descarga a una atmósfera neutra. a) Vista global tridimensional; b) Acercamiento a la vista 3D; c) Corte transversal; d) Acercamiento al corte transversal. Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; Longitud L=30,000 m.

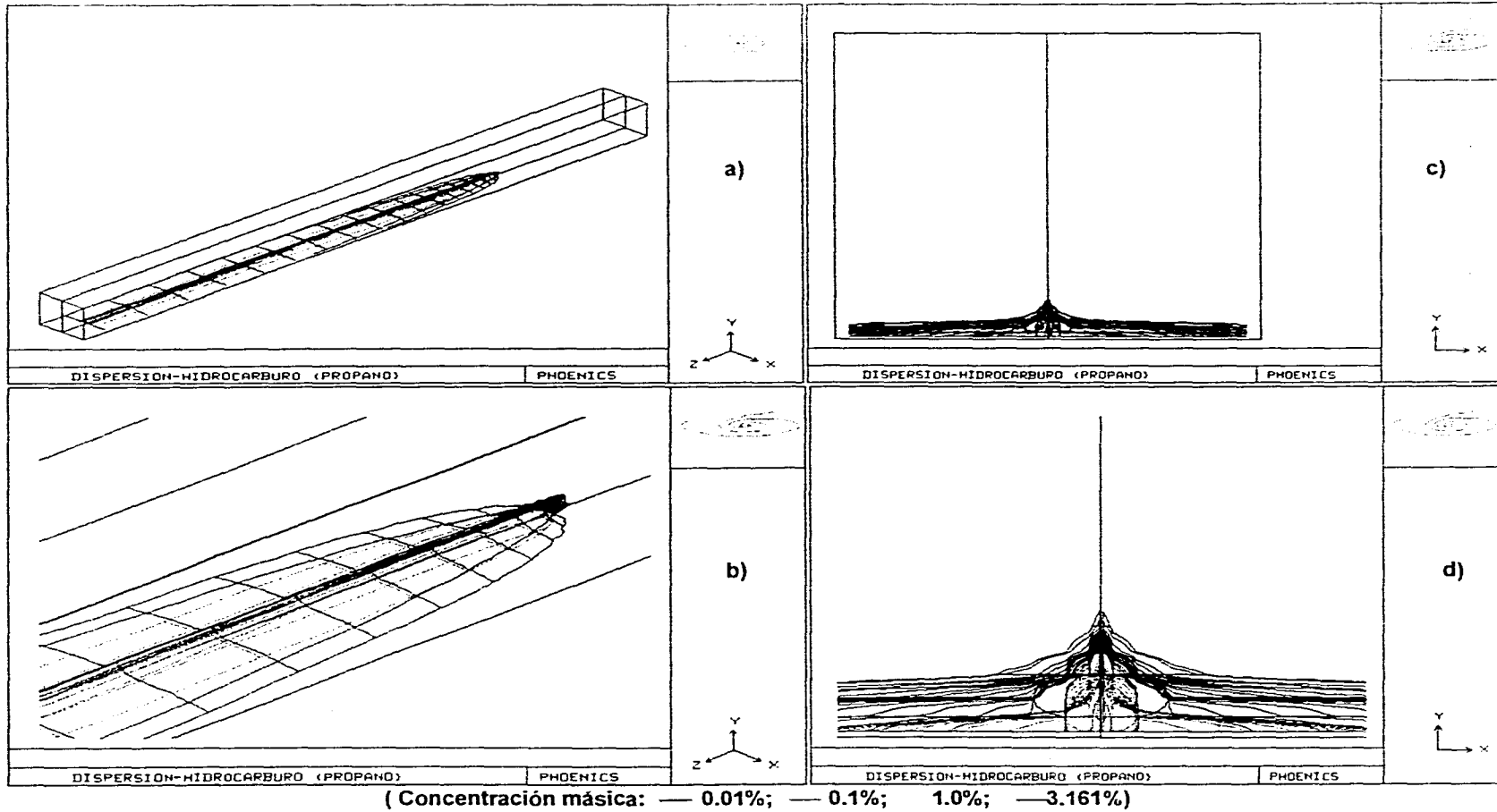


Figura 4.31 Líneas de iso-concentración de propano después de 23,941 s de iniciada su descarga a una atmósfera neutra. a) Vista global tridimensional; b) Acercamiento a la vista 3D; c) Corte transversal; d) Acercamiento al corte transversal. Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; Longitud L=30,000 m.

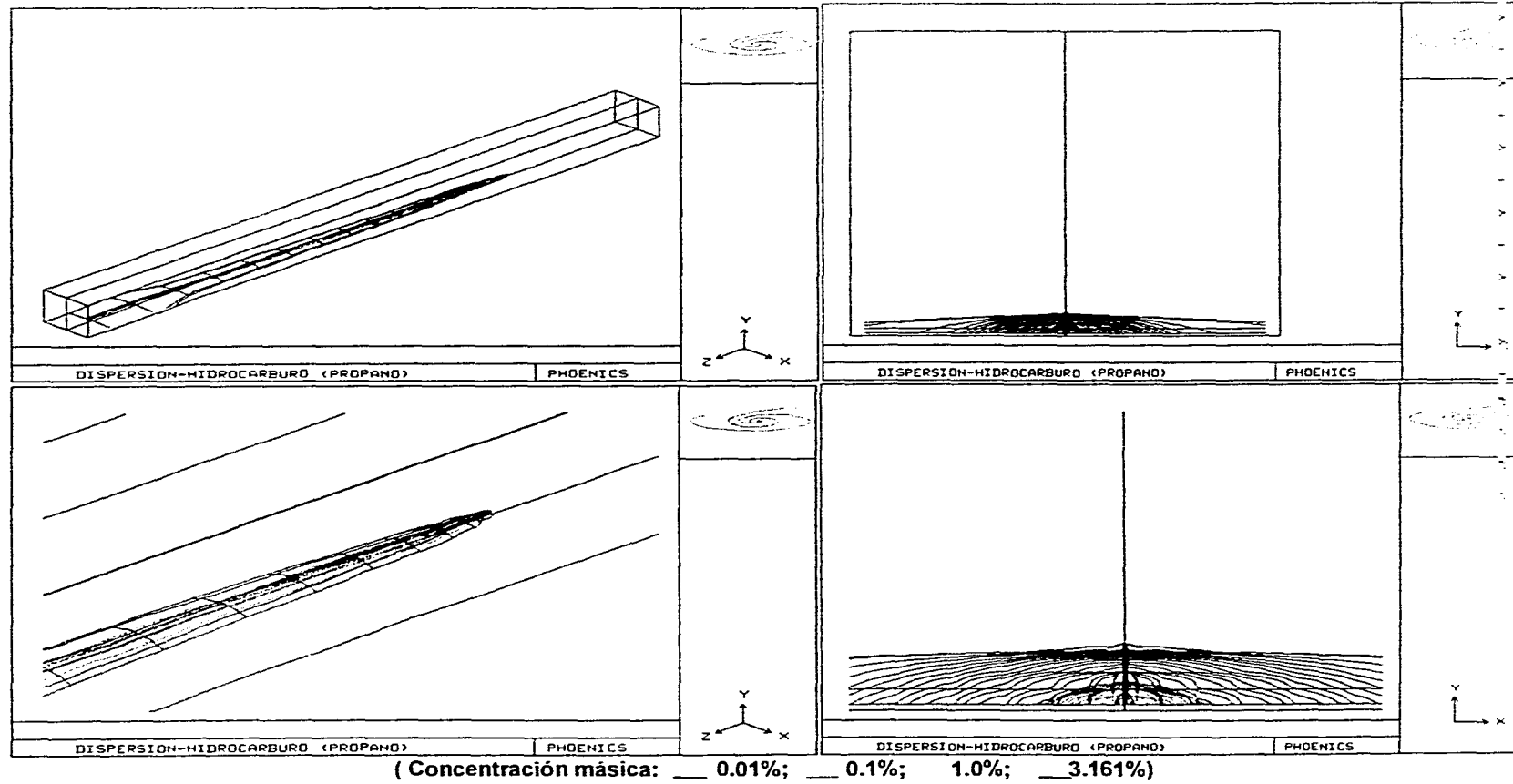
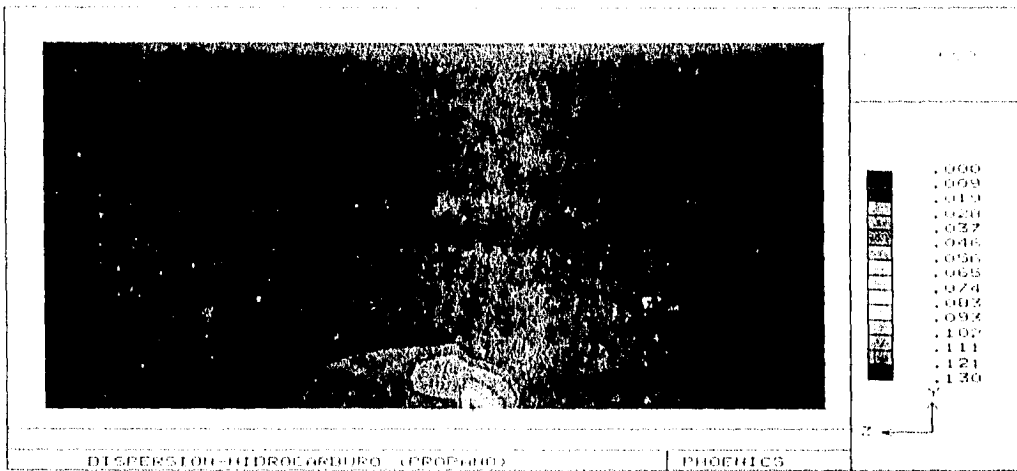
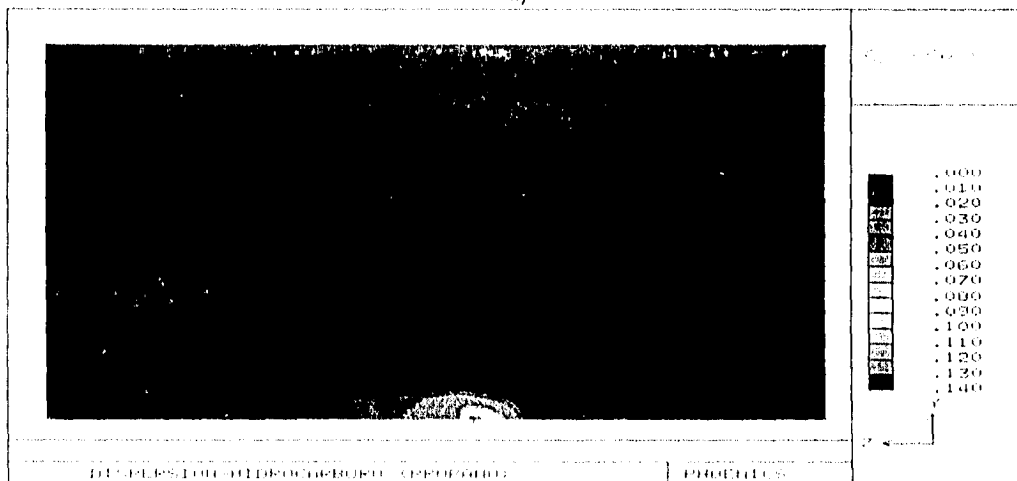


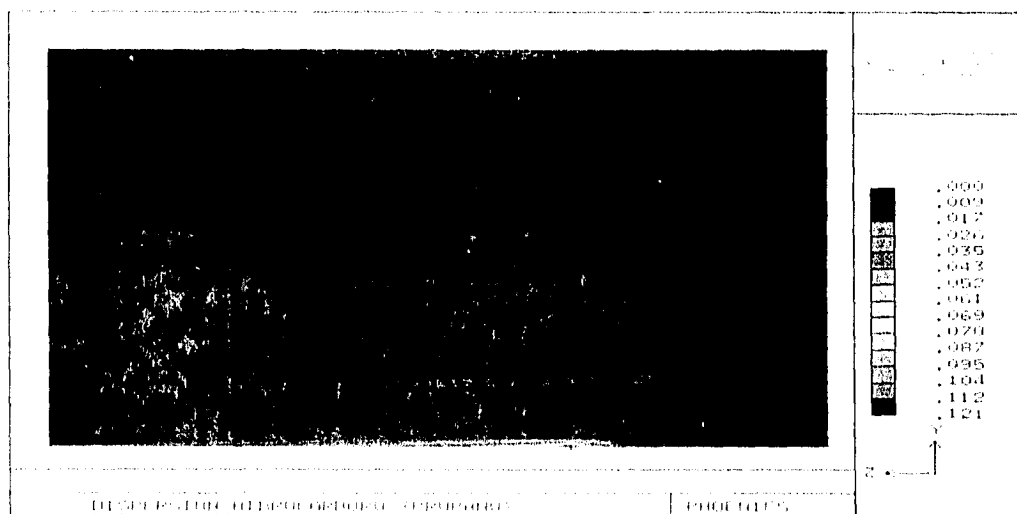
Figura 4.32 Líneas de iso-concentración de propano después de 48,466 s de iniciada su descarga a una atmósfera neutra. a) Vista global tridimensional; b) Acercamiento a la vista 3D; c) Corte transversal; d) Acercamiento al corte transversal. Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = 0.0 K; Longitud $L=30,000$ m.



a)



b)



c)

Figura 4.33 Concentración de propano durante su descarga a una atmósfera neutra. (a) 3,470 s; b) 23,941 s; c)48,466 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 50,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga =- 30.0 K

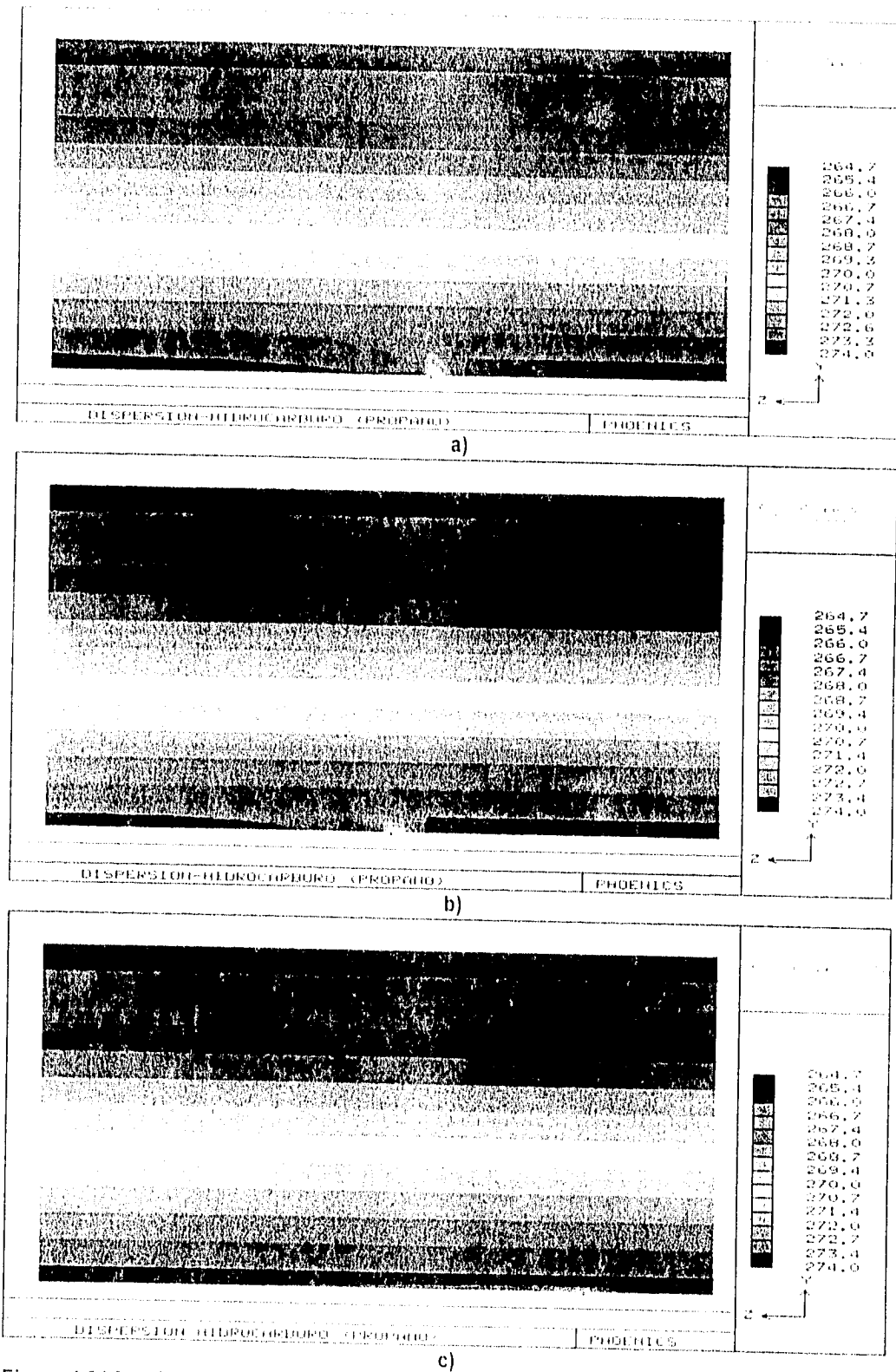
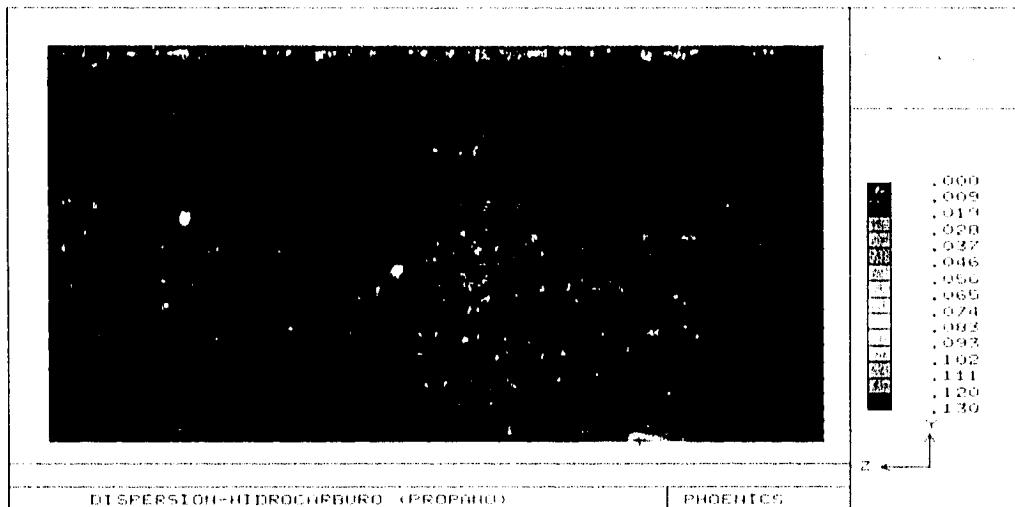
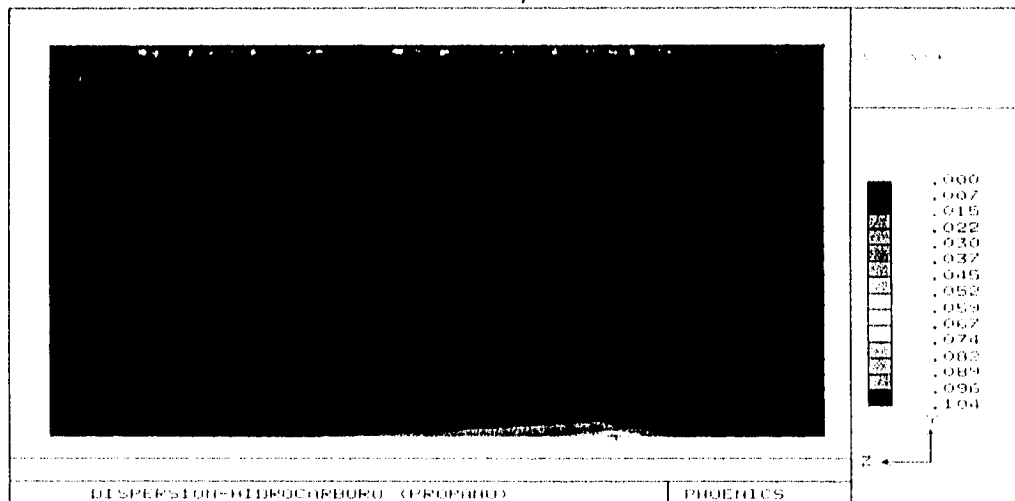


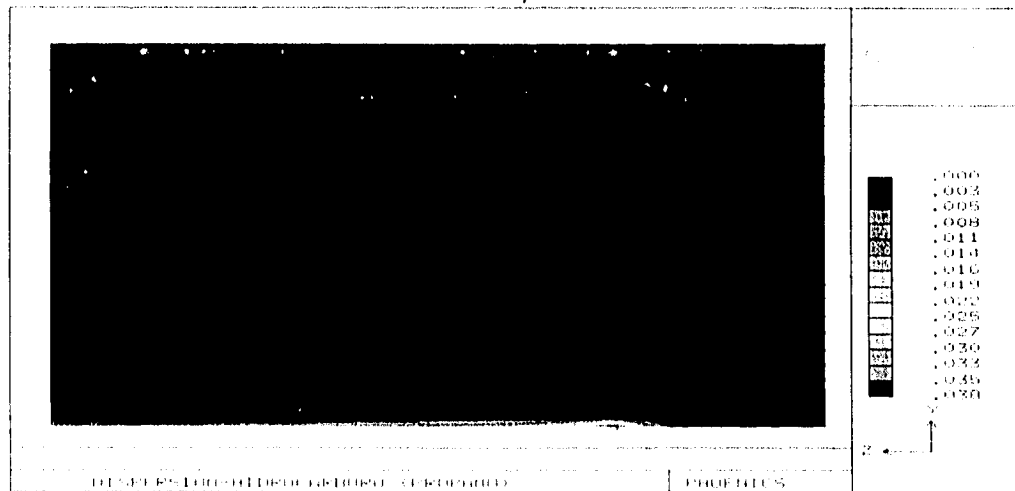
Figura 4.34 Perfil de temperatura durante la descarga de propano a una atmósfera neutra. (a) 3,470 s; b) 23,941 s; c)48,466 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 50,000 s.). Velocidad del viento 1 m/s; ΔT descarga = -30.0 K



a)



b)



c)

Figura 4.35 Concentración de propano durante su descarga a una atmósfera neutra. (a) 3,470 s; b) 23,941 s; c)48,466 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 50,000 s.). Velocidad del viento 3 m/s; AT descarga = 0.0 K

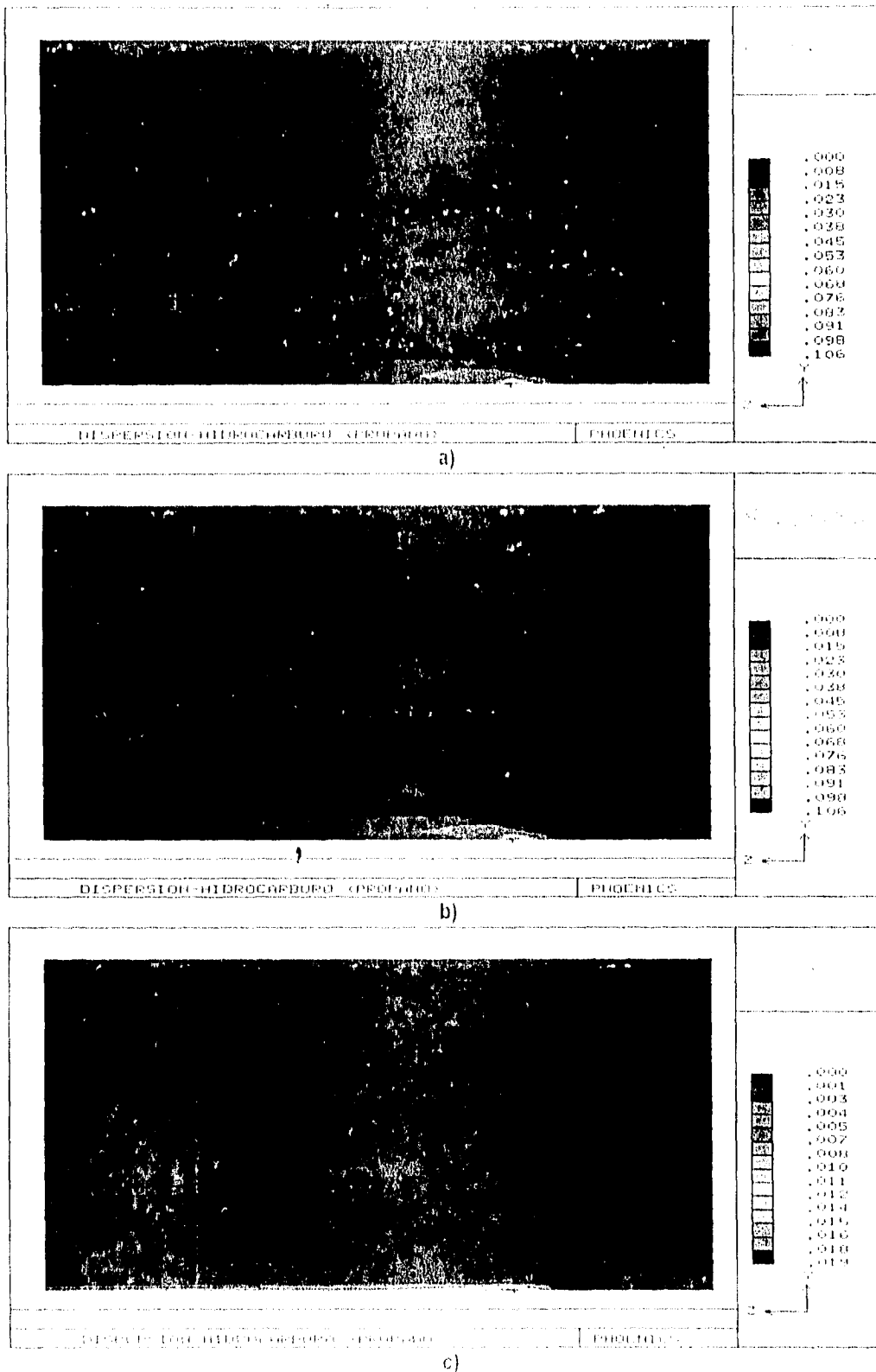


Figura 4.36 Concentración de propano durante su descarga a una atmósfera neutra. (a) 3,470 s; b) 23,941 s; c)48,466 s del inicio de la descarga. Tiempo total de la descarga 50,000 s.). Velocidad del viento 6 m/s; ΔT descarga = 0.0 K

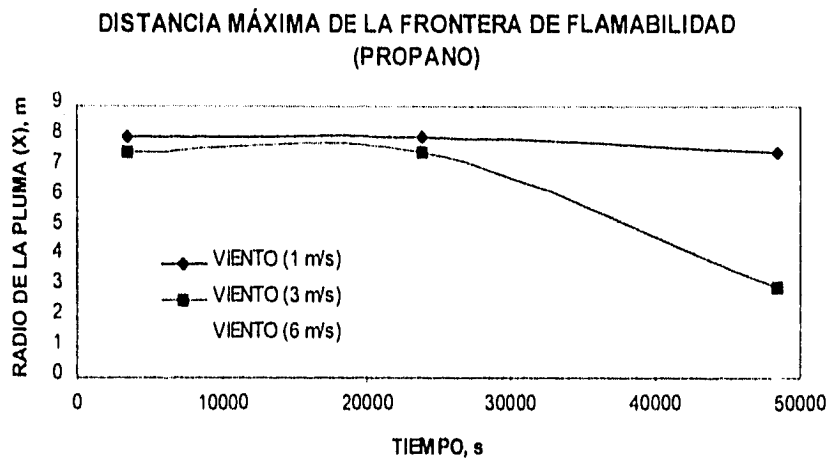


Figura 4.37 Movimiento de la frontera baja de flamabilidad en la dirección transversal (X). (Concentración másica 3.161%)

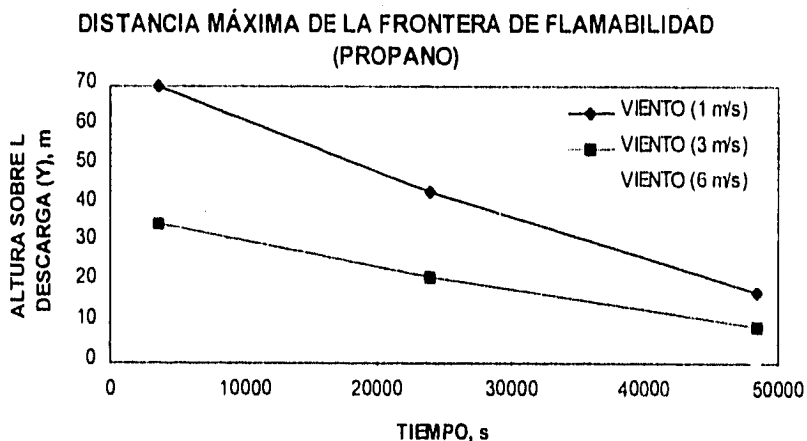


Figura 4.38 Movimiento de la frontera baja de flamabilidad en la dirección vertical (Y). (Concentración másica 3.161%)

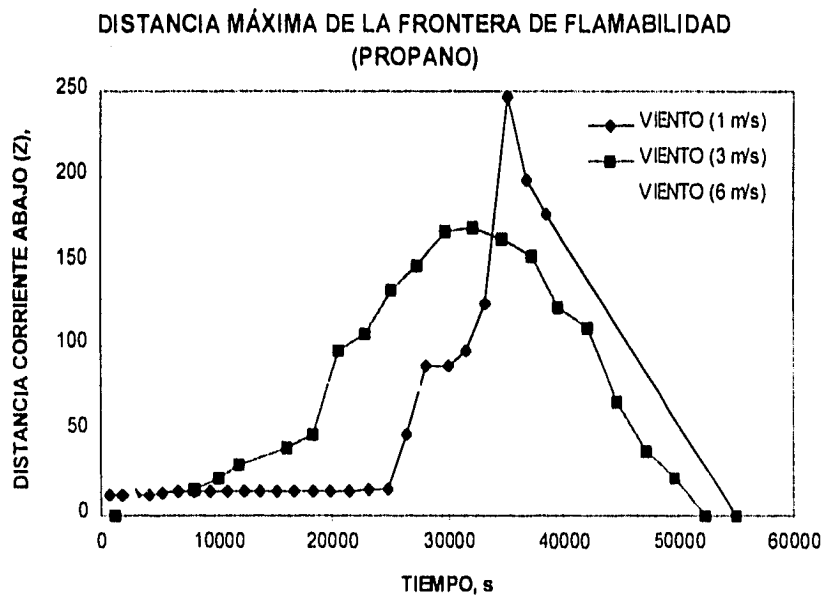


Figura 4.39 Movimiento de la frontera baja de flamabilidad en la dirección longitudinal (Z). (Concentración másica 3.161%)

5. SELECCIÓN Y DISEÑO DE UNA VÁLVULA DE CIERRE

5.1 Selección de válvulas para la industria de procesos.

Debido a su elevado costo, así como las consecuencias que podría traer una incorrecta elección de una válvula, cada vez es más importante tomar precauciones durante la selección de éstas.

Dentro de la selección de válvulas se involucra una amplia gama de factores, por lo que se debe tomar en consideración las siguientes características básicas: tipo de válvula, materiales de construcción, capacidades de presión y temperatura, materiales de empaques y juntas, costo y disponibilidad.

5.2 Tipos de Válvulas.

Las válvulas, incluso los dispositivos para desahogo (alivio) de presión, son una de las partes básicas en una planta en la industria de procesos químicos, tal es el caso de la industria petrolera.

El tipo de válvula dependerá de la función que deba realizar, sea de cierre (bloqueo), estrangulación o para impedir el flujo inverso. Estas funciones deberán de ser especificadas después de realizar un estudio cuidadoso de las necesidades de la unidad y del sistema para los cuales se destina la válvula.

Debido a que existen diversos tipos de válvulas, dependiendo de la función que realicen, también es necesario determinar las condiciones de servicio a las que estarán sometidas dichas válvulas. Es de primordial importancia conocer las características químicas y físicas de los fluidos que se manejan.

Por lo que, podemos dividir a las válvulas por su función en:

- Válvulas de estrangulamiento.
- Válvulas de cierre o bloqueo.
- Válvulas de retención.

Mientras que por el tipo de servicio que prestan, éstas se pueden dividir, dependiendo el fluido que manejan, como sigue:

- *Líquidos.
- *Gases
- *Líquidos con gases.
- *Líquidos con sólidos.
- *Gases con sólidos.
- *Vapores generados instantáneamente por la reducción en la presión del sistema.
- *Con corrosión o sin corrosión.
- *Con erosión o sin erosión.

Las características principales y los usos más comunes de los diversos tipos de válvulas para servicio de bloqueo o cierre son:

Válvulas de compuerta.- Resistencia mínima al fluido de la tubería. Se utiliza totalmente abierta o cerrada. Accionamiento poco frecuente.

Válvulas de macho.- Cierre hermético. Deben estar abiertas o cerradas del todo.

Válvulas de bola.- No hay obstrucción al flujo. Se utilizan para líquidos viscosos y pastas aguadas. Cierre positivo. Se utilizan totalmente cerrada o abierta.

Válvulas de mariposa.- Su uso principal es para cierre y estrangulación de grandes volúmenes de gases y líquidos a baja presión. Su diseño de disco abierto, rectilíneo, evita cualquier acumulación de sólidos; la caída de presión es muy pequeña.

Las características principales y los usos más comunes para diversos tipos de válvulas para servicio de estrangulamiento son:

Válvulas de globo.- Son para uso poco frecuente. Cierre positivo. El asiento suele estar paralelo con el sentido de flujo; produce resistencia y caída de presión considerable.

Válvulas de aguja.- Estas válvulas son, básicamente, válvulas de globo que tienen un macho cónico similar a una aguja, que ajusta con precisión en su asiento. Se puede tener estrangulación exacta de volúmenes pequeños porque el orificio formado entre el macho cónico y el asiento cónico se puede variar a intervalos pequeños y precisos.

Válvulas en Y.- Las válvulas en Y son válvulas de globo que permiten el paso rectilíneo y sin obstrucción igual que las válvulas de compuerta. La ventaja es una menor caída de presión que en la de globo convencional.

Válvula de ángulo.- Son, en esencia, iguales que las válvulas de globo. La diferencia principal es que el flujo del fluido en la válvula de ángulo realiza un giro de 90°.

Válvulas de mariposa.- Su uso principal es para cierre y estrangulación de grandes volúmenes de gases y líquidos a baja presión (desde 150 psig hasta el vacío). Su diseño de disco abierto, rectilíneo evita acumulación de sólidos no adherentes y produce poca caída de presión.

Por otro lado, también podemos encontrar las válvulas que no permiten el flujo inverso (de retención). Estas actúan en forma automática ante los cambios de presión para evitar que se invierta el flujo.

5.3 Válvulas de cierre

Debido a que el presente trabajo se enfoca hacia la selección y diseño de una válvula de cierre o bloqueo, a continuación se hace una descripción más detallada de éste tipo de válvulas.

5.3.1 Válvulas de compuerta

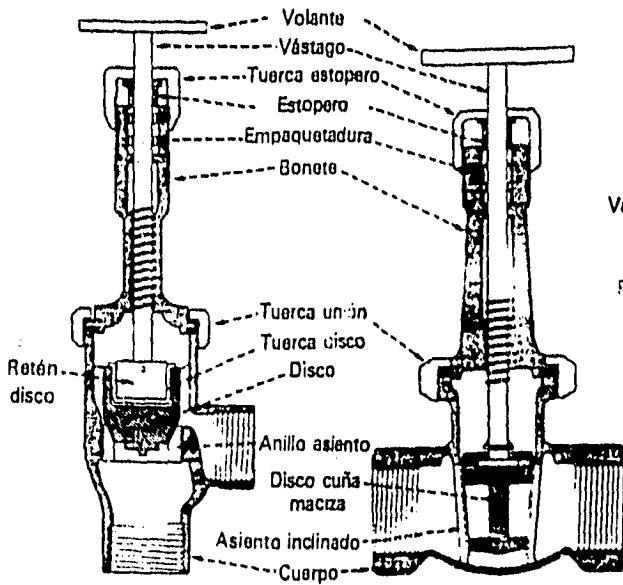
Los principales elementos estructurales de la válvula de compuerta son: volante, vástago, bonete, compuerta, asientos y cuerpo.

La ventaja más importante de las válvulas de compuerta es que presentan poca restricción al flujo cuando están abiertas del todo. Sin embargo, por los efectos del flujo dinámico contra la cuña que no tiene soporte, estas válvulas no son eficaces para estrangulación. El traqueteo inducido por la velocidad del medio circulante contra la cuña, parcialmente abierta, más los ciclos frecuentes a la presión de la tubería, producen arrastre en el lado de corriente abajo que, combinado con la erosión, ocasiona desgaste del asiento y fugas.

Las fugas por las válvulas de compuerta también pueden ocurrir en ambos extremos en donde se conectan a la tubería (cuando la válvula está abierta), en la unión entre el bonete y el cuerpo, en el vástago, y corriente abajo de la compuerta cuando la válvula está cerrada.

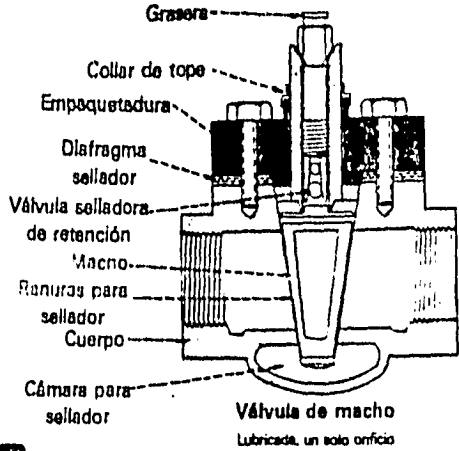
La función de los sellos es evitar dichas fugas, tanto al exterior como corriente abajo, en las válvulas. Estos sellos pueden ser de metal a metal, metal en contacto con un material elástico, o metal en contacto con un inserto elástico colocado en la cara del metal.

También, con apertura total y en el manejo de pastas aguadas, se acumulan los sólidos en la cavidad del asiento e impiden el cierre total. Además, hay que cambiar con frecuencia los empaques porque son de vueltas múltiples y puede haber desgaste serio en el vástago. Otro factor que influye en los altos costos de mantenimiento es el reacondicionamiento periódico de los asientos.

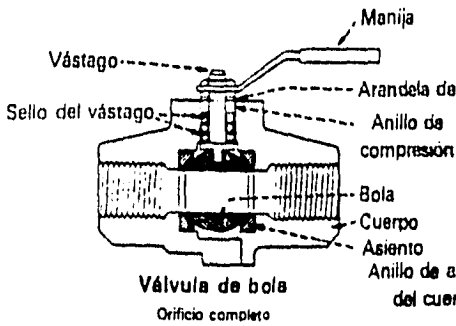


Válvula en ángulo
Disco tipo de macho, bonete de unión, vástago elevable

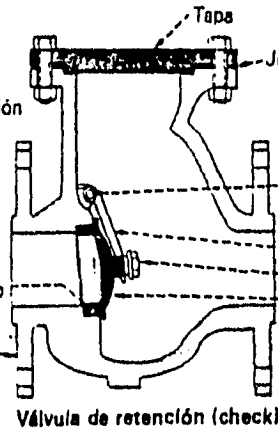
Válvula de compuerta
Rosca interna, vástago elevable, bonete de unión, disco de cuña



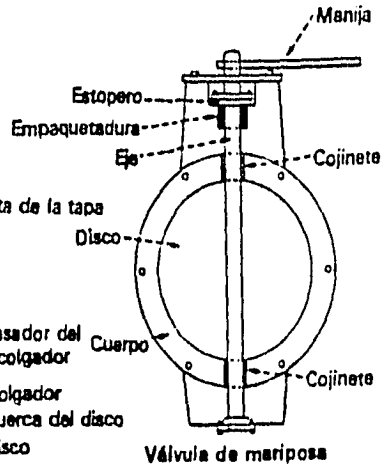
Válvula de macho
Lubricada, un solo orificio



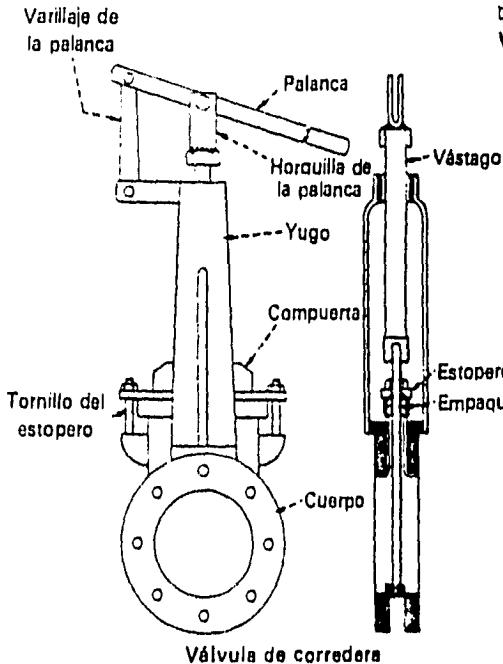
Válvula de bola
Orificio completo



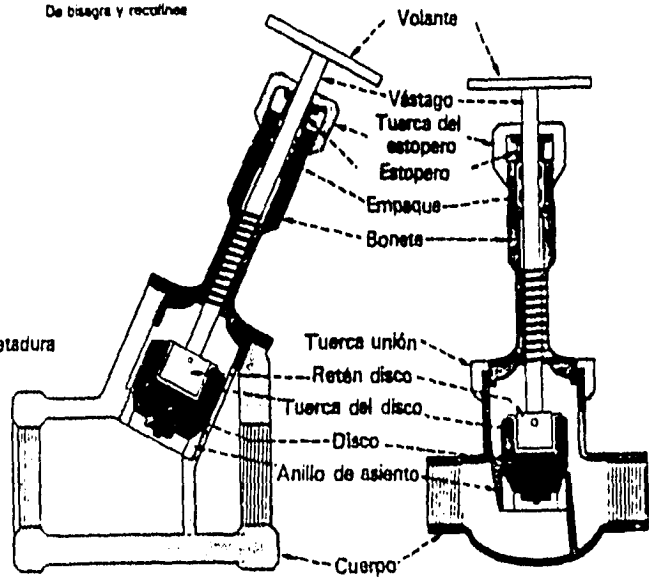
Válvula de retención (check)
De bisagra y recatino



Válvula de mariposa



Válvula de corredera



Válvula en Y
Tipo de macho, vástago elevable

Válvula de globo
Disco tipo de macho, bonete de unión, vástago elevable

5.3.2 Válvulas de macho

El uso principal de las válvulas de macho, igual que las válvulas de compuerta, es en servicio de corte sin estrangulación.

Este tipo de mecanismo es muy antiguo, debido a que se ha encontrado en dispositivos creados por los egipcios.

Su diseño sencillo y sin complicaciones se ha conservado todo este tiempo, debido quizá a que todavía es de apertura y cierre rápidos y operación con 1/4 de vuelta, a un costo mínimo. Las limitaciones básicas de las válvulas de macho son problemas con la torsión y los asentamientos. En las válvulas antiguas se utilizaban sellos de metal con metal, sin lubricación, pero había problemas en los sellos y por el desgaste. Aún así se emplean machos de este tipo en los tamaños pequeños. Los tipos mucho más modernos vienen en tamaños hasta de 34 in y con capacidad hasta para 10 000 psi de presión.

Hay disponibles dos tipos estándar de válvulas de macho. Uno, es el lubricado que resuelve los problemas de la fricción. Pero su uso está limitado por la compatibilidad química de la grasa y la necesidad constante de lubricación. Las válvulas revestidas con un elastómero, como el tetrafluoroetileno (TFE), cada día se utilizan más, aunque requieren altas torsiones. En algunos machos revestidos con elastómeros se utiliza un resorte para empujarlo hacia abajo, pero su uso está limitado por la compatibilidad del material del resorte.

5.3.3 Válvulas de bola

Las válvulas de bola, básicamente, son válvulas de macho modificadas. Aunque se han utilizado desde hace mucho tiempo, su empleo estaba limitado debido al asentamiento de metal contra metal, que no permitía un cierre a prueba de burbujas. Los adelantos en los plásticos han permitido sustituir los asientos metálicos con los de plásticos y elastómeros modernos.

La bola tiene un orificio que se une con el cuerpo en la posición abierta. Estas válvulas se utilizan en forma principal para servicio de corte y no son satisfactorias para estrangulación. Son rápidas para operarlas, de mantenimiento fácil, no requieren lubricación, producen cierre hermético con baja torsión y su caída de presión depende del tamaño del orificio.

La válvula de bola está limitada a las temperaturas y presiones que permite el material del asiento. Cuando está cerrada, se atrapa algo de líquido entre el asiento y el orificio de la bola, lo cual es indeseable en muchos casos.

Estas válvulas no están limitadas a un fluido en particular. Se pueden emplear para vapor, agua, aceite, gas, aire, fluidos corrosivos, pastas aguadas y materiales pulverizados secos.

Los principales componentes de estas válvulas son el cuerpo, el asiento y la bola.

Hay dos tipos principales de cuerpos para válvulas de bola: entrada superior y cuerpo dividido. En el de entrada superior, la bola y los asientos se instalan por la parte superior. En el de cuerpo dividido, la bola y asientos se instalan desde los extremos.

Las bolas tienen orificios completos, de venturi y de superficie reducida. El orificio completo es igual al diámetro interior de la tubería. El orificio de venturi tiene superficies reducidas y hay flujo de venturi dentro del cuerpo. El orificio reducido es de menor diámetro que la tubería.

Los materiales más comunes para los asientos de las válvulas de bola son TFE, Nylon, buna-N y Neopreno, aunque su uso está limitado por las temperaturas. Se han producido asientos de grafito para temperaturas hasta de 1000 °F.

El vástago de la válvula de bola no está, por lo general, sujeto a la bola. Se suele hacer una ranura en la bola y se conforma el extremo del vástago para que ajuste en la ranura y permita girar la bola. El vástago se sella con sellos anulares o con empaques convencionales de material TFE, o con material relleno o impregnado con TFE que se fija en su lugar con un anillo de compresión.

Los extremos del cuerpo suelen ser con soldadura de enchufe, con brida o roscados.

Las válvulas de bola se fabrican con una serie de materiales: hierro fundido, hierro dúctil, bronce, aluminio, acero al carbono, acero inoxidable, latón, titanio, circonio, tantalio, y muchas

aleaciones resistentes a la corrosión, y también son plásticos. Los tamaños comunes son de 1/4 hasta 36 pulgadas.

5.3.4 Válvulas de mariposa

Las válvulas de mariposa son uno de los tipos más antiguas que se conocen. Son sencillas, ligeras y de bajo costo. El costo de mantenimiento también es bajo porque tienen un mínimo de piezas móviles. El uso principal de las válvulas de mariposa es para servicio de corte y de estrangulación cuando se manejan grandes volúmenes de gases y líquidos a presiones relativamente bajas. El diseño abierto de flujo rectilíneo evita la acumulación de sólidos y produce baja caída de presión. Su operación es fácil y rápida con una manija. Es posible moverla desde la apertura total hasta el cierre total con gran rapidez. La regulación del flujo se efectúa con un disco de la válvula que sella contra un asiento.

Las principales características de los servicios de las válvulas de mariposa incluyen apertura total, cierre total o estrangulación, operación frecuente, cierre positivo para gases o líquidos y baja caída de presión.

Los principales elementos estructurales de la válvula de mariposa son el eje, el disco de control de flujo y el cuerpo. Hay tres tipos principales de cuerpo:

- Tipo de disco plano (tipo de oreja). Esta válvula sólo está sujeta entre dos bridas de tubo con tornillos que unen las bridas y pasan por agujeros en el cuerpo de la válvula.
- Tipo con brida. Esta brida tiene extremos con brida que se unen con las bridas de los tubos.
- Tipo de rosca. Esta válvula se atornilla directamente en el tubo.

El flujo por la válvula de mariposa se controla con un disco que tiene más o menos el mismo diámetro que los tubos que conecta. Un eje, o sea, el vástago, pasa a través de este disco; está apoyado en ambos extremos en el cuerpo y se sujeta al disco con tornillos o pasadores o mediante el brochado del extremo superior de la cavidad del disco para formar un vástago cuadrado. Al girar 90° el vástago, el disco abre o cierra la válvula. Para la estrangulación se mueve el disco a una posición intermedia, en la cual se mantiene por medio de un seguro o cierre.

Para obtener la ubicación correcta, el vástago está fijo en ambos extremos mediante bujes (casquillos) que deben estar sellados para evitar cualquier contacto con fluidos corrosivos. Por lo general, los sellos consisten en un estopero con sellos anulares.

De acuerdo con sus características de sellos y de ser a prueba de fugas, las válvulas de mariposa se dividen en dos grupos principales:

En el primer grupo, el asiento contra el cual cierra el disco es metálico, lo cual hace la válvula adecuada para manejo de semisólidos, porque el material abrasivo no puede ocasionar ningún daño en estos asientos.

En el segundo grupo se utilizan sellos anulares elásticos alrededor de los discos para tener un cierre a prueba de fugas. En este tipo de válvula, los materiales para los asientos son buna-N, Vitón, caucho natural, TRE, Hypalon, etc. Estas válvulas de mariposa de cierre hermético tienen limitaciones en la temperatura debido al material del asiento y de los sellos.

Las válvulas de mariposa se fabrican con muy diversos metales. Para los discos hay también diversos revestimientos, como TRE, buna-N, Kynar, Neopreno e Hypalon en tamaños que van desde 2 hasta 15 ft.

5.4 Selección de la válvula de aislamiento (cierre)

Debido a las características propias de la válvula de cierre, anteriormente mencionadas, y ante la necesidad de contar con un accesorio confiable durante la operación de los largos ductos de conducción, se seleccionó una válvula del tipo de bola.

Las razones por las que se seleccionó una válvula de este tipo se enumeran a continuación:

1. Ofrece poca caída de presión.
2. Requiere de poco par de torsión para el cierre.
3. Puede permanecer mucho tiempo sin ser actuada y continuar funcionando.
Por otro lado, en las válvulas de compuerta existe gran desgaste en los sellos, y en caso de un accidente es probable que fallen los sellos.
4. Es una válvula de cierre total (totalmente abierta o cerrada).
5. Este tipo de válvula es recomendable para fluidos viscosos (debido a su poca caída de presión).
6. No requiere de lubricación.
7. Solamente requiere de $\frac{1}{4}$ de vuelta para su cierre total. Este factor es importante, en caso de un accidente.

5.5 Diseño de una válvula de Bola

Esta sección esta dedicada al diseño de una válvula de bola con características para su ensamble a una tubería de 16 in (como la mencionada en el accidente de Nova Corp./20/), operando con una presión interna de 117 bar, y expuesta al medio ambiente.

La válvula de bola esta constituida principalmente por los siguientes elementos:

1. Cuerpo de la válvula.
2. Pernos de ensamble del cuerpo.
3. Bola.
4. Vástago.
5. Pernos y juntas del sello del vástago
6. Chaveta y Elemento principal de transmisión del par.
7. Bridas y pernos de ensamble.
8. Asientos del sello de la bola.

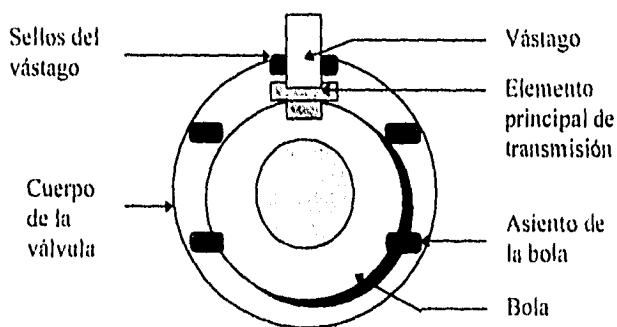


Figura 5.1 Diagrama de la válvula de bola

5.5.1 Espesor mínimo del cuerpo de la válvula.

Considerando al cuerpo de la válvula como un recipiente sometido a una presión interna de 117 bar, el espesor mínimo del recipiente se puede calcular de la siguiente manera /37/.

La válvula puede ser dividida en dos secciones principales, una cilíndrica y una esférica.

Sección Cilíndrica

El espesor mínimo para un recipiente de sección cilíndrica puede ser determinado por la siguiente relación /37/

$$t = \frac{Pr}{2\sigma} \cdot F.S. \quad (5.1)$$

donde t es el espesor, P la presión, r el radio interno del recipiente, σ la resistencia del material, y $F.S.$ el factor de seguridad.

Por lo que para una tubería de acero fundido ($\sigma = 276 \text{ Mpa}$), de diámetro interno de .4064m (16in), sometida a una presión interna de 117 bar, empleando un factor de seguridad aproximadamente de 6 (5.89), el espesor mínimo será de .0254m (1in).

Sección Esférica.

El espesor mínimo para un recipiente de sección esférica puede ser determinado mediante

$$t = \frac{Pr}{2 \frac{\sigma}{F.S.} - 0.2 P} \quad (5.2)$$

donde t es el espesor, P la presión, r el radio interno del recipiente, σ la resistencia del material, y $F.S.$ el factor de seguridad.

Por lo que para una tubería de acero fundido ($\sigma = 276 \text{ Mpa}$), de diámetro interno de .4064m (16in), sometida a una presión interna de 117 bar, empleando un factor de seguridad de aproximadamente 4, el espesor mínimo será de .0254m (1in), manteniendo así un espesor mínimo constante.

5.5.2 Cálculo de los pernos de ensamble del cuerpo de la válvula

Para lograr una unión que pueda ser desensamblada sin aplicar métodos destructivos y que sea lo suficientemente fuerte para resistir cargas externas de tensión, de flexión o de cortante, es necesario emplear una junta atornillada simple con rondanas templadas en el perno.

El cálculo de los pernos de sujeción está dado por /35/

$$N = \frac{C \cdot F.S. \cdot F}{S_p \cdot A_t \cdot 0.25} \quad (5.3)$$

donde N es el número de pernos, C la constante de rigidez de la unión, F.S. el factor de seguridad, F la fuerza aplicada sobre los pernos, S_p la resistencia de fluencia del material de los pernos y A_t el área del esfuerzo de tensión (del tornillo o perno).

Constante de Rigidez de la unión (C)

La constante de rigidez de la unión C se define como la relación entre la fuerza aplicada al elemento y la deformación producida por dicha fuerza. Esta se calcula como

$$C = \frac{k_b}{k_b + k_m} \quad (5.4)$$

donde k_b es la rigidez del sujetor o tornillo en la zona de la junta, y k_m es la rigidez en la zona de la unión.

La rigidez del tornillo que se encuentra dentro de la zona de sujeción generalmente consta de dos partes: una porción no roscada o espiga y otra porción roscada o cuerda. Por lo tanto, la constante de rigidez del perno es equivalente a la de dos resortes en serie. Esto es

$$\frac{1}{k_b} = \frac{1}{k_T} + \frac{1}{k_d} \quad (5.5)$$

donde k_T es la constante de rigidez de la cuerda, y se determina

$$k_T = \frac{A_T \cdot E}{l_T} \quad (5.6)$$

siendo A_T el área transversal de esfuerzo de tensión (de tablas /35/), E es el módulo de elasticidad del material, y l_T la longitud roscada del tornillo sometida a tensión; y k_d es la constante de rigidez de la espiga en la zona de sujeción, y se define

$$k_d = \frac{A_d \cdot E}{l_d} \quad (5.7)$$

siendo A_d es el área transversal del diámetro mayor del sujetador, E es el módulo de elasticidad del material, y l_d la longitud de la espiga sometida a tensión (considerando la arandela).

Por otro lado, la rigidez en la zona de la junta o unión (k_m) se determina mediante

$$k_m = \frac{0.577 \cdot \pi \cdot E \cdot d}{2 \cdot \ln \left(5 \frac{0.577 l + 0.5 d}{0.577 l + 2.5 d} \right)} \quad (5.8)$$

donde E es el módulo de elasticidad del material, d el diámetro del perno, y l el espesor a unir.

Carga a soportar (F)

La fuerza que deben soportar los pernos se calcula de la siguiente manera

$$F = P \cdot A_{proy} \tag{5.9}$$

donde F es la fuerza, P la presión interna del recipiente (117bar) y A_{proy} el área sobre la cual actúa la presión.

El área sobre la que actúa la presión es

$$A_{proy} = \frac{\pi}{4} (d_1^2 - d_0^2) \tag{5.10}$$

donde $d_1=0.58\text{m}$ y $d_2=.4064\text{m}$, como se observa en la figura 5.2 .

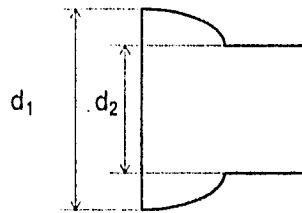


Fig. 5.2 Croquis de la sección derecha del cuerpo de la válvula

Por lo que la fuerza aplicada sobre los pernos será de 1,574 kN.

Debido a que los pernos estarán sometidos a grandes cargas, se seleccionaron pernos de acero templado y revenido con características físicas y mecánicas que se muestran a continuación en la tabla 5.1. La literatura /35/ recomienda emplear una longitud del barrenado igual o mayor al diámetro del perno.

Tabla 5.1 Características físicas y mecánicas de diversos pernos

ϕ perno mm	long. perno mm	long rosc mm	A_T mm ²	l_T mm	A_d m ²	l_d mm	E GPa	S_p MPa	Carga a soportar kN
20	75	46	245	26	3.14E-4	29	200	600	1,574
24	75	54	353	30	4.52E-4	21	200	600	1.574
30	75	66	561	36	7.07E-4	9	200	600	1,574

Las características de los barrenos se muestran en la tabla 5.2.

Tabla 5.2 Características físicas y mecánicas de las partes a unir

ϕ barreno mm	longitud del barreno mm	longitud a unir (l) mm	E GPa	S _p MPa	long. arandela mm
20	20	55	200	276	3
24	24	51	200	276	4
30	30	45	200	276	4

Sustituyendo las anteriores características en las ecuaciones 5.8, 5.7, 5.6, 5.5, 5.4 y 5.3, respectivamente, obtendremos las características mecánicas del ensamble, para los distintos diámetros de pernos. Dichas características se muestran a continuación en la tabla 5.3.

Tabla 5.3 Características mecánicas del ensamble (pernos-bridas).

ϕ pernos (mm)	A _T mm ²	k _T GN/m	k _d GN/m	k _b GN/m	k _m GN/m	C	F.S.	N° pernos
20	245	1.8846	2.1666	1.008	3.868	.20673	2.26	20
24	353	2.3533	4.3084	1.52	5.195	.2266	2.97	20
30	561	3.1166	15.708	2.6	7.6876	.2527	4.23	20

Por cuestiones de espacio y peso, además de que el factor de seguridad obtenido es bastante aceptable, emplearemos los pernos con un diámetro de 24 mm. Por lo que los tornillos a emplear serán del tipo **M24x80**.

Además, Shigley /35/ establece que para mantener una uniformidad de la presión en la unión, los tornillos no deben ser espaciados a una distancia mayor de seis diámetros por perno. Pero a fin de mantener el espacio libre para que entre la llave, los pernos deben espaciarse por lo menos con tres diámetros de separación. Lo anterior se puede escribir como

$$3 \leq \frac{\Pi \cdot D_s}{n \cdot d} \leq 6$$

donde D_s es el diámetro del círculo de colocación de los pernos, d el diámetro de los pernos y n el número de pernos.

Debido a cuestiones espacio y ubicación en la válvula, se seleccionó un diámetro de círculo de .6477 m (25.5 in). Por lo que la relación de espaciamiento será de 4.24, la cual satisface a la anterior restricción.

5.5.3 Bola

La bola es un cuerpo esférico que presenta un hueco cilíndrico, de longitud h , en su centro. Un diagrama ilustrativo es el mostrado en la figura 5.3

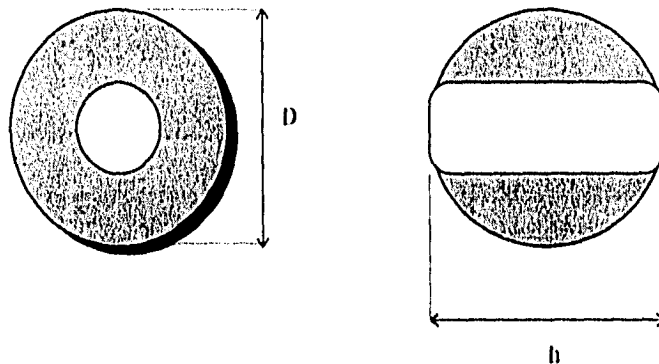


Figura 5.3 Esquema de la bola

El espesor mínimo de la bola se diseñó suponiendo a la bola como una barra hueca de sección cilíndrica sometida a flexión. Esto debido a que en caso de cierre total, la bola es la que resistirá casi toda la carga.

La barra tendrá que resistir una carga equivalente a la presión interna de la válvula multiplicada por el área sobre la cual actúa esta última. Esto es

$$F = P \cdot A_{\text{proy}}$$

donde F es la fuerza, P la presión interna del recipiente (117bar) y A_{proy} el área sobre la cual actúa la presión.

El área sobre la que actúa la presión es

$$A_{\text{proy}} = \frac{\pi}{4} \cdot d_0^2 \quad (5.11)$$

donde d_0 es el diámetro interno de la tubería, que en este caso será de .4064 m. De este modo, la carga a la que estará sometida la bola será de 1.518 MN (esta sin considerar el peso de la bola, que es mucho menor).

El esfuerzo máximo que puede resistir la barra en su sección más delgada se calcula

$$\sigma = \frac{M \cdot \rho}{I} \quad (5.12)$$

donde M es el momento aplicado a la barra, ρ el radio de curvatura (que en este caso es igual al radio externo de la barra), I es el momento de inercia de la barra.

El Momento máximo aplicado a la barra se calcula como

$$M = F \cdot r_{\text{bola}} \quad (5.13)$$

Como el radio de la bola es de 22.86 E-2 m, el momento aplicado es de 347 kN m.

El momento de inercia de la sección en estudio se calcula

$$I = \frac{\pi}{64} (d_1^4 - d_0^4) \quad (5.14)$$

donde d_1 y d_0 son los diámetros externo e interno de la barra, que en este caso valen .4318 m y .4064 m, respectivamente.

Finalmente el esfuerzo máximo a resistir por la barra será de aproximadamente 198 Mpa, que comparado con los 276 Mpa que resiste el material se obtiene un buen margen de seguridad. Hay que recordar que la barra en la realidad es un cuerpo esférico de sección variable, y la estimación realizada anteriormente es una buena aproximación.

5.5.4 Diámetro del vástago

Para calcular el diámetro del vástago, primero es necesario conocer el par al cual pudiera estar sometido este último.

La bola ejerce una carga sobre los asientos (ver figura 5.1), o en el peor de los casos sobre el metal, equivalente a su peso. Por lo que dicha carga puede calcularse

$$F = m \cdot g = \rho \cdot V \cdot g \quad (5.15)$$

donde F es la fuerza ejercida por la bola sobre los sellos, m la masa de la bola, V el volumen de ésta, ρ la densidad del material (acero, $\rho=7850 \text{ kg/m}^3$) y g la aceleración de la gravedad.

La bola, como se describió anteriormente, es un cuerpo esférico que presenta un hueco cilíndrico al centro del mismo, como se observa en la figura 5.3, por lo que el volumen de ésta puede estimarse empleando la siguiente ecuación

$$V = \frac{\pi \cdot h^3}{6} \quad (5.16)$$

Si $h=40.12\text{E}-2$ m, el volumen de la bola será de $V=33.81\text{E}-3 \text{ m}^3$.

Por tanto, la carga ejercida por la bola, ecuación 5.15, será de 2.6 kN.

La fuerza necesaria para hacer girar la bola es de

$$F > \mu \cdot N \quad (5.17)$$

donde μ es el coeficiente de fricción estático y N la fuerza normal resultante.

Considerando, en el peor de los casos, que la bola girara sobre el cuerpo, el coeficiente de fricción estática será de $\mu=0.6$ [42], y la fuerza mínima para hacer rotar el cuerpo de la bola tendrá que ser mayor que 1.56 kN. Para facilitar cálculos posteriores y tener un margen de seguridad, tomaremos una fuerza de $F=1.75$ kN.

Momento Torsionante a resistir

El momento torsionante que deberá resistir el vástago es equivalente a la fuerza necesaria para rotar al cuerpo de la bola multiplicado por el radio de giro sobre la cual actúa, esto es

$$T = F \cdot c \quad (5.18)$$

donde T es el momento, F la fuerza y c el radio de giro (en nuestro caso es el radio del cuerpo esférico -ver figura 5.-; $c=286$ m).

Por lo que el par que deberá resistir la barra será de 0.5 kN m.

Finalmente, diseñando el vástago como una barra circular sometida a torsión, tendremos que el esfuerzo torsionante máximo (τ) soportado por dicha barra se calcula

$$\tau = \frac{T \cdot r}{J} \quad (5.19)$$

donde T es el momento torsionante aplicado a la barra, r el radio de la barra y J el momento polar de inercia de la sección transversal de la barra (para una barra circular maciza se calcula como

$J = \frac{\pi \cdot r^4}{2}$). Ya que el vástago es una barra de acero AISI 1030 templado y revenido,

($\sigma=621$ MPa), y sabiendo que $\tau = \frac{\sigma}{2}$, se tiene que el radio mínimo del vástago será de $r=1.012$ E-

2 m. Pero si empleamos una barra de $r=2.2225$ E-2 m ($d=1.75$ in), la barra podrá resistir dicho par, con un factor de seguridad de 3.4. Dicho factor es bueno, ya que es imprescindible que no se fracture la barra durante la operación de cierre de la válvula.

5.5.5 Pernos y juntas del sello del vástago.

El sello del vástago es muy importante, debido a que en caso de que falle el sello del asiento de la bola, éste es el encargado de mantener la hermeticidad de la válvula.

El sello del vástago consta de 3 juntas tóricas 43.8X7 de vitón, y un disco de acero.

Dicho disco se encuentra ensamblado al cuerpo de la válvula mediante tornillos de ensamble (fig. 5.4). El cálculo de dichos tornillos se realizó de manera análoga que para los tornillos de ensamble del cuerpo.

El cálculo de los pernos de sujeción esta dado por la ec. 5.3

$$N = \frac{C \cdot F \cdot S \cdot F}{S_p \cdot A_t \cdot 0.25}$$

La constante de rigidez de la unión C se calcula, al igual que para los pernos del cuerpo de la bola, empleando las ecuaciones 5.4, 5.5, 5.6, 5.7 y 5.8.

El área de esfuerzo de tensión A_t y la resistencia de fluencia del material S_p se obtienen de la literatura /35/.

Carga a soportar (F)

La fuerza que deben soportar los pernos se calcula de la siguiente manera

$$F = P \cdot A_{proy}$$

donde F es la fuerza, P la presión del recipiente (117bar, en el peor de los casos) y A_{proy} el área sobre la cual actúa la presión.

El área sobre la que actúa la presión es

$$A_{pny} = \frac{\Pi}{4} (d_1^2 - d_0^2)$$

donde $d_1=0.05715\text{m}$ y $d_2=0.04445\text{m}$, como se observa en la figura 5.4.

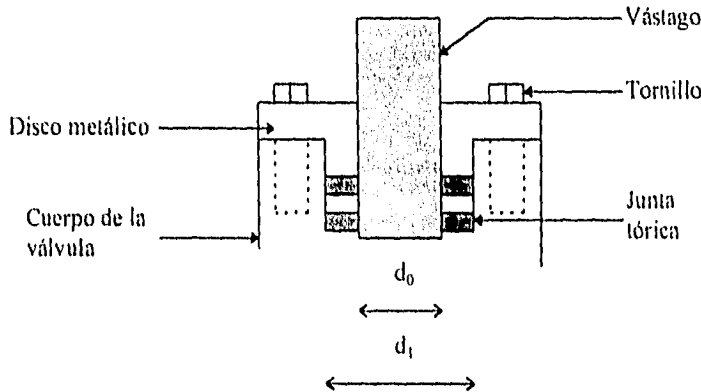


Figura 5.4 Esquema de los pernos y junta del sello del vástago

Por lo que la fuerza aplicada sobre los pernos será de 11.857 kN.

Se seleccionaron pernos de acero templado y revenido cuyas características físicas y mecánicas que se muestran a continuación en la tabla 5.4.

Tabla 5.4 Características físicas y mecánicas de los pernos

ϕ perno mm	long. perno mm	long rosc mm	A_T mm ²	l_T mm	A_d m ²	l_d mm	E GPa	S_p MPa	Carga a soportar kN
5	20	16	14.2	9.7	1.01E-4	4	200	600	11.857

Las características de los barrenos se muestran en la tabla 5.5. La literatura /35/ recomienda emplear una longitud del barrenado igual o mayor al diámetro del perno.

Tabla 5.5 Características físicas y mecánicas de las partes a unir

ϕ barreno mm	longitud del barreno mm	longitud a unir (l) mm	E GPa	S_p MPa	long. arandela mm
5	6.3	13.7	200	276	1

Sustituyendo las anteriores características en las ecuaciones 5.3, 5.4, 5.5, 5.6, 5.7 y 5.8, obtendremos las características mecánicas del ensamble. Dichas características se muestran a continuación en la tabla 5.6.

Tabla 5.6 Características mecánicas del ensamble (pernos-bridas).

ϕ pernos (mm)	A_T mm^2	k_T MN/m	k_d MN/m	k_b MN/m	k_m MN/m	C	F.S.	Nº pernos
5	14.2	292.78	981.75	225.52	968.38	.1889	7.62	8

Por lo que los tornillos a emplear serán del tipo **M5x20**.
Se emplearon 8 tornillos considerando la restricción de

$$3 \leq \frac{\Pi \cdot D_\phi}{n \cdot d} \leq 6$$

donde D_ϕ es el diámetro del círculo de colocación de los pernos, d el diámetro de los pernos y n el número de pernos.

Por cuestiones de espacio y ubicación, se seleccionó un diámetro del círculo de los tornillos de .0762 m (3 in), cumpliéndose así con la anterior restricción.

5.5.6 Chaveta y Elemento principal de transmisión del par.

5.5.6.1 Chaveta de transmisión

El vástago de la válvula se encuentra acoplado a un pequeño elemento secundario de transmisión mediante una chaveta cuadrada, de acero AISI 1035 estirado en frío ($\sigma_f=460\text{MPa}$), como la mostrada en la figura 5.5.

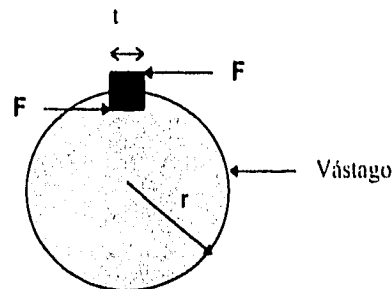


Figura 5.5 Chaveta y Chavetero del vástago

El cubo de la chaveta depende del diámetro del vástago, por lo que para un diámetro de 1 3/4 in se emplea una chaveta de 3/8 in de largo por 1/4 in de alto. La longitud de la chaveta se calcula como sigue.

Resistencia al cortante /35/

La resistencia la cortante de la chaveta σ_c se calcula como

$$\sigma_c = \frac{F \cdot F.S.}{t \cdot l} \quad (5.20)$$

donde F es la fuerza aplicada sobre la chaveta, $F.S.$ el factor de seguridad, l la longitud de la chaveta y t el ancho de la chaveta.

También sabemos que la resistencia al cortante de un material se define como la resistencia de fluencia del material multiplicado por una constante, que en éste caso será de 0.577. Esto es $\sigma_c = 0.577 \cdot \sigma_f$.

Por lo que empleando una chaveta de acero AISI 1030 estirado en frío, y un $F.S.$ de 2.8, se tiene que, de la ec. 5.20, la longitud de la chaveta será de 2.49 E-2 m.

Resistencia al aplastamiento /35/

La resistencia al aplastamiento de la chaveta σ_n se calcula como /35/

$$\sigma_n = \frac{F \cdot F.S.}{l \cdot t} \quad (5.21)$$

donde F es la fuerza aplicada sobre la chaveta, $F.S.$ el factor de seguridad, l la longitud de la chaveta y t el ancho de la chaveta.

La resistencia al aplastamiento del material se define como la mitad resistencia de fluencia del material. Esto es $\sigma_n = 0.5 \cdot \sigma_f$. Empleando los valores anteriormente dados para la resistencia de fluencia del material y el $F.S.$, la longitud para este caso será de $l = 28.76E-2$ m.

Finalmente tomaremos, por conveniencia, una chaveta cuadrada de longitud de 28.575 E-2 m (1 1/8 in).

5.5.6.2 Elemento principal de transmisión del par

Dicho elemento presenta dos secciones, una sección cilíndrica hueca en un extremo, mientras que en el otro una barra rectangular (ver figura 5.6). La sección cilíndrica se acopla al vástago mediante una chaveta. La sección rectangular sirve para transmitir directamente el par necesario para hacer girar a la bola.

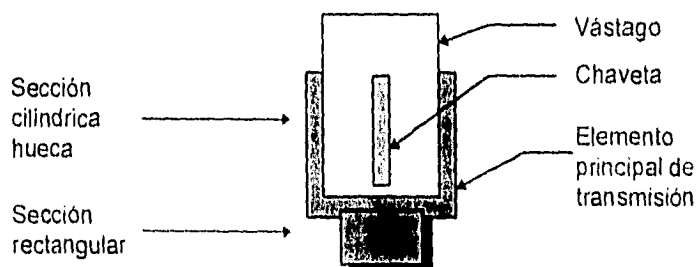


Figura 5.6 Ensamble del vástago y el elemento principal de transmisión del par.

Resistencia de la sección cilíndrica hueca

Al igual que en el vástago, diseñando a éste elemento por torsión tendremos que el momento de inercia polar en este caso se calcula como

$$J = \frac{\pi(d_1^4 - d_0^4)}{32} \quad (5.22)$$

donde en este caso d_1 es el diámetro exterior y d_0 el diámetro interior de la sección cilíndrica.

Pero considerando también que en una sección de dicha pieza existe un chavetero, se realizó el cálculo para el diámetro del chavetero. Estos resultados se pueden observar en la tabla 5.7

Tabla 5.7 Resultados calculados

Sección	d_1 m	d_0 m	J m^4	T MPa
cilíndrica	57.15 E-3	44.45 E-3	6.64E-7	21.5
cuñero	57.15 E-3	50.8 E-3	3.93E-7	36.0

Por lo que el esfuerzo cortante máximo, como se observa en la tabla, será de 36 Mpa. El esfuerzo cortante máximo que puede resistir el material es igual a la mitad del esfuerzo de fluencia que presenta el material, que en este caso es acero AISI 1030 normalizado ($\sigma_f=521$ MPa).

Por lo que el factor de seguridad de la pieza se estima en aproximadamente 7.

Sección Rectangular

Este, al igual que la anterior sección, se diseña por torsión. El esfuerzo máximo aplicado en una sección rectangular se calcula como

$$\sigma_t = \frac{9 \cdot M}{2 \cdot b \cdot h^2} \quad (5.23)$$

donde M es el momento total aplicado a la sección, b y h son el ancho y alto de la sección transversal.

El momento aplicado es de 0.5 kN m (ver cálculo del par de torsión del vástago), y el ancho y alto de la sección son de 0.05715 m y 0.04445 m respectivamente.

Entonces el esfuerzo máximo aplicado será de 15.5 Mpa. Por lo que el factor de seguridad del diseño se estima en aproximadamente 17, (16.8).

5.5.7 Bridas y pernos de ensamble

Se seleccionaron bridas de ensamble para 300 lb, Norma ANSI B16.5 /37/, con características como las mostradas en la figura 5.7 y la tabla 5.8 a continuación.

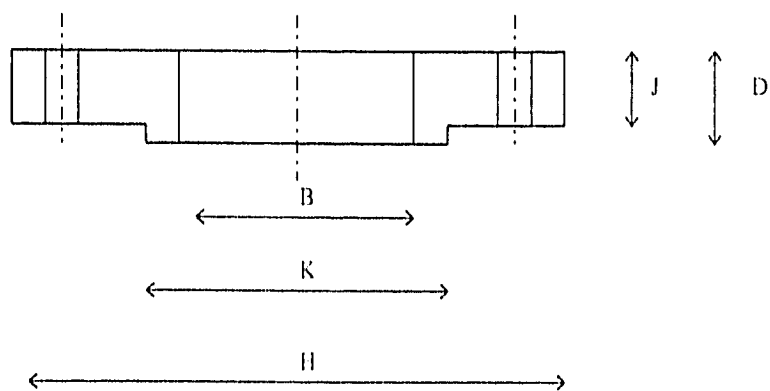


Figura 5.7 Brida estandarizada

Tabla 5.8 Características de las bridas

Diámetro in (m)	B in	D in	J in	K in	H in	No. barrenos	Diámetro pernos in	Círculo pernos in	Junta anillo in
16 (0.4064)	16	2 5/16	2.25	19	25.5	20	1 1/4	22 1/2	8 1/4

5.5.8 Asientos del sello de la bola

Debido a sus características y propiedades mecánicas y térmicas, se seleccionaron asientos del sello del tipo TFE.

5.5.9 Pintura

El objeto principal de la pintura es la conservación de las superficies de acero. La pintura retarda la corrosión, 1.-evitando el contacto de los agentes corrosivos con la superficie del recipiente (válvula); y 2.- por su acción inhibidora de la oxidación debida a las propiedades electroquímicas del material de la pintura.

El tipo de pintura se selecciona dependiendo del tipo de atmósfera o condiciones a las que estará sometida la superficie o recipiente expuesto.

Por lo que para la válvula de acero, empleando el sistema de pinturas SSPC-PS 6.02 (ver tablas I, II, III, IV y IV, de los sistemas de pinturas /37/), se seleccionó la pintura mostrada en la tabla 5.9.

Tabla 5.9 Sistema de pintura a emplearse en la superficie exterior de la válvula

N° de sistema SSPC-PS	Condición	Preparación de la superficie	Pretratamiento	Pintura	Espesor de la pintura seca, milésimas in.
6.02	Recipientes de acero y estructuras flotantes expuestas a agua fresca o salada, agua sucia y a la intemperie	Limpieza química con número de especificación SSPC-SP-8-63	Mano de lavado (Primario de lavado). Básico de cromato de Zinc y Butiral Vinílico	Pintura; base plomo rojo, mezclada y lista para usarse. Primario; tipo vinílico con plomo rojo, número: MIL-P-15929B	7.0 (5 manos de pintura)

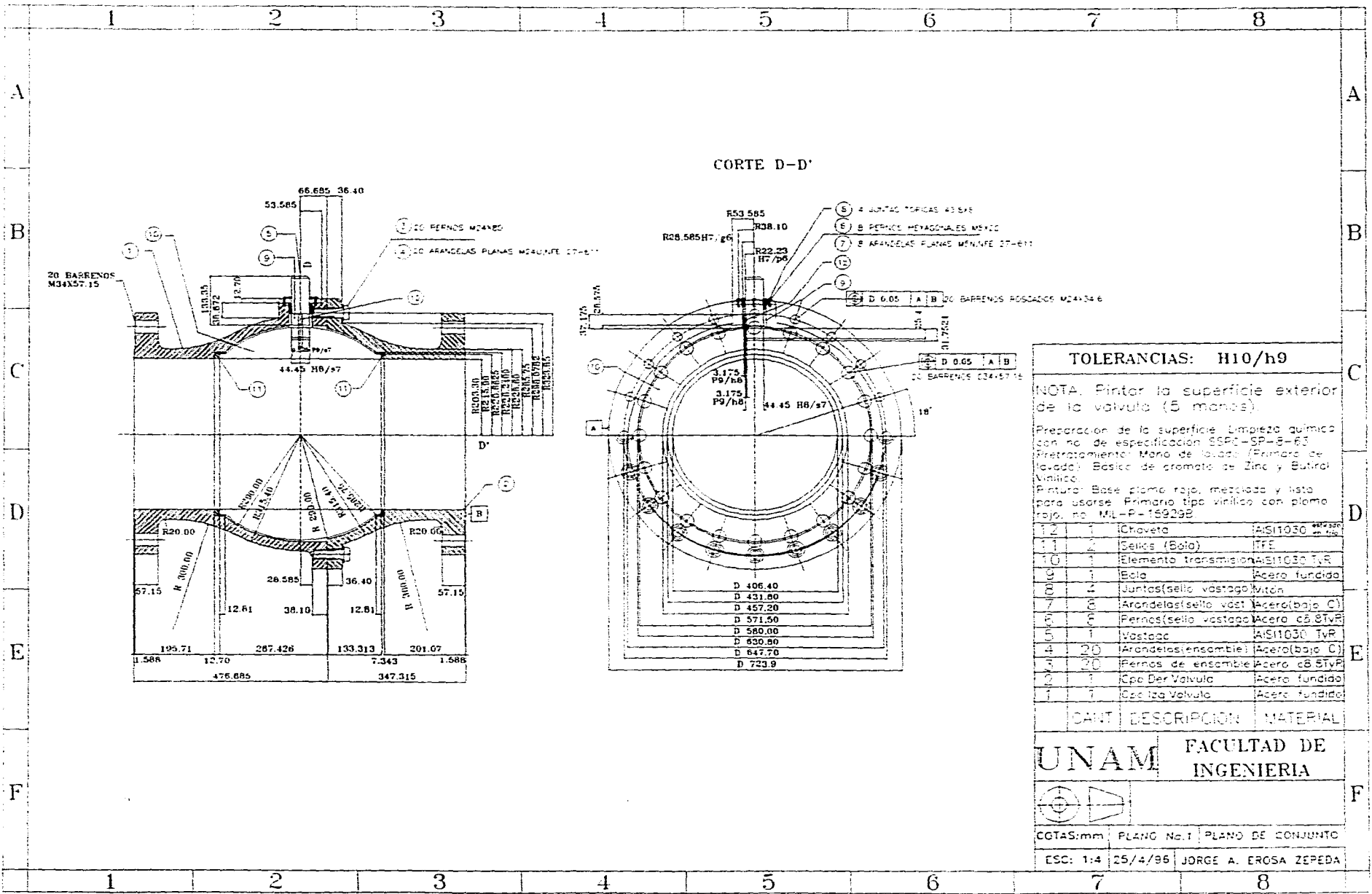
NOTAS:

* Limpieza química.

Consiste en la eliminación completa de las escamas de laminación, herrumbre y escamas de oxidación mediante los procesos de reacción química, electrólisis o ambos. La superficie debe quedar sin restos de ácido, álcali y lodos que no hayan reaccionado o sean perjudiciales.

** Mano de Lavado (Primario de lavado) Básico de cromato de Zinc y Butiral Vinílico.

Pretratamiento que reacciona con el metal y, al mismo tiempo forma una película protectora de vinilo que contiene un pigmento inhibidor para ayudar a evitar la oxidación.



CORTE D-D'

TOLERANCIAS: H10/h9

NOTA: Pintar la superficie exterior de la valvula (5 manos).
 Preparacion de la superficie Limpieza quimica con no. de especificacion SSPC-SP-8-63
 Pretratamiento Manoj de lavado (Primerio de lavado) Basico de cromato de Zinc y Butiral Vinilico.
 Pintura: Base plomo rojo, mezclado y listo para usarse. Primerio tipo vinilico con plomo rojo, no. ML-P-159298

CANT	DESCRIPCION	MATERIAL
12	1 Chaveta	AS11030
11	2 Sellos (Bola)	TFE
10	1 Elemento transmision	AS11030 tvR
9	1 Bola	Acero fundido
8	2 Juntas(sello vastago)	viton
7	2 Arandelas(sello vast)	Acero(bajo C)
6	6 Pernos(sello vastago)	Acero c8 8TVR
5	1 Vastago	AS11030 tvR
4	20 Arandelas(ensamble)	Acero(bajo C)
3	20 Pernos de ensamble	Acero c8 8TVR
2	1 Cpo Der Valvula	Acero fundido
1	1 Cpo Iza Valvula	Acero fundido

UNAM FACULTAD DE INGENIERIA



COTAS:mm PLANO No.1 PLANO DE CONJUNTO

ESC: 1:4 25/4/96 JORGE A. EROSA ZEPEDA

6. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

6.1 CONCLUSIONES

1.- Se desarrolló un programa que permite calcular la descarga de hidrocarburos debido a la ruptura de una línea de conducción.

Varios modelos matemáticos analíticos de descargas fueron estudiados para poder simular la descarga de gas, a través de la ruptura de una tubería en diferentes formas y para varias condiciones de operación. Para el caso de los modelos uninodal y unidimensional de descarga de líneas de transporte de hidrocarburos gaseosos, la precisión de los resultados obtenidos de los modelos depende mucho de la relación l/D de la tubería. Generalmente cuando el factor l/D aumenta, las predicciones hechas por estos dos modelos no tienden a ser precisas, y tendría que usarse un modelo numérico. Sin embargo, para relativamente bajos valores de l/D , todos los modelos analíticos proveen predicciones razonables y por eso el modelo de un nodo puede ser utilizado con exactitud.

En el caso del modelo de flujo bifásico, se emplea un modelo de solución numérica que permite predecir con exactitud la descarga del gas fugado. Para este modelo se tuvo que desarrollar un programa que calcule las propiedades termodinámicas del propano. El programa se basa en las funciones polinomiales desarrolladas por Reynolds [22], y permite ahorrar significativamente tiempo de cómputo.

2.- Se desarrolló un programa que permite predecir la dispersión de la nube de hidrocarburo generada por la ruptura de una línea de transporte.

Se desarrolló un modelo numérico de plumas flotantes para condiciones atmosféricas típicas. Dicho modelo permite predecir la dispersión de la nube de hidrocarburo generada por la ruptura de una línea de transporte, apoyándose en el código PHOENICS, en donde las ecuaciones diferenciales básicas de mecánica de fluidos se resuelven mediante la integración sobre el volumen finito de una celda de computación y sobre un intervalo de tiempo finito. El modelo κ - ϵ fue aplicado para la simulación de la dispersión turbulenta de vapor que escapa de la ruptura.

La dispersión del afluente tiene lugar en una zona muy cercana a la descarga. Por eso la variación de la densidad no es grande y la aproximación de Boussinesq es aplicable para las descargas típicas industriales. El nivelado de la pluma en una atmósfera estable ocurre a una altura menor que en una atmósfera neutra. El uso de flujo de calor hacia abajo del dominio del interés es una buena técnica alternativa para simulación de la atmósfera estable.

El desarrollo y empleo del modelo de cálculo de concentraciones para una mezcla bicomponente en una atmósfera neutra es de gran importancia, debido a que ninguno de los modelos anteriormente empleados pueden realizar predicciones confiables de una pluma que se descarga a una temperatura igual que la prevaleciente en la atmósfera a la que se descarga. No obstante que todavía puede mejorarse este modelo, se obtienen resultados aceptables, cualitativamente hablando.

3.- Se simularon varios tipos de accidentes relacionados con la ruptura de una línea de conducción de hidrocarburos, identificándose los principales parámetros que afectan la descarga y dispersión del hidrocarburo fugado.

Se encontró que los principales parámetros que afectan la descarga y dispersión de los hidrocarburos son: a) velocidad del viento; b) longitud de la tubería (gasto másico); c) tipo de hidrocarburo

La diferencia de temperatura existente entre la descarga y el aire ambiente no es un factor importante en la simulación de un accidente como éste.

La condición de velocidad del viento es muy importante para poder predecir la frontera de inflamabilidad. Ya que a menor condición de viento (1 m/s), mayor será la frontera, y viceversa.

4.- Los programas y modelos desarrollados pueden ser utilizados, en un futuro, como herramientas para la predicción de consecuencias y daños causados por la ruptura de una línea de conducción, así como para el establecimiento de especificaciones, y medidas de seguridad a implementarse en las nuevas líneas de transporte de hidrocarburos.

Se cuenta con una herramienta muy útil, ya que ésta no presenta tantas restricciones (de grandes inventarios descargados; de simulación de efectos transitorios; de suma de efectos de dos o más fuentes de descarga), y además estos programas pueden ser implementados para observar los efectos producidos por una topografía no uniforme.

6.2 RECOMENDACIONES

- 1.- Validar el modelo de dispersión para la mezcla de gases ideales (propano o metano, y aire).
- 2.- Calibrar los modelos, como conjunto, de descarga y dispersión del gas fugado.

REFERENCIAS

1. Morrow, T.B., Bass, R.L., and Lock, J.A., "A LPG Pipe Line Break Flow Model," *ASME Journal Energy Resources Technology*, 1982.
2. Grolmes, M.A., Leung, J.C., and Fauske, H.K., "Two-Phase Flow Discharge of Flashing Liquids Following A pipe Break", *Multi-Phase Flow and Heat Transfer III. Part A : Fundamentals*, T.N.Vezioglu and A.E.Bergles, Elsevier, Amsterdam, 1984, pp.567-574.
3. Leung, J.C., and Grolmes, M.A., "The Discharge of Two-Phase Flashing Flow in a Horizontal Duct," *AIChE J.*, Vol.33, n 3, 1987, p.524
4. Henry R.E., and Fauske, H.K., "The two-phase critical flow of one-component mixtures in nozzles, orifices and short tubes," *J.Heat Transfer*, Vol.95, 1971, pp.179-1987.
5. Leung, J.C., and Epstein, M., "The Discharge of Two-Phase Flashing Flow From an Inclined Duct," *ASME Trans., Journal of Heat Transfer*, Vol.112, n 2, (1990a).
6. Wallis, G.B., "Critical Two-Phase Flow", *International Journal of Multiphase Flow*, 1980, Vol.6, pp.97-112.
7. Leung, J.C., "A Generalized Correlation for One Component Homogeneous Equilibrium Flashing Choked Flow," *AIChE J.*, Vol.32, n 10, 1986, p.1743
8. Moody, F.J., "Maximum Two-Phase Vessel Blowdown from Pipes," *ASME Trans., Journal of Heat Transfer*, Vol.88, p.285, 1966.
9. Fairuzov, Yu.V., Bredikhin, V.V., "Two-Phase Cooling System with A Jet Pump For Spacecraft", *AIAA Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol.9, No.1, April-June 1995, pp. 285-291.
10. Dobran, F., "Nonequilibrium Modeling of Two-Phase Critical Flows in Tubes," *Journal of Heat Transfer*, Vol.109, 1987, pp.731-738
11. Woodward, J.L., "Expansion Zone Modeling of Two-Phase and Gas Discharges," *Journal of Hazardous Materials*, Vol.33, n 2, 1993, pp.307-318
12. McKee, R.J., "Simplified Blowdown Calculation," *Pipeline and Gas Journal*, Vol.217, n 4, Apr. 1990, pp.40-43
13. Fauske, H.K., "Flashing Flows-Some Practical Guidelines For Emergency Releases," *Plant/Operations Progress*, Vol.4, n 3, 1985, p.132.
14. Nyren, K., and Winter, S., "Discharge of Condensed Sulfur Dioxide: A Field Test Study of The Source Behavior with Different Release Geometries," *Journal of Hazardous Materials*, Vol.14, n 3, Mar 1987, pp.365-386.
15. Cugan, K., "Unconfined vapor explosions," *The Institution of Chemical Engineers*, 1979.
16. Hjertager, B.H., "Influence of Turbulence on Gas Explosions," *Journal of Hazardous Materials*, No.9, 1984, pp315-346.

17. Magnussen, B.F. and Hjertager, B.H., "On Mathematical Modelling of Turbulence Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion," 16th Int. Symposium on Combustion, 1976, pp. 719-729.
18. Kjadman, L. and Huntanen, R., "Numerical Simulation of Vapor Cloud and Dust Explosions," Numerical Simulation of Fluid Flow and Heat/Mass Transfer Processes, Lecture Notes in Engineering, Edited by C.A. Brebbia and S.A. Orszag, Springer-Verlag, No. 18, 1986, pp. 148-158
19. Botros, K. K., Jungowski, W. M., Weiss, M. H., "Models and Methods of Simulating Gas Pipeline Blowdown", The Canadian Journal of Chemical Engineering, Volume 67, 1989, pp. 529-539.
20. Richardson, S. M., Saville, G., "Blowdown of Pipelines", Society of Petroleum Engineers, SPE 23070, London, pp. 369-377.
21. Cowser, K. E., "Consequences of Effluent Release", Nuclear Safety, Vol. 12, No. 1, 1971, pp. 15-24.
22. Reynolds, W. C., "Thermodynamic Properties in SI", Department of Mechanical Engineering, Stanford University, Stanford, 1979, pp. 117-159.
23. Starkman, E. S., Schrock, V. E., Neusen, K. F., Maneely, D. J., "Expansion of a Very Low Quality Two-Phase Fluid Through a Convergent-Divergent Nozzle", Journal of Basic Engineering, 1964, pp. 247-256
24. Zhang, X., Ghoniem, A. F., "A computational model for the rise and dispersion of wind-blown, buoyancy-driven plumes-I. Neutrally stratified atmosphere", Atmospheric Environment, Vol. 27A, No. 15, pp 2295-2311, 1993
25. Press, W. H., Flannery, B., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., "Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing", Cambridge University Press, 1986.
26. Gröber, H., Erk, H., and Grigull, U., "Fundamentals of Heat Transfer", McGraw-Hill, New York, 1961.
27. Heisler, M. P., "Temperature Charts for Induction and Constant Temperature Heating" Trans. ASME, 69, 227-236, 1947.
28. Jones, O. C., "Nuclear Reactor Safety Heat Transfer", McGraw-Hill, London, 1981.
29. Gear, C. H., "Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1971.
30. Rodi, W., "Examples of Calculation Methods for Flow and Mixing in Stratified Fluids", Journal of Geophysical Research, vol 92, no C5, pp 5305-5328, 1987.
31. Grundberg, S., "Simulation of the surface layer of a stratified atmosphere using PHOENICS", National Defence Research Establishment, Department of NBC Defence, S-091 82, UMEA.
32. Carslaw, H. S. and Jaeger, J. C., "Conduction of Heat in Solids", Second Edition, Oxford Press, London, 1959.
33. Wark, K., "Termodinámica", Quinta Edición, Mc Graw-Hill, México, 1987, p.p. 110-129, 279-292, 391-409, 803-805.

34. Moran, M. J., Shapiro, H. N., "Fundamentos de Termodinámica Técnica", Segunda Edición, Editorial Reverté, Barcelona, 1994.
35. Shigley, J. E., Mischke, C. R., "Diseño en Ingeniería Mecánica", Quinta Edición, Mc Graw-Hill, México, 1990, p.p. 367-372, 380-400, 414-420, 825, 859, 860.
36. Chevalier, A., "Dibujo Industrial", Segunda Edición, UTEHA-Grupo Noriega Editores, México, 1992, p.p. 56-60, 124-127, 132-142, 155-157.
37. Megyesy, E. F., "Manual de Recipientes a Presión", Limusa-Grupo Noriega Editores, México, 1992.
38. Popov, E., "Introducción a la Mecánica de Sólidos", Octava Edición, Editorial Limusa, México, 1990, p.p. 183-197, 412, 414.
39. White, F. M., "Mecánica de Fluidos", Mc Graw-Hill, México, 1993, p.p. 67-77, 228-252.
40. Seinfeld, J. H., "Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution", John Wiley & Sons, New York, 1986.
41. Beer, F. P., Johnston, E. R., "Vector Mechanics for Engineers. Statics & Dynamics", Mc Graw-Hill, México, 1962, p.p. 274 -277, 313-347.
42. Gieck, K., "Engineering Formulas", Second Edition, Mc Graw-Hill, México, 1974, pp.C3, P7, Q10.
43. Fairuzov, Y. V., Erosa, J. A., "Descarga de flujo bifásico transitorio de líquidos que se evaporan instantáneamente causada por un rompimiento en una tubería larga de conducción. (Informe Final)" Instituto de Ingeniería, U.N.A.M., México, 1996
44. INE-SEDESOL, "Informe de la Situación General en Materia de Equilibrio Ecológico y Protección al Ambiente: 1991-1992" INE-SEDESOL, 1993, p.p. 139,140.
45. Fairuzov, Y. V., Erosa, J. A., Rosas, A., "The influence of heat transfer on two-phase flow behavior during pipeline blowdown", (on revision), ASME, 1996

APÉNDICE 1

PRÓGAMA PRINCIPAL Y SUBROUTINAS DE CÁLCULO (GROUND.F)

```

C PROGRAM MAIN
C FILE NAME GROUND.FTN-----200190
C
C THIS IS THE MAIN PROGRAM OF EARTH
C
C (C) COPYRIGHT 1984, LAST REVISION 1989.
C CONCENTRATION HEAT AND MOMENTUM LTD. ALL RIGHTS RESERVED.
C THIS SUBROUTINE AND THE REMAINDER OF THE PHOENICS CODE ARE
C PROPRIETARY SOFTWARE OWNED BY CONCENTRATION HEAT AND MOMENTUM
C LIMITED, 40 HIGH STREET, WIMBLEDON, LONDON SW19 5AU, ENGLAND.
C
C
C PROGRAM MAIN
C
C 1 THE FOLLOWING COMMON'S, WHICH APPEAR IDENTICALLY IN THE
C SATELLITE MAIN PROGRAM, ALLOW UP TO 50 DEPENDENT VARIABLES TO
C BE SOLVED FOR (OR THEIR STORAGE SPACES TO BE OCCUPIED BY
C OTHER VARIABLES, SUCH AS DENSITY). IF A LARGER NUMBER IS
C REQUIRED, THE PARAMETER NUMPHI SHOULD BE RESET TO THE REQUIRED
C LARGER NUMBER. NUMBERS LESS THAN 50 ARE NOT PERMITTED.
C
C PARAMETER (NUMPHI=50, NM=NUMPHI,NM4=NM*4)
C
C COMMON/LGE4/L4(NM)
C 1/LDB1/L5(NM)/IDA1/I1(NM)/IDA2/I2(NM)/IDA3/I3(NM)/IDA4/I4(NM)
C 1/IDA5/I5(NM)/IDA6/I6(NM)/GI1/I7(NM)/GI2/I8(NM)/HDA1/IH1(NM)
C 1/GH1/IH2(NM)/RDA1/R1(NM)/RDA2/R2(NM)/RDA3/R3(NM)/RDA4/R4(NM)
C 1/RDA5/R5(NM)/RDA6/R6(NM)/RDA7/R7(NM)/RDA8/R8(NM)/RDA9/R9(NM)
C 1/RDA10/R10(NM)/RDA11/R11(NM)
C 1/GR1/R12(NM)/GR2/R13(NM)/GR3/R14(NM)/GR4/R15(NM)
C 1/PIP1/IP1(NM)/HPIP2/IHP2(NM)/RPIP1/RVAL(NM)/LPIP1/LVAL(NM)
C 1/IFPL/IPL0(NM)/RFPL1/ORPRIN(NM)/RFPL2/ORMAX(NM)
C 1/RFPL3/ORMIN(NM)/IDA7/ID7(NM)/IDA8/ID8(NM)
C LOGICAL L1,L2,L3,L4,L5,DBGFIL,LVAL
C CHARACTER*4 IH1,IH2,IHP2,NSDA
C
C COMMON/F01/I9(NM4)
C COMMON/DISC/DBGFIL
C COMMON/LUNITS/LUNIT(60)
C
C EXTERNAL WAYOUT
C
C 2 SET DIMENSIONS OF DATA-FOR-GROUND ARRAYS HERE. WARNING: THE
C CORRESPONDING ARRAYS IN THE MAIN PROGRAM OF THE SATELLITE
C (SEE SATLIT) MUST HAVE THE SAME DIMENSIONS.
C PARAMETER (NLG=20, NIG=200, NRG=100, NCG=10)
C

```

```

COMMON/LGRND/LG(NLG)/IGRND/IG(NIG)/RGRND/RG(NRG)/CGRND/CG(NCG)
LOGICAL LG
CHARACTER*4 CG
C
C 3 SET DIMENSIONS OF DATA-FOR-GREX ARRAYS HERE. WARNING: THE
C CORRESPONDING ARRAYS IN THE MAIN PROGRAM OF THE SATELLITE
C (SEE SATLIT) MUST HAVE THE SAME DIMENSIONS.
PARAMETER(NLSG=20, NISG=20, NRSNG=100,NCSG=10)
C
COMMON/LSG/LSGD(NLSG)/ISG/ISGD(NISG)/RSG/RSGD(NRSNG)/CSG/CSGD(NCSG)
LOGICAL LSGD
CHARACTER*4 CSGD
C
C 4 SET DIMENSION OF PATCH-NAME ARRAY HERE. WARNING: THE ARRAY
C NAMPAT IN THE MAIN PROGRAM OF THE SATELLITE MUST HAVE THE
C SAME DIMENSION.
PARAMETER (NPNAM=5000)
C
COMMON/NPAT/NAMPAT(NPNAM)
COMMON/LWFUN1/DOSKIN(NPNAM)
COMMON/LWFUN2/DHCHKD(NPNAM)
CHARACTER*8 NAMPAT
C
C CONFIG FILE NAME DECLARATION.
COMMON/CNFG/CNFIG
CHARACTER CNFIG*48
C
C 5 THE NUMBERS IN THE NEXT STATEMENT INDICATES HOW MUCH COMPUTER
C MEMORY IS TO BE SET ASIDE FOR STORING THE MAIN AND AUXILIARY
C VARIABLES. THE USER MAY ALTER THEM IF HE WISHES, TO ACCORD
C WITH THE NUMBER OF GRID NODES AND DEPENDENT VARIABLES HE IS
C CONCERNED WITH.
PARAMETER (NFDIM=1300000)
C
COMMON F(NFDIM)
C
C 6 THE FOLLOWING THREE STATEMENTS CONCERN STORAGE FOR THE PATCH-WISE
C VARIABLES. IF MORE THAN 30 PATCH-WISE VARIABLES ARE REQUIRED
C NPVDM SHOULD BE INCREASED AND THE COMMON BLOCK /LBPV/ IN THE
C INCLUDE FILE GRDLOC15 SHOULD BE LENGTHENED.
PARAMETER (NPVDM=30)
COMMON/INDPV/NPVMX,NIMAX,NITOT,L0PV(NPVDM)
C
CALL SUB2(NPVMX,NPVDM,NIMAX,NPVDM)
C
CALL CNFGZZ(2)
CALL EARSET(1)
CALL OPENFL(6)
C
CALL MAIN1(NFDIM,NUMPHI,NLSG,NISG,NRSNG,NCSG,NLG,NIG,NRG,NCG)
CALL WAYOUT(0)
STOP
END
C

```

```

C
C.....
SUBROUTINE GROSTA
  INCLUDE 'SATEAR'
  INCLUDE 'GRDLOC'
  INCLUDE 'GRDEAR'
C
C.... THIS SUBROUTINE ACTS AS A JUNCTION-BOX, DIRECTING CONTROL TO
C THE GROUNDS SELECTED BY THE SATELLITE SETTINGS OF USEGRX,
C NAMGRD & USEGRD.
C
C SUBROUTINE GREX CONTAINS OPTIONS FOR FLUID PROPERTIES,
C TURBULENCE MODELS, WALL FUNCTIONS, CHEMICAL REACTION ETC.
C THE VERSION OF GREX SUPPLIED WITH PHOENICS 1.5 IS GREX3.
C EARLIER REVISIONS OF GREX CAN BE USED WITH CARE.
C
C IF(USEGRX) CALL GREX3
C
C.... SPECGR, SPC1GR, SPC2GR and SPC3GR are names which the user may
C give to "special GROUNDS" of his own.
C
C IF(NAMGRD.NE.'NONE') THEN
C   IF(NAMGRD.EQ.'SPEC') THEN
C     CALL SPECGR
C   ELSE IF(NAMGRD.EQ.'SPC1') THEN
C     CALL SPC1GR
C   ELSE IF(NAMGRD.EQ.'SPC2') THEN
C     CALL SPC2GR
C   ELSE IF(NAMGRD.EQ.'SPC3') THEN
C     CALL SPC3GR
C
C ELSE
C   CALL WRITBL
C   CALL WRITST
C   CALL WRIT40('NAMGRD set but no CALL made, ie.    ')
C   CALL WRIT1A('NAMGRD ',NAMGRD)
C   CALL WRIT40(' Permissible calls for this GROSTA are:-')
C   CALL WRIT40('SPEC, SPC1, SPC2, SPC3,    ')
C   CALL WRIT40('Use upper case only!!    ')
C   CALL WRITST
C   CALL WRITBL
C   CALL WAYOUT(2)
C ENDIF
C ENDIF
C
C.... The subroutine GROUND attached to the bottom of this file is
C an unallocated blank form into which the user can insert his
C own FORTRAN sequences. The PIL parameter USEGRD governs entry
C to it.
C
C IF(USEGRD) CALL GROUND
C
C.... The data "echo" is called at the preliminary print-out stage.
C IF(IGR.EQ.20) THEN

```

```

IF(ECHO) THEN
  CALL DATPRN(Y,Y,Y,Y, Y,Y,Y,Y, Y,Y,Y,N, Y,Y,Y,Y,
1      Y,Y,Y,Y, Y,Y,Y,Y)
  ELSE
    CALL DATPRN(Y,N,N,N,N,N,N,N,N,N,N,N,N,N,N,N,N,N,N,N,N,N)
  ENDIF
ENDIF
END
C*****
SUBROUTINE GROUND
  INCLUDE 'SATEAR'
  INCLUDE 'GRDLOC'
  INCLUDE 'GRDEAR'
  EQUIVALENCE (IZ,IZSTEP)
CXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX USER SECTION STARTS:
C
C 1 SET DIMENSIONS OF DATA-FOR-GROUND ARRAYS HERE. WARNING: THE
C CORRESPONDING ARRAYS IN THE MAIN PROGRAM OF THE SATELLITE
C AND EARTH MUST HAVE THE SAME DIMENSIONS.
  PARAMETER (NLG=20, NIG=200, NRG=100, NCG=10)
C
  COMMON/LGRND/LG(NLG)/IGRND/IG(NIG)/RGRND/RG(NRG)/CGRND/CG(NCG)
  LOGICAL LG
  CHARACTER*4 CG
C
C 2 USER DIMENSIONS OWN ARRAYS HERE, FOR EXAMPLE:
C DIMENSION GUH(10,10),GUC(10,10),GUX(10,10),GUZ(10)
  PARAMETER(NYDIM=100,NXDIM=100,NZDIM=100)
  DIMENSION GYCOR(NYDIM,NXDIM),GPORO(NYDIM,NXDIM)
  DIMENSION GSEDIM(NYDIM,NXDIM)
  DIMENSION GCONC(NYDIM,NXDIM),GZDIST(NZDIM)
  DIMENSION UVEL(NYDIM,NXDIM),VVEL(NYDIM,NXDIM)
  DIMENSION WWEL(NYDIM,NXDIM),VTOT(NYDIM,NXDIM)
  *,GP1(NYDIM,NXDIM),GH1(NYDIM,NXDIM),GTMP1(NYDIM,NXDIM)
  *,GP0(NYDIM,NXDIM),GYC(NYDIM,NXDIM),GV1(NYDIM,NXDIM)
  *,GEP(NYDIM,NXDIM),GKE(NYDIM,NXDIM),GW1(NYDIM,NXDIM)
  *,GU1(NYDIM,NXDIM),GMS(NYDIM,NXDIM),GFLU(NYDIM,NXDIM)
  *,GRHO1(NYDIM,NXDIM),GDRHO1(NYDIM,NXDIM),GM1(NYDIM,NXDIM)
  *,GAREA(NYDIM,NXDIM),GK(NYDIM,NXDIM),GENUL(NYDIM,NXDIM)
  *,GPRAN(NYDIM,NXDIM),GCP(NYDIM,NXDIM),GD1(NYDIM,NXDIM)

  REAL AREA
C 3 USER PLACES HIS DATA STATEMENTS HERE, FOR EXAMPLE:
C DATA NXDIM,NYDIM/10,10/
C
C 4 INSERT OWN CODING BELOW AS DESIRED, GUIDED BY GREX EXAMPLES.
C NOTE THAT THE SATELLITE-TO-GREX SPECIAL DATA IN THE LABELLED
C COMMONS /RSG/, /ISG/, /LSG/ AND /CSG/ CAN BE INCLUDED AND
C USED BELOW BUT THE USER MUST CHECK GREX FOR ANY CONFLICTING
C USES. THE SAME COMMENT APPLIES TO THE EARTH-SPARE WORKING
C ARRAYS EASP1, EASP2,....EASP20. IN ADDITION TO THE EASPS,
C THERE ARE 10 GROUND-EARTH SPARE ARRAYS, GRSP1,....,GRSP10,
C SUPPLIED SOLELY FOR THE USER, WHICH ARE NOT USED BY GREX. IF
C THE CALL TO GREX HAS BEEN DEACTIVATED THEN ALL OF THE ARRAYS

```

```

C   MAY BE USED WITHOUT RESERVATION.
C
  IXL=IABS(IXL)
  IF(IGR.EQ.13) GO TO 13
  IF(IGR.EQ.19) GO TO 19
  GO TO (1,2,3,4,5,6,25,8,9,10,11,12,13,14,25,25,25,25,19,20,25,
125,23,24),IGR
25 CONTINUE
  RETURN
C.....
C
C--- GROUP 1. Run title and other preliminaries
C
  1 GO TO (1001,1002),ISC
1001 CONTINUE
  call make(yg2d)
  call make(grsp1)
  call make(grsp2)
  call make(grsp9)
  call make(grax)
  call make(grax1)
  call make(grax2)
  call make(grax3)
  call make(grax4)
  call make(ga1)
  call make(ga2)
  call make(gyi)
C
C   User may here change message transmitted to the VDU screen or
C   batch-run log file.
  IF(IGR.EQ.1.AND.ISC.EQ.1) THEN
    CALL WRYT40('GROUND file is GRODIFUS.F of: 140394 ')
    CALL WRYT40('PHOENICS version number is : 1.5.3 ')
  ENDIF
C
  RETURN
1002 CONTINUE
  RETURN
C.....
C
C--- GROUP 2. Transience; time-step specification
C
  2 CONTINUE
  RETURN
C.....
C
C--- GROUP 3. X-direction grid specification
C
  3 CONTINUE
  RETURN
C.....
C
C--- GROUP 4. Y-direction grid specification
C

```

```

4 CONTINUE
RETURN
C*****
C
C--- GROUP 5. Z-direction grid specification
C
5 CONTINUE
RETURN
C*****
C
C--- GROUP 6. Body-fitted coordinates or grid distortion
C
6 CONTINUE
RETURN
C*****
C * Make changes for this group only in group 19.
C--- GROUP 7. Variables stored, solved & named
C*****
C
C--- GROUP 8. Terms (in differential equations) & devices
C
8 GO TO (81,82,83,84,85,86,87,88,89,810,811,812,813,814,815)
1,ISC
81 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 -----
C For U1AD.LE.GRND--- phase 1 additional velocity. Index VELAD
RETURN
82 CONTINUE
C * ----- SECTION 2 -----
C For U2AD.LE.GRND--- phase 2 additional velocity. Index VELAD
RETURN
83 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 -----
C For V1AD.LE.GRND--- phase 1 additional velocity. Index VELAD
RETURN
84 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 -----
C For V2AD.LE.GRND--- phase 2 additional velocity. Index VELAD
RETURN
85 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 -----
C For W1AD.LE.GRND--- phase 1 additional velocity. Index VELAD
RETURN
86 CONTINUE
C * ----- SECTION 6 -----
C For W2AD.LE.GRND--- phase 2 additional velocity. Index VELAD
RETURN
87 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 ---- Volumetric source for gala
RETURN
88 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 ---- Convection fluxes
RETURN
89 CONTINUE

```



```

C * ----- SECTION 9 --- Diffusion coefficients
  RETURN
810 CONTINUE
C * ----- SECTION 10 --- Convection neighbours
  RETURN
811 CONTINUE
C * ----- SECTION 11 --- Diffusion neighbours
  RETURN
812 CONTINUE
C * ----- SECTION 12 --- Linearised sources
  RETURN
813 CONTINUE
C * ----- SECTION 13 --- Correction coefficients
  RETURN
814 CONTINUE
C * ----- SECTION 14 --- User's solver
  RETURN
815 CONTINUE
C * ----- SECTION 15 --- Change solution
  RETURN
C
C * SEE THE EQUIVALENT SECTION IN GREX FOR THE INDICES TO BE
C   USED IN SECTIONS 7 - 15
C
C * Make all other group-8 changes in GROUP 19.
C-----
C--- GROUP 9. Properties of the medium (or media)
C
C THE SECTIONS IN THIS GROUP ARE ARRANGED SEQUENTIALLY IN THEIR
C ORDER OF CALLING FROM EARTH.  THUS, AS CAN BE SEEN FROM BELOW,
C THE TEMPERATURE SECTIONS (10 AND 11) PRECEDE THE DENSITY
C SECTIONS (1 AND 3); SO, DENSITY FORMULAE CAN REFER TO
C TEMPERATURE STORES ALREADY SET.
  9 GO TO (91,92,93,94,95,96,97,98,99,900,901,902,903,904,905),ISC
C-----
900 CONTINUE
C * ----- SECTION 10 -----
C For TMP1.LE.GRND----- phase-1 temperature Index TEMP1
  IF(IGR.EQ.9.AND.ISC.EQ.10)THEN
    CALL GETYX(P1,GP1,NYDIM,NXDIM)
    CALL GETYX(H1,GH1,NYDIM,NXDIM)
    DO I=1,NX
      DO J=1,NY
        GTMP1(J,I)=RG(3)*(GH1(J,I)+273.)*(GP1(J,I)+PRESS0)**RG(4)
      END DO
    END DO
    CALL SETYX(LBNAME('TMP1'),GTMP1,NYDIM,NXDIM)
  END IF
  RETURN
901 CONTINUE
C * ----- SECTION 11 -----
C For TMP2.LE.GRND----- phase-2 temperature Index TEMP2
  RETURN

```

```

902 CONTINUE
C * ----- SECTION 12 -----
C For EL1.LE.GRND----- phase-1 length scale Index LEN1
RETURN
903 CONTINUE
C * ----- SECTION 13 -----
C For EL2.LE.GRND----- phase-2 length scale Index LEN2
RETURN
904 CONTINUE
C * ----- SECTION 14 -----
C For SOLVE(TEMP1)----- phase-1 specic heat
RETURN
905 CONTINUE
C * ----- SECTION 15 -----
C For SOLVE(TEMP2)----- phase-2 specic heat
RETURN
91 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 -----
C For RHO1.LE.GRND--- density for phase 1      Index DEN1
CALL GETYX(P1,GP1,NYDIM,NXDIM)
CALL GETYX(TEMP1,GH1,NYDIM,NXDIM)
CALL GETYX(C1,GM1,NYDIM,NXDIM)
DO I=1,NX
DO J=1,NY
GRHO1(J,I)=(GP1(J,I)+PRESS0)/(RG(7)*GH1(J,I)
& *(RG(8)*RG(9)/(GM1(J,I)*(RG(9)-RG(8))+RG(8)))
END DO
END DO
CALL SETYX(LBNAME('RHO1'),GRHO1,NYDIM,NXDIM)

RETURN
92 CONTINUE

C * ----- SECTION 2 -----
C For DRH1DP.LE.GRND--- D(LN(DEN))/DP for phase 1
C                               Index D1DP
CALL GETYX(P1,GP1,NYDIM,NXDIM)
DO I=1,NX
DO J=1,NY
GDRHO1(J,I)=1./(GP1(J,I)+PRESS0)
END DO
END DO
CALL SETYX(D1DP,GDRHO1,NYDIM,NXDIM)

RETURN
93 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 -----
C For RHO2.LE.GRND--- density for phase 2      Index DEN2
RETURN
94 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 -----
C For DRH2DP.LE.GRND--- D(LN(DEN))/DP for phase 2
C                               Index D2DP
RETURN

```

```

95 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 -----
C For ENUT.LE.GRND--- reference turbulent kinematic viscosity
C                               Index VIST
  RETURN
96 CONTINUE
C * ----- SECTION 6 -----
C For ENUL.LE.GRND--- reference laminar kinematic viscosity
C                               Index VISL
  CALL GETYX(C1,GD1,NYDIM,NXDIM)
  DO I=1,NX
  DO J=1,NY

    GENUL(J,I)=GD1(J,I)*(RG(34)-RG(33))+RG(33)

  END DO
  END DO

  CALL SETYX(VISL,GENUL,NYDIM,NXDIM)

  RETURN
97 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 -----
C For PRNDTL( ).LE.GRND--- laminar PRANDTL nos., or diffusivity
C                               Index LAMPR
  IF(PRL.LE.PRNDTL(TEMP)) THEN
  CALL GETYX(C1,GD1,NYDIM,NXDIM)
  DO I=1,NX
  DO J=1,NY
    GENUL(J,I)=GD1(J,I)*(RG(34)-RG(33))+RG(33)
    GK(J,I)=GD1(J,I)*(RG(38)-RG(37))+RG(37)
    GCP(J,I)=GD1(J,I)*(RG(36)-RG(35))+RG(35)
    GPRAN(J,I)=GCP(J,I)*GENUL(J,I)/GK(J,I)

  END DO
  END DO
  CALL SETYX(LAMPR,GPRAN,NYDIM,NXDIM)
  ENDIF

  IF(PRL.LE.PRNDTL(DUST)) THEN
  DO I=1,NX
  DO J=1,NY
    GPRAN(J,I)=GENUL(J,I)/1.E-5
  CALL SETYX(LAMPR,GPRAN,NYDIM,NXDIM)

  END DO
  END DO
  ENDIF

  RETURN
98 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 -----
C For PHINT( ).LE.GRND--- interface value of first phase
C                               Index FII1

```

```

RETURN
99 CONTINUE
C *----- SECTION 9 -----
C For PHINT( ).LE.GRND--- interface value of second phase
C                               Index FII2
RETURN
C-----
C
C--- GROUP 10. Inter-phase-transfer processes and properties
C
10 GO TO (101,102,103,104),ISC
101 CONTINUE
C *----- SECTION 1 -----
C For CFIPS.LE.GRND--- inter-phase friction coeff.
C                               Index AUX(INTFRC)
RETURN
102 CONTINUE
C *----- SECTION 2 -----
C For CMDOT.EQ.GRND- inter-phase mass transfer Index AUX(INTMDT)
RETURN
103 CONTINUE
C *----- SECTION 3 -----
C For CINT( ).EQ.GRND--- phase1-to-interface transfer coefficients
C                               Index COI1
RETURN
104 CONTINUE
C *----- SECTION 4 -----
C For CINT( ).EQ.GRND--- phase2-to-interface transfer coefficients
C                               Index COI2
RETURN
C-----
C
C--- GROUP 11. Initialization of variable or porosity fields
C                               Index VAL
11 CONTINUE
RETURN
C-----
C
C--- GROUP 12. Convection and diffusion adjustments
C
12 CONTINUE
RETURN
C-----
C
C--- GROUP 13. Boundary conditions and special sources
C                               Index for Coefficient - CO
C                               Index for Value - VAL
13 CONTINUE
GO TO (130,131,132,133,134,135,136,137,138,139,1310,
11311,1312,1313,1314,1315,1316,1317,1318,1319,1320,1321),ISC
130 CONTINUE
C----- SECTION 1 ----- coefficient = GRND
IF(INDVAR.EQ.U1)THEN
CALL GETYX(U1,GU1,NYDIM,NXDIM)

```

```

CALL GETYX(LBNAME('RHO1'),GRHO1,NYDIM,NXDIM)
DO IX=IXF,IXL
  CALL GETYX(YG2D,GYC,NYDIM,NXDIM)
  IF(GU1(IY,IX).EQ.0.0)GU1(IY,IX)=1.E-8
  GSPEED=GU1(IY,IX)*GRHO1(IY,IX)
  GMS(IY,IX)=GSPEED*(RG(6)/LOG(GYC(1,1)/RG(5)))**2
ENDDO
CALL SETYX(CO,GMS,NYDIM,NXDIM)
ENDIF
IF(INDVAR.EQ.V1) THEN
CALL GETYX(U1,GU1,NYDIM,NXDIM)
CALL GETYX(V1,GV1,NYDIM,NXDIM)
CALL GETYX(LBNAME('RHO1'),GRHO1,NYDIM,NXDIM)
DO IX=IXF,IXL
  CALL GETYX(YG2D,GYC,NYDIM,NXDIM)
  IF(GU1(IY,IX).EQ.0.0)GU1(IY,IX)=1.E-8
  GSPEED=GU1(IY,IX)*GRHO1(IY,IX)
  GMS(IY,IX)=GSPEED*(RG(6)/LOG(GYC(1,1)/RG(5)))**2
ENDDO
CALL SETYX(CO,GMS,NYDIM,NXDIM)
ENDIF
RETURN
131 CONTINUE
C----- SECTION 2 ----- coefficient = GRND1
  RETURN
132 CONTINUE
C----- SECTION 3 ----- coefficient = GRND2
  RETURN
133 CONTINUE
C----- SECTION 4 ----- coefficient = GRND3
  RETURN
134 CONTINUE
C----- SECTION 5 ----- coefficient = GRND4
  RETURN
135 CONTINUE
C----- SECTION 6 ----- coefficient = GRND5
  RETURN
136 CONTINUE
C----- SECTION 7 ----- coefficient = GRND6
  RETURN
137 CONTINUE
C----- SECTION 8 ----- coefficient = GRND7
  RETURN
138 CONTINUE
C----- SECTION 9 ----- coefficient = GRND8
  RETURN
139 CONTINUE
C----- SECTION 10 ----- coefficient = GRND9
  RETURN
1310 CONTINUE
C----- SECTION 11 ----- coefficient = GRND10
  RETURN
1311 CONTINUE
C----- SECTION 12 ----- value = GRND

```

```

CCC.....
RETURN
1312 CONTINUE
C----- SECTION 13 ----- value = GRND1
    RETURN
1313 CONTINUE
C----- SECTION 14 ----- value = GRND2
    RETURN
1314 CONTINUE
C----- SECTION 15 ----- value = GRND3

    CALL GETYX(ANORTH,GAREA,NYDIM,NXDIM)
    CALL GETYX(YG2D,GYC,NYDIM,NXDIM)

    IF (IZ.EQ.IG(1)) THEN
    AREA=GAREA(6,1)
    ENDIF
    CALL PIPE(TIM,PIPEG,PIPEP,PIPEM,PIPEV)
    PIPEVE=PIPEV
    IF(INDVAR.EQ.P1) THEN
    PIPEGA=PIPEG/(AREA)

    CALL FN1(VAL,PIPEGA)
    ELSE
    CALL FN1(VAL,PIPEVE)
    END IF

    IF((INDVAR.EQ.KE).OR.(INDVAR.EQ.EP)) THEN
    DO IY=1,NY
    DO IX=1,NX
    GKE(IY,IX)=(PIPEVE**2)*1.0E-01
    GEP(IY,IX)=0.1643*(GKE(IY,IX)**1.5)/(0.01*YVLAST)
    END DO
    END DO

    IF(INDVAR.EQ.KE) THEN
    CALL FN1(VAL,gke)
    END IF

    IF(INDVAR.EQ.EP) THEN
    CALL FN1(VAL,gep)
    END IF

    END IF

    RETURN
1315 CONTINUE
C----- SECTION 16 ----- value = GRND4
C   call fn1(gyi,1.)
C   call fn36(ga1,yg2d,1.,-9.81*3.484e-3/273.)
C   call fn2(ga2,ga1,-1.,1.)
C   call fn2(val,ga2,-1.e5,1.e5)
    RETURN
1316 CONTINUE

```

```

C
C----- SECTION 17 ----- value = GRND5
  CALL GETYX(YG2D,GYC,NYDIM,NXDIM)
  DO IX=1,NX
  DO IY=1,NY
  GP0(IY,IX)=1024.0057-12.609942*GYC(IY,IX)
  *+5.34394907E-4*GYC(IY,IX)**2+
  *7.80204436E-9*GYC(IY,IX)**3-
  *3.04657481E-12*GYC(IY,IX)**4
  END DO
  END DO
  CALL SETYX(VAL,GP0,NYDIM,NXDIM)
  RETURN
1317 CONTINUE
C----- SECTION 18 ----- value = GRND6
  CALL GETYX(YG2D,GYC,NYDIM,NXDIM)
  DO IY=1,NY
  DO IX=1,NX
  GEP(IY,IX)=1.64-0.001*GYC(IY,IX)
  GKE(IY,IX)=2.14-1.075*GYC(IY,IX)
  END DO
  END DO
  IF(INDVAR.EQ.EP) CALL SETYX(VAL,GEP,NYDIM,NXDIM)
  IF(INDVAR.EQ.KE) CALL SETYX(VAL,GKE,NYDIM,NXDIM)
  RETURN
1318 CONTINUE
C----- SECTION 19 ----- value = GRND7
C
  LOVAL=L0F(VAL)
  LODEN=L0F(AUX(DEN1))
  LOYV=L0F(YG2D)
  L0TEM=L0F(H1)
  P0=1.e5
  GAR=289.
  DTDZ=-0.04
  BET=1./T0
  DO JX=1,NX
  DO JY=1,NY
  J=JY+(JX-1)*NY
  YCOR=F(LOYV+JY)
  TREF=T0+DTDZ*YCOR
  PON=1./(GAR*DTDZ+1.)
  PREF=P0*(1.-(PON-1)/PON/GAR/T0*YCOR)**((PON-1)/PON)
  RHOREF=PREF/GAR/TREF
c  RHOREF=1.19
c  RHX=RHOREF/(1.+BET*(F(L0TEM+J)-TREF))
c  if(IX.NE.1)go to 2341
c  CALL WRIT2R('RMX ',RMX,'RLX',RLX)
c 2341 continue
  F(LOVAL+J)=-9.81*(F(LODEN+J)-RHOREF)
c  F(LOVAL+J)=9.81*RHOREF*(F(L0TEM+J)-TREF)*BET
c  F(LOVAL+J)=0.0
  END DO
  END DO

```

```

RETURN
1319 CONTINUE
C----- SECTION 20 ----- value = GRND8
RETURN
1320 CONTINUE
C----- SECTION 21 ----- value = GRND9
C CALL FN3(VAL,YG2D,RG(1),0.0,RG(2))
C ENDF
C
IF(INDVAR.EQ.P1) THEN
CALL FN9(VAL,YG2D,1.28*RG(18),0.,RG(19),0.0)
C CALL FN2(GA2,YG2D,1.28,-1.1E-4)
C CALL FN21(VAL,GA1,GA2,0.,1.)
ELSE IF(INDVAR.EQ.W1) THEN
CALL FN9(VAL,YG2D,RG(18),0.,RG(19),0.0)
ELSE IF(INDVAR.EQ.U1) THEN
CALL FN9(VAL,YG2D,-RG(18),0.,RG(19),0.0)
C ELSE IF(INDVAR.EQ.H1) THEN
C CALL FN2(VAL,YG2D,293.15,0.045)
ENDF
RETURN
1321 CONTINUE
C----- SECTION 22 ----- value = GRND10
C
C-----
C LLAMADO A LA SUBROUTINA DE CÁLCULO LA DESCARGA DE GAS
C EMPLEANDO EL MODELO DE FLUJO BIFÁSICO
C-----
C
CALL GETYX(ANORTH,GAREA,NYDIM,NXDIM)
CALL GETYX(YG2D,GYC,NYDIM,NXDIM)

IF (IZ.EQ.IG(1)) THEN
AREA=GAREA(6,1)
ENDF
CALL BIFAS(TIM,PIPEG,PIPEV)
PIPEVE=PIPEV
IF(INDVAR.EQ.P1) THEN
PIPEGA=PIPEG/(AREA)

CALL FN1(VAL,PIPEGA)
ELSE
CALL FN1(VAL,PIPEVE)
END IF

IF((INDVAR.EQ.KE).OR.(INDVAR.EQ.EP)) THEN
DO IY=1,NY
DO IX=1,NX
GKE(IY,IX)=(PIPEVE**2)*1.0E-01
GEP(IY,IX)=0.1643*(GKE(IY,IX)**1.5)/(0.01*YVLAST)
END DO
END DO

IF(INDVAR.EQ.KE) THEN

```



```

CALL FN1(VAL,GKE)
END IF
IF(INDVAR.EQ.EP) THEN
CALL FN1(VAL,gep)
END IF

END IF

```

```

RETURN
C.....
C
C--- GROUP 14. Downstream pressure for PARAB=.TRUE.
C
14 CONTINUE
RETURN
C.....
C* MAKE CHANGES FOR THESE GROUPS ONLY IN GROUP 19.
C--- GROUP 15. TERMINATION OF SWEEPS
C--- GROUP 16. TERMINATION OF ITERATIONS
C--- GROUP 17. UNDER-RELAXATION DEVICES
C--- GROUP 18. LIMITS ON VARIABLES OR INCREMENTS TO THEM
C.....
C
C--- GROUP 19. Special calls to GROUND from EARTH
C
19 GO TO (191,192,193,194,195,196,197,198),ISC
191 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 ---- Start of time step.
RETURN
192 CONTINUE
C * ----- SECTION 2 ---- Start of sweep.
RETURN
193 CONTINUE
C * ----- SECTION 3 ---- Start of iz slab.
RETURN
194 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 ---- Start of iteration.
RETURN
195 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 ---- Finish of iteration.
RETURN
196 CONTINUE
C * ----- SECTION 6 ---- Finish of iz slab.
RETURN
197 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 ---- Finish of sweep.
RETURN
198 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 ---- Finish of time step.
C
RETURN
C.....
C

```

```

C--- GROUP 20. PRELIMINARY PRINT-OUT
  20 CONTINUE
  RETURN
C*****
C* MAKE CHANGES FOR THESE GROUPS ONLY IN GROUP 19.
C--- GROUP 21. PRINT-OUT OF VARIABLES
C--- GROUP 22. SPOT-VALUE PRINT-OUT
C*****
C
C
C--- GROUP 23. FIELD PRINT-OUT AND PLOT CONTROL
  23 CONTINUE
  RETURN
C*****
C
C
C--- GROUP 24. DUMPS FOR RESTARTS
C
  24 CONTINUE
  END
C*****
  SUBROUTINE SPECGR
  CALL WRIT40('DUMMY SUBROUTINE SPECGR CALLED.  ')
  CALL WAYOUT(2)
  END
C*****
  SUBROUTINE SPC1GR
  CALL WRIT40('DUMMY SUBROUTINE SPC1GR CALLED.  ')
  CALL WAYOUT(2)
  END
C*****
  SUBROUTINE SPC2GR
  CALL WRIT40('DUMMY SUBROUTINE SPC2GR CALLED.  ')
  CALL WAYOUT(2)
  END
C*****
  SUBROUTINE SPC3GR
  CALL WRIT40('Dummy subroutine SPC3GR called.  ')
  CALL WAYOUT(2)
  END
C*****
  SUBROUTINE QUIZ
C--- THIS SUBROUTINE IS USED BY CHAM FOR DE-BUGGING
  END
C*****
Calculates V BOUYANCY FORCE with variable reference density
C
C
C*****
C SUBROUTINA PARA EL CALCULO DE LA DESCARGA DE GASES
C
C*****
C
C
C      NOMENCLATURA:
C      D1 - DIAMETRO DE LA SECCION REDUCIDA (RISER)[M]
C      D - DIAMETRO DE TUBERIA [M]

```

```

C   LS1- LONGITUD DE LA SECCION REDUCIDA [M]
C   L - LONGITUD DE LA TUBERIA [M]
C   GA - COEFICIENTE DE EXPANSION ISENTROPICA
C   R - CONSTANTE PARTICULAR DEL GAS [J/(KG K)]
C   FR - FACTOR DE FRICCION (MOODY)
C   TO - TEMPERATURA INICIAL DEL FLUIDO [K]
C   PO - PRESION INICIAL [PA]
C   PA - PRESION ATMOSFERICA [PA]
C   DTH- DIAMETRO DE LA RUPTURA (THROTLE) [M]
C   TB - TIEMPO ACTUAL DE DESCARGA [S]
C   CD - COEFICIENTE DE PERDIDA DE CARGA DEBIDO A REDUCCION DE AREA
C
C
C .....
C   SUBROUTINA VOLUME /19/
C
C   ESTA SUBROUTINA NOS PERMITE CALCULAR LA DESCARGA DE UN GAS
C   EMPLEANDO EL MODELO 'VOLUME', DESARROLLADO POR BOTROS, JUNGOWSKI
C   Y WEISS
C .....
C
C   SUBROUTINE VOLUME(T,G,P,M,V)
C   IMPLICIT REAL*4 (A-Z)
C   COMMON/RGRND/RG(100)
C   D1=RG(21)
C   D=RG(22)
C   LS1=RG(23)
C   L=RG(24)
C   GA=RG(25)
C   R=RG(26)
C   FR=RG(27)
C   TO=RG(28)
C   PO=RG(29)
C   PA=RG(30)
C   DTH=RG(31)
C   CD=RG(32)
C
C
C   C=(GA*R*TO)**0.5
C   AP=3.1416*D**2/4.0
C   ATH=3.1416*DTH**2 /4.
C   RHO=PO/(R*TO)
C   RHOA=PA/(R*TO)
C   VO=3.1416*(L*D**2.0+LS1*D1**2)/4.0
C   MO=(PO*VO)/(R*TO)
C   MF=(PA*VO)/(R*TO)
C   ALFA= D1**2/D**2
C
C
C   TA= VO*((GA+1.0)/2.0)**((GA+1.0)/(2.0*GA-2.0))/(C*ATH*CD)
C   TC=(LOG(PO/PA)-(GA/(GA-1.0))*LOG((GA+1.0)/2.0))*TA
C
C   P=PO*EXP(-T/TA)
C   RHOF=P/(R*TO)
C
C   PCR=PO*(2/(GA+1))**(GA/(GA-1))

```

```

IF(P.GE.PCR) THEN
RHO1=RHOF*(2/(GA+1))**(1/(GA-1))
ELSE
C   RHO1=RHOA*(P/PA)**(1/GA)
RHO1=RHOF
ENDIF

IF (P .LT. PA) THEN
P=PA
M=MF
G=0.0
V=0.0
ELSE
G=(2.0/(GA+1.0))**((GA+1.0)/(2.0*GA-2.0))
&   *(GA/(R*TO))**0.5 *P*CD*ATH
C
M=(2.0/(GA+1))**((GA+1)/(2.0*GA-2.0))
&   *(GA/(R*TO))**0.5 *(PO*ATH*CD*TA)*(-1+EXP(-T/TA))
&   +MO

V=G/(ATH*RHO1)
ENDIF
RETURN
END

C
C
C.....
C   SUBROUTINA PIPE /19/
C
C   ESTA SUBROUTINA NOS PERMITE CALCULAR LA DESCARGA DE UN GAS
C   EMPLEANDO EL MODELO 'PIPE', DESARROLLADO POR BOTROS, JUNGOWSKI Y
C   WEISS
C.....
C
SUBROUTINE PIPE(T,G,P,M,V)
IMPLICIT REAL*4 (A-Z)
COMMON/RGRND/RG(100)
D1=RG(21)
D=RG(22)
LS1=RG(23)
L=RG(24)
GA=RG(25)
R=RG(26)
FR=RG(27)
TO=RG(28)
PO=RG(29)
PA=RG(30)
DTH=RG(31)
CD=RG(32)
C=(GA*R*TO)**0.5
AP=3.1416*D**2/4.0
ATH=3.1416*DTH**2/4
RHO=PO/(R*TO)
RHOA=PA/(R*TO)

```

```

VO=3.1416/4.0*(L*D**2.0+LS1*D1**2)
MO=(PO*VO)/(R*TO)
MF=(PA*VO)/(R*TO)
F=(2.0/(GA+1.0))**((GA+1.0)/(2.0*GA-2.0))
&   *(GA/(R*TO))**0.5 *PO*ATH*CD
U=F/(RHO*AP)
A=FR*U/(3.0*D)
E=(2.0/(GA+1.0))**((GA+1.0)/(2.0*GA-2.0))
&   *(GA/(R*TO))**0.5*ATH*CD/AP
RR=A*E*L
C
CALL ALFA(RR,ALF1,ALF2,ALF3,ALF4,ALF5,ALF6)
C
C
X=L
KA=R*TO/A
C
A1=4.0*SIN(ALF1)/(2.0*ALF1+SIN(2.0*ALF1))
A2=4.0*SIN(ALF2)/(2.0*ALF2+SIN(2.0*ALF2))
A3=4.0*SIN(ALF3)/(2.0*ALF3+SIN(2.0*ALF3))
A4=4.0*SIN(ALF4)/(2.0*ALF4+SIN(2.0*ALF4))
A5=4.0*SIN(ALF5)/(2.0*ALF5+SIN(2.0*ALF5))
A6=4.0*SIN(ALF6)/(2.0*ALF6+SIN(2.0*ALF6))
C
TP1=L**2/(KA*ALF1**2)
TP2=L**2/(KA*ALF2**2)
TP3=L**2/(KA*ALF3**2)
TP4=L**2/(KA*ALF4**2)
TP5=L**2/(KA*ALF5**2)
TP6=L**2/(KA*ALF6**2)
T1=LOG(PA/PO)*(-TP1)
c   T3=(LOG(PO/PA)-(GA/(GA-1)))*LOG((GA+1)/2))*TP1
C
P=(A1*COS(ALF1*X/L)*EXP(-T/TP1)
&   +A2*COS(ALF2*X/L)*EXP(-T/TP2)
&   +A3*COS(ALF3*X/L)*EXP(-T/TP3)
&   +A4*COS(ALF4*X/L)*EXP(-T/TP4)
&   +A5*COS(ALF5*X/L)*EXP(-T/TP5)
&   +A6*COS(ALF6*X/L)*EXP(-T/TP6))*PO

PO1=(A1*COS(ALF1*X/L)
&   +A2*COS(ALF2*X/L)
&   +A3*COS(ALF3*X/L)
&   +A4*COS(ALF4*X/L)
&   +A5*COS(ALF5*X/L)
&   +A6*COS(ALF6*X/L))*PO

T3=(LOG(PO/PA)-(GA/(GA-1)))*LOG((GA+1)/2))*TP1

PCR=PO*(2/(GA+1))**((GA/(GA-1))
RHOF=P/(R*TO)

IF(P.GE.PCR) THEN
RHO1=RHOF*(2/(GA+1))**(1/(GA-1))

```

```

ELSE
C   RHO1=RHOA*(P/PA)**(1/GA)
   RHO1=RHOF
   ENDIF
C
   IF (P .LT. PA) THEN
     P=PA
     M=MF
     G=0.0
     V=0.0

     ELSE
M=MO+(2.0/(GA+1))**((GA+1)/(2.0*GA-2.0))
&   *(GA/(R*TO))**0.5 *(PO*ATH*CD)
&   *((TP1*A1*COS(ALF1*X/L))*(-1+EXP(-T/TP1))
&   +(TP2*A2*COS(ALF2*X/L))*(-1+EXP(-T/TP2))
&   +(TP3*A3*COS(ALF3*X/L))*(-1+EXP(-T/TP3))
&   +(TP4*A4*COS(ALF4*X/L))*(-1+EXP(-T/TP4))
&   +(TP5*A5*COS(ALF5*X/L))*(-1+EXP(-T/TP5))
&   +(TP6*A6*COS(ALF6*X/L))*(-1+EXP(-T/TP5)))

G=(2.0/(GA+1.0))**((GA+1.0)/(2.0*GA-2.0))
&   *(GA/(R*TO))**0.5 *P*CD*ATH

V=G/(RHO1*ATH)
C
   ENDIF
   RETURN
   END
C
C.....
C   * SUBROUTINA PARA LA SOLUCION DE LA EC. ALFA*TAN(ALFA)=CTE.
C   * DONDE CTE=RR
C.....
C
SUBROUTINE ALFA(RR,ALF1,ALF2,ALF3,ALF4,ALF5,ALF6)
COMMON/ALF/C(40),B1(40),B2(40),B3(40),B4(40),B5(40),B6(40)

CALL LOCATE(C,40,RR,J)
ALF1= B1(J)+(B1(J+1)-B1(J))*(RR-C(J))/(C(J+1)-C(J))
ALF2= B2(J)+(B2(J+1)-B2(J))*(RR-C(J))/(C(J+1)-C(J))
ALF3= B3(J)+(B3(J+1)-B3(J))*(RR-C(J))/(C(J+1)-C(J))
ALF4= B4(J)+(B4(J+1)-B4(J))*(RR-C(J))/(C(J+1)-C(J))
ALF5= B5(J)+(B5(J+1)-B5(J))*(RR-C(J))/(C(J+1)-C(J))
ALF6= B6(J)+(B6(J+1)-B6(J))*(RR-C(J))/(C(J+1)-C(J))
END
C
C.....
C   TABLA DE DATOS OBTENIDOS PARA LA SOLUCION A LA ECUACION
C   ALFA*TAN(ALF)=CTE (TABLA 1, APENDICE 4)
C.....
C
BLOCK DATA
COMMON/ALF/C(40),B1(40),B2(40),B3(40),B4(40),B5(40),B6(40)

```

```

C
DATA C/0.0,1.E-3,2.E-3,4.0E-3,6.E-3,8.E-3,1.E-2,2.E-2,4.E-2,
&      6.E-2,8.E-2,1.E-1,2.E-1,3.E-1,4.E-1,5.E-1,6.E-1,
&      7.0E-1,8.0E-1,9.0E-1,1.0,1.5,2.,3.,4.,5.,6.,7.,
&      8.,9.,10.,15.,20.,30.0,40.0,50.0,60.0,80.0,100.0,
&      10.0E10/
C
DATA B1/0.,31.6E-3,44.7E-3,63.2E-3,77.4E-3,89.3E-3,99.8E-3,
&      141.E-3,198.7E-3,242.5E-3,279.1E-3,311.1E-3,432.8E-3,
&      521.8E-3,593.2E-3,653.3E-3,705.1E-3,750.6E-3,791.E-3,
&      827.4E-3,860.3E-3,988.2E-3,1.0769,1.1925,1.2646,
&      1.3138,1.3496,1.3766,1.3978,1.4149,1.4289,1.4729,1.4961,
&      1.5202,1.5325,1.54,1.5451,1.5514,1.5552,1.5708/
C
DATA B2/3.1416,3.1419,3.1422,3.1429,3.1435,3.1441,3.1448,
&      3.1479,3.1543,3.1606,3.1668,3.1731,3.2039,3.2341,
&      3.2636,3.2923,3.3204,3.3477,3.3744,3.4003,3.4256,
&      3.5422,3.6436,3.8088,3.9352,4.0336,4.1116,4.1746,
&      4.2264,4.2694,4.3058,4.4255,4.4915,4.5615,4.5979,
&      4.6202,4.6353,4.6543,4.6658,4.7124/
C
DATA B3/6.2832,6.2833,6.2835,6.2838,6.2841,6.2845,6.2848,
&      6.2864,6.2895,6.2927,6.2959,6.2991,6.3148,6.3305,
&      6.3461,6.3616,6.3770,6.3923,6.4074,6.4224,6.4373,
&      6.5097,6.5783,6.7040,6.8140,6.9096,6.9924,7.0640,
&      7.1263,7.1806,7.2281,7.3959,7.4954,7.6057,7.6647,
&      7.7012,7.7259,7.7573,7.7764,7.8540/
C
DATA B4/9.4248,9.4249,9.4250,9.4252,9.4254,9.4256,9.4258,
&      9.4269,9.4290,9.4311,9.4333,9.4354,9.4459,9.4565,
&      9.4670,9.4775,9.4879,9.4983,9.5087,9.5190,9.5293,
&      9.5801,9.6296,9.7240,9.8119,9.8928,9.9667,10.0339,
&      10.0949,10.1502,10.2003,10.3898,10.5117,10.6543,
&      10.7334,10.7832,10.8172,10.8606,10.8871,10.9956/
C
DATA B5/12.5664,12.5665,12.5665,12.5667,12.5668,12.5670,
&      12.5672,12.5680,12.5696,12.5711,12.5727,12.5743,
&      12.5823,12.5902,12.5981,12.6060,12.6139,12.6218,
&      12.6296,12.6375,12.6453,12.6841,12.7223,12.7966,
&      12.8678,12.9352,12.9988,13.0584,13.1141,13.1660,
&      13.2142,13.4078,13.5420,13.7085,13.8048,13.8666,
&      13.9094,13.9644,13.9981,14.1372/
C
DATA B6/15.7080,15.7080,15.7081,15.7082,15.7083,15.7085,
&      15.7086,15.7092,15.7105,15.7118,15.7131,15.7143,
&      15.7207,15.7270,15.7334,15.7397,15.7460,15.7524,
&      15.7587,15.7650,15.7713,15.8026,15.8336,15.8945,
&      15.9536,16.0107,16.0654,16.1177,16.1675,16.2147,
&      16.2594,16.4474,16.5864,16.7691,16.8794,16.9519,
&      17.0026,17.0686,17.1093,17.2788/
END

```

```

C
C.....
C *SUBROUTINA DE LOCALIZACION DE LOS PUNTOS A INTERPOLAR

```

C EMPLEANDO EL METODO DE BISECCION.

C

C

SUBROUTINE LOCATE(XX,N,RR,J)

DIMENSION XX(N)

JL=1

JU=N+1

10 IF(JU-JL.GT.1) THEN

JM=(JU+JL)/2

IF((XX(N).GT.XX(1)).EQV.(RR.GT.XX(JM)))THEN

JL=JM

ELSE

JU=JM

ENDIF

GO TO 10

ENDIF

J=JL

RETURN

END

C

C

C SUBROUTINA RICHARDSON /20/

C

C ESTA SUBROUTINA NOS PERMITE CALCULAR UNA DESCARGA EMPLEANDO EL

C MODELO DESARROLLADO POR RICHARDSON Y SAVILLE.

C SE CONSIDERA UNA DESCARGA PARA TODO EL DIAMETRO DE LA TUBERIA

C (FULL-BORE RUPTURE)

C

C

SUBROUTINE RICH(T,G,P,M,V)

IMPLICIT REAL*4 (A-Z)

COMMON/RGRND/RG(100)

D1=RG(21)

D=RG(22)

LS1=RG(23)

L=RG(24)

GA=RG(25)

R=RG(26)

FR1=RG(27)

TO=RG(28)

PO=RG(29)

PA=RG(30)

DTH=RG(31)

CD=RG(32)

C

C *CORRIGIENDO EL FACTOR DE FRICCION DE MOODY (FR1) POR EL DE

C FANNING.

FR=FR1/4.0

C

AP=3.1416*D**2/4.0

VO=3.1416/4*(L*D**2+1.0*LS1*D1**2)

MO=(PO*VO)/(R*TO)

RHO=PO/(R*TO)

RHOA=PA/(R*TO)


```

ALFA= DI**2/D**2
C=(GA*R*TO)**0.5
MF=(PA*VO)/(R*TO)
C
C
T1= L/C
T3=T1+L*(2.0/(3.0))*(4.0*FR*L/(R*TO*D))**0.5
&
LOG((PO/PA)*(D/(4.0*FR*L))**0.5)
TF=T1+LOG(PA/PO)*L/(-1.5*(R*TO*D/(4.0*FR*L))**0.5)
C
A=(MO/L)*(R*TO)**0.5
B=(1/GA)*((GA+1)/2)**((GA+1)/(GA-1))
C=4*FR*L/(D*T1)
M1=-2*A/C *((B+C*T1)**0.5-(B)**0.5)+MO

IF(T .LE. T1) THEN
G=(MO/L)/AP*(R*TO)**0.5/((1/GA)
&
*((GA+1)/2)**((GA+1)/(GA-1))
&
+4*FR*L*T/(D*T1))**0.5
C

A=(MO/L)*(R*TO)**0.5
B=(1/GA)*((GA+1)/2)**((GA+1)/(GA-1))
C=4*FR*L/(D*T1)
M= -2*A/C *((B+C*T)**0.5-(B)**0.5)+MO

C
P=PO
RHO1=RHO*(2/(GA+1))**(1/(GA-1))
V=G/RHO1
C
ENDIF

IF((T .GT. T1) .AND. (T .LE. T3)) THEN

G=1.0*(M1/L)/AP*(R*TO*D/(4.0*FR*L))**0.5
&
*EXP(-1.5*(R*TO*D/(4.0*FR*L))**0.5
&
*(T-T1)/L)
C
M=M1*EXP(-1.5*(R*TO*D/(4.0*FR*L))**0.5
&
*(T-T1)/L)
C
P=PO*EXP(-1.5*(R*TO*D/(4.0*FR*L))**0.5
&
*(T-T1)/L)
C
RHO1=RHO*(2/(GA+1))**(1/(GA-1))
V=G/RHO1

C
ENDIF
C
IF((T .GT. T3).AND.(T .LE.TF)) THEN
C
P=PO*EXP(-1.5*(R*TO*D/(4.0*FR*L))**0.5
&
*(T-T1)/L)
C

```

```

G=1.0*(M1/L)/AP*(R*TO*D/(4.0*FR*L))**0.5
&
&
C
&
&
M=M1*EXP(-1.5*(R*TO*D/(4.0*FR*L))**0.5
*(T-T1)/L)

RHO1=RHOA*(P/PA)**(1/GA)
V=G/RHO1

ENDIF

C
IF(T.GT TF) THEN
P= PA
G= 0.0
M= MF
V= 0.0

ENDIF

C
RETURN
END

C
C.....
C SUBROUTINA PARA EL CALCULO DE UNA DESCARGA DE GAS
C EMPLEANDO EL MODELO DE DESCARGA DE FLUJO BIFASICO /43/
C.....
C TABLA DE RESULTADOS OBTENIDOS
C

BLOCK DATA
COMMON/BIF/T(80),G(80),V(80)

C
DATA T/ .9766E-01,.7813E+00,.2637E+01,.6250E+01,.1221E+02,
& .2109E+02,.3350E+02,.5000E+02,.7119E+02,.9766E+02,.1300E+03,
& .1688E+03,.2146E+03,.2680E+03,.3296E+03,.4000E+03,.4798E+03,
& .5695E+03,.6698E+03,.7813E+03,.9044E+03,.1040E+04,.1188E+04,
& .1350E+04,.1526E+04,.1716E+04,.1922E+04,.2144E+04,.2382E+04,
& .2637E+04,.2909E+04,.3200E+04,.3509E+04,.3838E+04,.4187E+04,
& .4556E+04,.4947E+04,.5359E+04,.5793E+04,.6250E+04,.6731E+04,
& .7235E+04,.7764E+04,.8319E+04,.8899E+04,.9505E+04,.1014E+05,
& .1080E+05,.1149E+05,.1221E+05,.1295E+05,.1373E+05,.1454E+05,
& .1538E+05,.1625E+05,.1715E+05,.1809E+05,.1905E+05,.2006E+05,
& .2109E+05,.2217E+05,.2327E+05,.2442E+05,.2560E+05,.2682E+05,
& .2808E+05,.2937E+05,.3071E+05,.3208E+05,.3350E+05,.3495E+05,
& .3645E+05,.3799E+05,.3957E+05,.4120E+05,.4287E+05,.4458E+05,
& .4634E+05,.4815E+05,.5000E+05/

C
DATA G/ 4201E+03,.4189E+03,.4161E+03,.4105E+03,.3989E+03,
& .3820E+03,.3549E+03,.3148E+03,.2619E+03,.2071E+03,.1727E+03,

```

```

& .1543E+03,.1433E+03,.1302E+03,.1198E+03,.1082E+03,.9881E+02,
& .9185E+02,.8539E+02,.7981E+02,.7519E+02,.7138E+02,.6725E+02,
& .6425E+02,.6090E+02,.5850E+02,.5586E+02,.5323E+02,.5122E+02,
& .4910E+02,.4763E+02,.4555E+02,.4401E+02,.4260E+02,.4131E+02,
& .4019E+02,.3865E+02,.3761E+02,.3666E+02,.3564E+02,.3469E+02,
& .3382E+02,.3238E+02,.3173E+02,.3113E+02,.3023E+02,.2942E+02,
& .2869E+02,.2801E+02,.2801E+02,.2739E+02,.2660E+02,.2589E+02,
& .2522E+02,.2460E+02,.2460E+02,.2400E+02,.2322E+02,.2247E+02,
& .2175E+02,.2175E+02,.2102E+02,.2031E+02,.1940E+02,.1940E+02,
& .1847E+02,.1752E+02,.1752E+02,.1654E+02,.1553E+02,.1422E+02,
& .1422E+02,.1287E+02,.1149E+02,.1149E+02,.1012E+02,.8753E+01,
& .7411E+01,.6193E+01,.6193E+01/

```

C

```

DATA VI,7540E+03,.7519E+03,.7468E+03,.7369E+03,.7161E+03,
& .6856E+03,.6371E+03,.5652E+03,.4705E+03,.3733E+03,.3138E+03,
& .2826E+03,.2635E+03,.2404E+03,.2222E+03,.2016E+03,.1852E+03,
& .1729E+03,.1616E+03,.1517E+03,.1435E+03,.1368E+03,.1294E+03,
& .1241E+03,.1181E+03,.1138E+03,.1091E+03,.1043E+03,.1007E+03,
& .9674E+02,.9400E+02,.9017E+02,.8727E+02,.8461E+02,.8219E+02,
& .8003E+02,.7711E+02,.7509E+02,.7329E+02,.7131E+02,.6946E+02,
& .6778E+02,.6497E+02,.6371E+02,.6253E+02,.6077E+02,.5917E+02,
& .5774E+02,.5640E+02,.5640E+02,.5518E+02,.5361E+02,.5220E+02,
& .5089E+02,.4964E+02,.4964E+02,.4845E+02,.4689E+02,.4538E+02,
& .4393E+02,.4393E+02,.4247E+02,.4104E+02,.3919E+02,.3919E+02,
& .3731E+02,.3537E+02,.3537E+02,.3337E+02,.3130E+02,.2859E+02,
& .2859E+02,.2581E+02,.2298E+02,.2298E+02,.2013E+02,.1731E+02,
& .1455E+02,.1204E+02,.1204E+02/

```

C

END

C

```

C.....
C *SUBROUTINA DE LOCALIZACION DE LOS PUNTOS A INTERPOLAR
C EMPLEANDO EL METODO DE BISECCION.
C.....

```

C

```

SUBROUTINE LOCA(XX,N,TIM,J)
DIMENSION XX(N)
JL=1
JU=N+1
10 IF(JU-JL.GT.1) THEN
JM=(JU+JL)/2
IF((XX(N).GT.XX(1)).EQV.(TIM.GT.XX(JM)))THEN
JL=JM
ELSE
JU=JM
ENDIF
GO TO 10
ENDIF
J=JL
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE BIFAS(TIM,GAS,VEL)
COMMON/BIF/T(80),G(80),V(80)

```

```
CALL LOCA(T,80,TIM,J)
GAS= G(J)+(G(J+1)-G(J))*(TIM-T(J))/(T(J+1)-T(J))
VEL= V(J)+(V(J+1)-V(J))*(TIM-T(J))/(T(J+1)-T(J))
RETURN
END
```

APÉNDICE 2

PROGRAMA DE ENTRADA DE DATOS (Q1)

```

TALK=F;RUN(1,1);VDU=0
.....
*
* GROUP 1. Run title and other preliminaries.
*
TEXT(DISPERSION-HIDROCARBURO (PROPANO))
*
REAL(COP)
.....
*
* GROUP 2. Transience; time-step specification.
STEADY=F
TLAST=55000.
LSTEP=20
GRDPWR(T,LSTEP,TLAST,1.2)

csg1=X;isg2=2
*
.....
*
* GROUP 3. X-direction grid specification.
*
* Cartesian Grid Selected
CARTES=T
* Extent of the Domain in the X-Direction: 3.450E+02
* Number of Cells in the X-Direction
NX=8
* Equal Grid Spacing in Subregion 1
SUBGRD(X,1,1, 2.5000E+00, 1.000E+00)
SUBGRD(X,1,1,0.250E+00, 1.000E+00)
INTEGER(NXF01,NXL01); NXF01=1; NXL01=1
* Equal Grid Spacing in Subregion 2
SUBGRD(X,2,12, 50.E+01, 1.5E+00)
INTEGER(NXF02,NXL02); NXF02=2; NXL02=12
*
.....
*
* GROUP 4. Y-direction grid specification.
*
* Extent of the Domain in the Y-Direction: 2.800E+02
* Number of Cells in the Y-Direction
NY=19
* Equal Grid Spacing in Subregion 1
SUBGRD(Y,1,10, 25.000E+01, 1.3000E+00)
INTEGER(NYF01,NYL01); NYF01=1; NYL01=10
* Equal Grid Spacing in Subregion 2
SUBGRD(Y,11,19, 75.000E+01, 1.7000E+00)

```

```

INTEGER(NYF02,NYL02),NYF02=11, NYL02=19
*
*.....
*
* GROUP 5. Z-direction grid specification.
*
* Extent of the Domain in the Z-Direction: 8.100E+02
* Number of Cells in the Z-Direction
NZ=22
* Equal Grid Spacing in Subregion 1
SUBGRD(Z,1,5, 3.000E+03, -2.000E+00)
INTEGER(NZF01,NZL01); NZF01=1; NZL01=5
* Equal Grid Spacing in Subregion 2
SUBGRD(Z,6,6, 5.000E+00, 1.000E+00)
SUBGRD(Z,6,6, 0.25E+00, 1.000E+00)
INTEGER(NZF03,NZL03); NZF03=6; NZL03=6
* Equal Grid Spacing in Subregion 4
SUBGRD(Z,7,25, 10000., 2.00E+00)
INTEGER(NZF04,NZL04); NZF04=7; NZL04=25
*.....
*
* GROUP 6. Body-fitted coordinates or grid distortion.
*
*.....
*
* GROUP 7. Variables stored, solved & named.
*
* Solve for the PRESSURE
* (Whole-Field Method) * (Arithmetic Averaging)
SOLVE(P1); SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,N)
* Solve for the X-DIRECTION VELOCITY COMPONENT
* (Slab-by-Slab Method) * (Arithmetic Averaging)
SOLVE(U1)
* Solve for the Y-DIRECTION VELOCITY COMPONENT
* (Slab-by-Slab Method) * (Arithmetic Averaging)
SOLVE(V1)
* Solve for the Z-DIRECTION VELOCITY COMPONENT
* (Slab-by-Slab Method) * (Arithmetic Averaging)
SOLVE(W1)
* Solve for the TEMPERATURE
* (Slab-by-Slab Method) * (Arithmetic Averaging)
NAME(H1)=TEMP; SOLVE(TEMP)
* Solve for the USER VARIABLE 1
* (Slab-by-Slab Method) * (Arithmetic Averaging)
NAME(C1)=DUST; SOLVE(DUST)
*
TURMOD(KEMODL)
store(tmp1,rho1,pr!)
*.....
*
* GROUP 8. Terms (in differential equations) & devices.
*
* Modify equation for the TEMPERATURE

```

TERMS(TEMP,N,Y,Y,N,N,N)

```

*
*****
*
* GROUP 9. Properties of the medium (or media).
*
* Set First-Phase Density Value
REAL(RHOIN)
RHO1B=1./287.
PRESS0=1.E5
TMP1=GRND

RHO1= GRND
DRH1DP=GRND
TEMP0=273.
RHOIN=RHO1B*PRESS0/TEMP0
RG(3)=1./(1.E5)**(287./1007.)
RG(4)=287./1007.
RG(5)=0.3
RG(6)=3.
RG(7)=8314.
* MASA MOLECULAR DEL
  METANO
  RG(8)=18.4755
  RG(8)=16.04
  PROPANO(C3H8)
RG(8)=44.09
* MASA MOLECULAR DEL AIRE
RG(9)=28.97

* D1
RG(21)=0.097
* D
RG(22)=0.203
* LS1
RG(23)=1.3
* L
RG(24)=25523.
* GA (=Cp/Cv)
  RG(25)=1.298
  PROPANO
RG(25)=1.1284
* R del gas
RG(26)=RG(7)/RG(8)
* Fr (Moody)
RG(27)=0.0134
* To
RG(28)=302.
* Po
RG(29)=40.89E5
* Pa
RG(30)=1.0132E5
* Dth
RG(31)=(4.*0.00548/3.14159)**0.5

```

* Cd
 RG(32)=0.75

* Set Laminar Kinematic Viscosity Value
 ENUL=GRND

VISCOSIDAD DEL AIRE
 RG(33)= 1.846E-5
 VISCOSIDAD DE LOS HIDROCARBUROS
 METANO
 RG(34)= 1.24E-5
 PROPANO
 RG(34)= 0.94E-5

* Set Specific-Heat Value
 REAL(CP1); CP1= 1.005E+03

AIRE
 RG(35)=1.005E3

HIDROCARBURO
 METANO
 RG(36)=2.22E3
 PROPANO
 RG(36)=1.67E3

* Cv
 AIRE
 RG(39)=.718E3

HIDROCARBURO
 METANO
 RG(40)=1.70E3
 PROPANO
 RG(40)=1.48E3

* Set Thermal Conductivity Value
 REAL(KCOND1); KCOND1= 2.630E-02

CONDUCTIVIDAD DEL AIRE
 RG(37)=2.63E-2
 CONDUCTIVIDAD DEL HIDROCARBURO
 METANO
 RG(38)=4.07E-2
 PROPANO
 RG(38)=2.25E-2

* Set Prandtl Number
 PRNDTL(TEMP)=CP1*ENUL*1./KCOND1
 PRNDTL(TEMP)=GRND1


```

* Set Schmidt Number for USER VARIABLE 1
PRNDTL(DUST)=ENUL/ 1.000E-05
PRNDTL(DUST)=GRND1
* Set Units Conversion Factor in Energy Equation
HUNIT=1.0/CP1
*
.....
*
* GROUP 10. Inter-phase-transfer processes and properties.
*
*
.....
*
* GROUP 11. Initialization of variable or porosity fields.
*
* Initialize the Z-DIRECTION VELOCITY COMPONENT
FIINIT(W1)= 6.000E+00
* Initialize the TEMPERATURE
FIINIT(TEMP)=0.
FIINIT(v1)=1.e-10
FIINIT(u1)=1.e-10
patch(inipt,linvly,1,nx,1,ny,1,nz,1,1)
init(inipt,p1,-9.81*RHOIN,1000.)
init(inipt,ep,-0.001,1.64)
init(inipt,ke,-0.001,2.15)
* Initialize the USER VARIABLE 1
FIINIT(DUST)= .000E+03
FIINIT(rho1)=RHOIN
FIINIT(EP)=1.64
FIINIT(KE)=2.1
* Non-Conjugate Obstructed Region, Named Obs1
CONPOR(Obs1,0.0,CELL,1,1,1,4,6,6)
* Non-Conjugate Obstructed Region, Named Obs2
CONPOR(Obs2,0.0,CELL,-1,-1,-1,-4,-9,-9)
* Non-Conjugate Obstructed Region, Named Obs3
CONPOR(Obs3,0.0,CELL,-NXF03,-NXL04,-NYF01,-NYL02,-NZF06,-NZL07)
* Non-Conjugate Obstructed Region, Named Obs4
CONPOR(Obs4,0.0,CELL,-NXF06,-NXL06,-NYF01,-NYL02,-NZF09,-NZL09)
* Non-Conjugate Obstructed Region, Named Obs5
CONPOR(Obs5,0.0,CELL,-NXF02,-NXL03,-NYF01,-NYL01,-NZF11,-NZL11)
*
.....
*
* GROUP 12. Convection and diffusion adjustments.
*
*
IG(1)=NZF03
.....
*
* GROUP 13. Boundary conditions and special sources.
*
COP=1.E6
REAL(COPOUT)
COPOUT=1.E0

```

```

* INLET Boundary Condition, Named FREEWIND
PATCH(FREEWIND,LOW,NXF01,NXL02,NYF01,NYL02,NZF01,NZF01,1,LSTEP)
COVAL(FREEWIND,P1,fixflu,grnd9)
COVAL(FREEWIND,U1,FIXVAL,1.E-10)
COVAL(FREEWIND,V1,FIXVAL,1.E-10)
COVAL(FREEWIND,W1,FIXVAL,grnd9)
COVAL(FREEWIND,KE,onlyms,grnd6)
COVAL(FREEWIND,EP,onlyms,grnd6)
COVAL(FREEWIND,TEMP,FIXVAL,0.)
COVAL(FREEWIND,DUST,ONLYMS,0.000E+00)

* INLET Boundary Condition, Named CHIMNEY
PATCH(CHIMNEY,SOUTH,1,1,1,1,NZF03,NZL03,1,LSTEP)
COVAL(CHIMNEY,P1,FIXFLU,grnd10)
CDVAL(CHIMNEY,U1,ONLYMS,1.E-10)
COVAL(CHIMNEY,V1,ONLYMS,grnd10)
  COVAL(CHIMNEY,V1,ONLYMS,5.)
  COVAL(CHIMNEY,KE,ONLYMS,((5.)*2)*1.000E-01)
  COVAL(CHIMNEY,EP,ONLYMS,(0.1643*(2.5)**1.5)/(0.01*YVLAST))
COVAL(CHIMNEY,KE,ONLYMS,grnd10)
COVAL(CHIMNEY,EP,ONLYMS,grnd10)
COVAL(CHIMNEY,TEMP,ONLYMS,-30.)
COVAL(CHIMNEY,DUST,ONLYMS,1.000E+0)
* OUTLET Boundary Condition, Named DOWNSTRM
PATCH(DOWNSTRM,HIGH,NXF01,NXL02,NYF01,NYL02,NZL04,NZL04,1,LSTEP)
COVAL(DOWNSTRM,P1,COPOUT,grnd5)
COVAL(DOWNSTRM,TEMP,ONLYMS,SAME)
COVAL(DOWNSTRM,DUST,ONLYMS,SAME)
COVAL(DOWNSTRM,KE,ONLYMS,SAME)
COVAL(DOWNSTRM,EP,ONLYMS,SAME)
COVAL(DOWNSTRM,W1,ONLYMS,grnd9)
COVAL(DOWNSTRM,U1,fixval,1.E-10)
COVAL(DOWNSTRM,V1,FIXVAL,1.0E-10)
* OUTLET Boundary Condition, Named FAREAST
PATCH(FAREAST,EAST,NXL02,NXL02,NYF01,NYL02,NZF01,NZL04,1,LSTEP)
COVAL(FAREAST,P1,COPOUT,grnd5)
COVAL(FAREAST,TEMP,ONLYMS,SAME)
COVAL(FAREAST,DUST,ONLYMS,SAME)
COVAL(FAREAST,W1,ONLYMS,grnd9)
COVAL(FAREAST,U1,fixval,0.)
COVAL(FAREAST,V1,FIXVAL,0.)
* OUTLET Boundary Condition, Named FARWEST
PATCH(FARWEST,WEST,NXF01,NXF01,NYF01,NYL02,NZF01,NZL04,1,LSTEP)
COVAL(FARWEST,P1,FXIP,grnd5)
COVAL(FARWEST,TEMP,ONLYMS,SAME)
COVAL(FARWEST,DUST,ONLYMS,SAME)
COVAL(FARWEST,W1,ONLYMS,grnd9)
COVAL(FARWEST,U1,fixval,0.)
COVAL(FARWEST,V1,FIXVAL,0.)
* OUTLET Boundary Condition, Named FARTOP
PATCH(FARTOP,NORTH,NXF01,NXL02,NYL02,NYL02,NZF01,NZL04,1,LSTEP)
COVAL(FARTOP,TEMP,FIXFLU,5000./1007.)

```

```

PATCH(FLR,SOUTH,NXF01,NXL02,NYF01,NYF01,NZF01,NZL04,1,1)
COVAL(FLR,TEMP,FIXFLU, -5000./1007.)
FARTOP=skip
  CHIMNEY=skip
FLR=skip
FARWEST=skip
  FAREAST=skip
  * WALL Boundary Condition, Named FLOOR
PATCH(FLOOR,swall,NXF01,NXL02,NYF01,NYF01,NZF01,NZL04,1,I STEP)
COVAL(FLOOR,U1,grnd2, 0.0E+00)
COVAL(FLOOR,W1,grnd2, 0.000E+00)
COVAL(FLOOR,KE,grnd2,grnd2)
COVAL(FLOOR,EP,grnd2,grnd2)
COVAL(FLOOR,DUST,1.0/PRNDTL(DUST), 0.000E+00)
  floor=skip
  * GRAVITY FORCE Boundary Condition, Named BUOY
PATCH(GRAVITY,PHASEM,NXF01,NXL02,NYF01,NYL02,NZF01,NZL04,1,LSTEP)
COVAL(GRAVITY,V1,FIXFLU,-9.81)
  .

```

```

rg(18)=6.00;rg(19)=0.124938

```

```

.....
*
* GROUP 14. Downstream pressure for PARAB=.TRUE..
*
*
.....
*
* GROUP 15. Termination of sweeps.
*
* Number of Iterative Sweeps (Outer Iterations)
LSWEEP=100
*
.....
*
* GROUP 16. Termination of iterations.
*
*
.....
*
* GROUP 17. Under-relaxation devices.
*
* Automatic False-Time-Step Relaxation Applied to U1
REAL(SCALEL,SCALEU,RELFAC);SCALEL= 1.e+01;SCALEU= 5.000E+00
RELFAC=50.E0
RELAX(U1,FALSDT,RELFAC)
  * Automatic False-Time-Step Relaxation Applied to V1
RELAX(V1,FALSDT,1.0E0)
  * Automatic False-Time-Step Relaxation Applied to W1
RELAX(W1,FALSDT,RELFAC )
  * Automatic False-Time-Step Relaxation Applied to DUST
RELAX(DUST,LINRLX,.150)
RELAX(KE,FALSDT,10.E-1)
RELAX(EP,FALSDT,10.E-1)

```

```

RELAX(P1,LINRLX,0.25)
RELAX(RHO1,LINRLX,0.3)
RELAX(TEMP,LINRLX,0.15)
*
*****
*
* GROUP 18. Limits on variables or increments to them.
*
*
*****
*
* GROUP 19. Data communicated by satellite to GROUND.
*
*
*****
*
* GROUP 20. Preliminary print-out.
*
* Activate Printout of Satellite Data.
ECHO=T
*
*****
*
* GROUP 21. Print-out of variables.
*
* Printout for the PRESSURE
OUTPUT(P1,Y,N,N,Y,Y,Y)
* Printout for the X-DIRECTION VELOCITY COMPONENT
OUTPUT(U1,Y,N,N,Y,Y,Y)
* Printout for the Y-DIRECTION VELOCITY COMPONENT
OUTPUT(V1,Y,N,N,Y,Y,Y)
* Printout for the Z-DIRECTION VELOCITY COMPONENT
OUTPUT(W1,Y,N,N,Y,Y,Y)
* Printout for the TEMPERATURE
OUTPUT(TEMP,Y,N,N,Y,Y,Y)
* Printout for the USER VARIABLE 1
OUTPUT(DUST,Y,N,N,Y,Y,Y)
*
OUTPUT(RHO1,Y,N,N,Y,Y,Y)
*****
*
* GROUP 22. Spot-value print-out.
*
* X-Direction Index of Spot-Value
IXMON=10
* Y-Direction Index of Spot-Value
IYMON=10
* Z-Direction Index of Spot-Value
IZMON=21
*
*****
*
* GROUP 23. Field print-out and plot control.

```

```

*
* Frequency of tabulation/plots of Spot/Residuals Values
* (DO NOT Reset)
NPLT=1
* Print TABLES AND PLOTS of Spot-Values and Residuals
ITABL=3
*
*****
*
* GROUP 24. Preparations for continuation runs.
* Save the Final Flow Field in a RE-START File
SAVE=T; NSAVE=CHAM
* Input From Customized File : QPLU3D.Q2
* End of Input From Customized File
*****
STOP

```

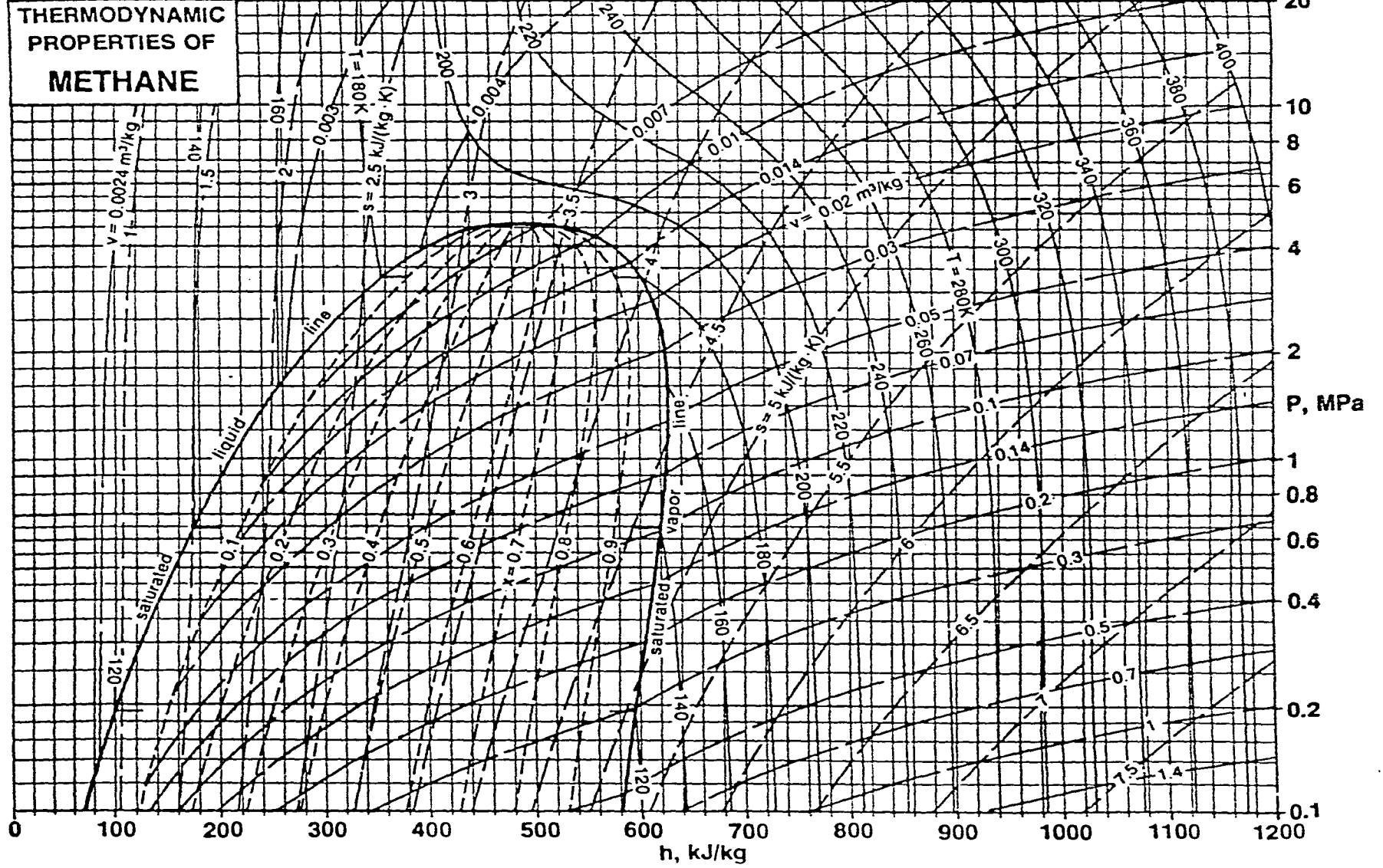
APÉNDICE 3

PROPIEDADES TERMOFÍSICAS DEL AIRE, PROPANO Y METANO

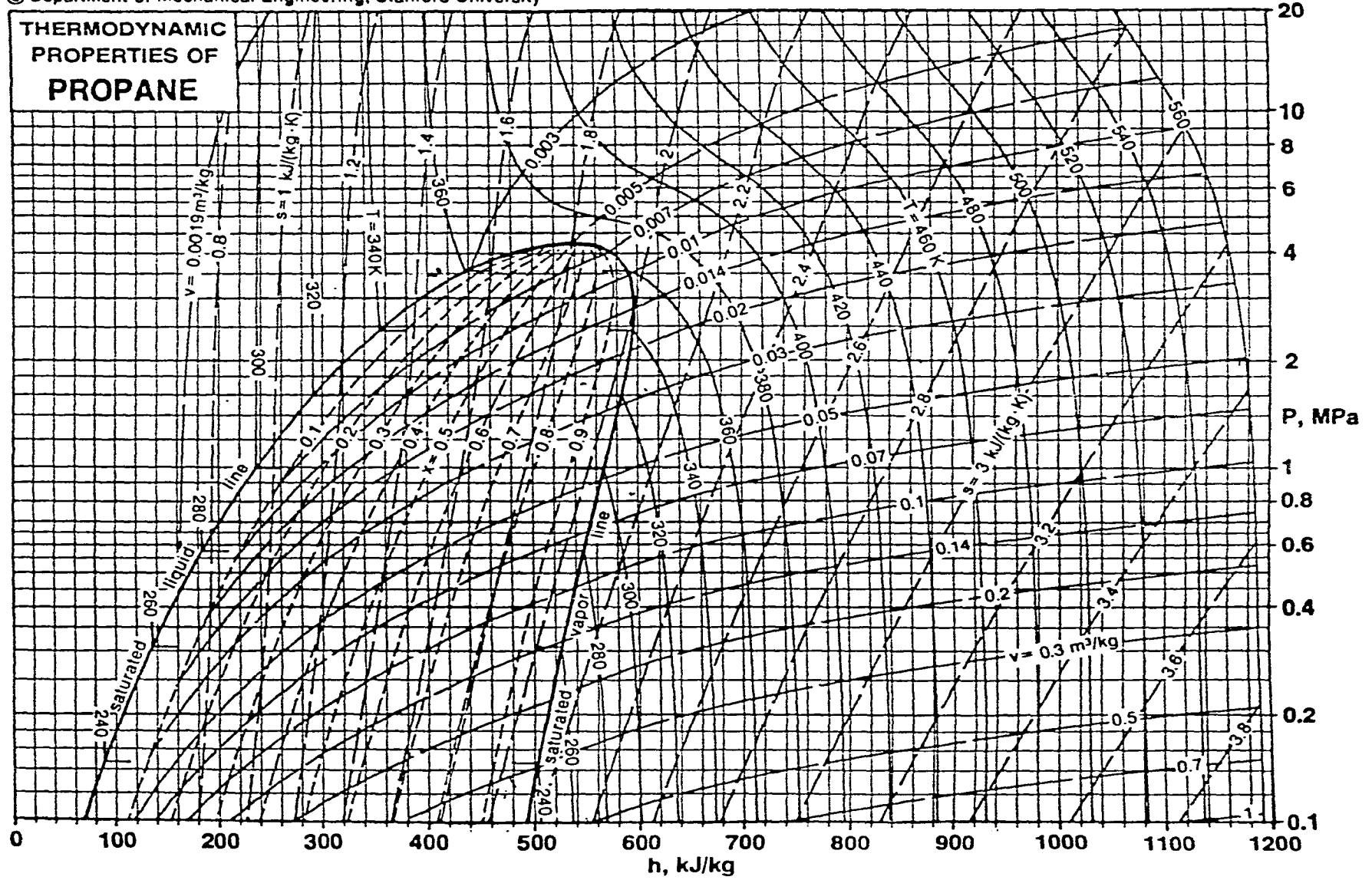
	m_m	T_c K	P_c bar	c_p KJ/(kg K)	c_v KJ/(kg K)	μ N s/m ²	k W/(m K)
AIRE	28.97	133	37.7	1.005	.718	184.6×10^{-7}	.0263
METANO	16.04	190.7	46.4	2.22	1.70	124.0×10^{-7}	.0225
PROPANO	44.09	370	42.7	1.67	1.48	94×10^{-7}	.0407

Límites de inflamabilidad de algunos hidrocarburos

HIDROCARBURO	alto (% masa)	bajo (% masa)
METANO	8.90	2.8315
PROPANO	13.775	3.161



**THERMODYNAMIC
PROPERTIES OF
PROPANE**



APÉNDICE 4

CÁLCULO DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE HIDROCARBUROS (PROPANO)

El cálculo de las propiedades termodinámicas de una sustancia simple compresible requiere de dos tipos de expresiones: 1) una que relacione P-p-T; 2) otra para la capacidad térmica específica a volumen constate C_v para bajas densidades (gas ideal), denotada generalmente por $C_v^0(T)$.

La energía interna de una sustancia simple compresible se puede expresar como

$$u = u(T, v)$$

Si diferenciamos "u" y definimos a C_v como

$$C_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_v \quad (A4.1)$$

entonces tendremos que

$$du = C_v dT + \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)_T dv \quad (A4.2)$$

Existe una relación termodinámica muy importante que establece que

$$\left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)_T = T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_v - P \quad (A4.3)$$

Sustituyendo la anterior relación en la ecuación diferencial de la energía interna, y sabiendo

que $dv = -\frac{dv}{\rho^2}$, entonces la ecuación de la energía interna queda

$$u = \int_{T_0}^T C_v^0(T) dT + \int_0^v \frac{1}{\rho^2} \left[P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \right] d\rho + u_0 \quad (A4.4)$$

De la relación de Gibbs,

$$du = T ds - P dv \quad (A4.5)$$

y sustituyendo las ecuaciones (du, v) en la anterior relación, tenemos que la entropía de un gas ideal se puede calcular como

$$s = \int_{T_0}^T \frac{C_v^0(T)}{T} dT + \int_0^v \frac{1}{\rho^2} \frac{1}{T} \left[\left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)_T + P \right] d\rho + s_0 \quad (A4.6)$$

Finalmente, la entalpía de vaporización se calcula empleando la ecuación de Clapeyron

$$h_{fg} = T v_{fg} \frac{d P_{sat}}{d T_{sat}} \quad (A4.7)$$

y la entropía de vaporización se calcula como

$$s_{fg} = \frac{h_{fg}}{T} \quad (A4.8)$$

En resumen, existen principalmente cuatro relaciones básicas para el cálculo de las propiedades termodinámicas de cada sustancia:

1) Relación presión-densidad-temperatura

$$P = P(\rho, T)$$

2) Calor específico para gases ideales

$$C^u_v = C^u_v(T)$$

3) Presión de saturación

$$P_{sat} = P_{sat}(T_{sat})$$

4) Densidad de líquido saturado

$$\rho_f = \rho_f(T_{sat})$$

Reynolds/22/ propuso varias funciones polinomiales para el cálculo de las propiedades termodinámicas de sustancias. El cálculo de las propiedades del propano se basa en dichas funciones polinomiales descritas a continuación.

1) Relación P-p-T

$$P = \rho R T + \sum_{i=1}^N C_i(T) H_i(\rho) \quad (A4.9)$$

Se tiene que para el propano,

$$C_1 = \left(B_u R T - A_u - \frac{C_u}{T^2} + \frac{D_u}{T^3} - \frac{E_u}{T^4} \right)$$

$$C_2 = \left(b R T - a - \frac{d}{T} \right)$$

$$C_3 = \alpha \left(a + \frac{d}{T} \right)$$

$$C_4 = \frac{c}{T^2}$$

$$H_1 = \rho^2$$

$$H_2 = \rho^1$$

$$H_3 = \rho^b$$

$$H_4 = \rho^3 (1 + \gamma \rho^2) e^{-\gamma \rho^2}$$

por lo que sustituyendo la anteriores ecuaciones en la relación de presión-densidad-temperatura tendremos que

$$P = \rho RT + \left(B_0 RT - A_0 - \frac{C_0}{T^2} + \frac{D_0}{T^3} - \frac{E_0}{T^4} \right) \rho^2 + \left(b RT - a - \frac{d}{T} \right) \rho^3 + \alpha \left(a + \frac{d}{T} \right) \rho^6$$

$$+ c \frac{\rho^3}{T^2} (1 + \gamma \rho^2) e^{-\gamma \rho^2} \tag{A4.10}$$

2) Calor específico para gases ideales

Reynolds obtuvo que el calor específico para gases ideales se puede calcular como

$$C_v^0 = \sum_{i=1}^6 G_i T^{i-2} \tag{A4.11}$$

donde G_i son constantes dadas.

3) Presión de saturación

La presión de saturación del propano a una temperatura dada se calcula como:

$$\ln \left(\frac{P}{P_s} \right) = \left(\frac{T_c}{T} - 1 \right) \sum_{i=1}^8 F_i \left(\frac{T}{T_p} - 1 \right)^{i-1} \tag{A4.12}$$

4) Densidad de líquido saturado

La densidad del líquido saturado del propano se obtiene de la correlación

$$\rho_l = \sum_{i=1}^6 D_i X^{\frac{(i-1)}{3}} \tag{4.13}$$

donde: $X = 1 - \frac{T}{T_c}$

D_i = constantes de Reynolds.

5) Entropía y entalpía

Si denotamos como

$$C_i' = \frac{dC_i}{dT} \quad \text{e} \quad I_i = \int_0^{\rho} \frac{1}{\rho^2} H_i(\rho) d\rho$$

entonces la ecuación de la energía interna se puede reescribir como

$$u = \int_{T_u}^T C_v^u(T) dT + \sum_{i=1}^N [C_i - TC_i'] I_i + u_u \quad (\text{A4.14})$$

y la de la entropía

$$s = \int_{T_u}^T \frac{C_v^u(T)}{T} dT - R \ln(\rho) - \sum_{i=1}^N C_i' I_i + s_u \quad (\text{A4.15})$$

Por tanto, para el cálculo de las propiedades del propano tenemos que

$$C_1' = \left(B_u R + 2 \frac{C_u}{T^3} - 3 \frac{D_u}{T^4} + 4 \frac{E_u}{T^5} \right)$$

$$C_2' = \left(b R - \frac{d}{T^2} \right)$$

$$C_3' = \alpha \left(-\frac{d}{T^2} \right)$$

$$C_4' = -2 \frac{c}{T^3}$$

$$I_1 = \rho$$

$$I_2 = \frac{\rho^2}{2}$$

$$I_3 = \frac{\rho^3}{5}$$

$$I_4 = \left(-\frac{1}{\gamma} - \frac{\rho^2}{2} \right) e^{-\gamma \rho^2} + \frac{1}{\gamma}$$

$$\int_{T_u}^T C_v^u(T) dT = G_1 \ln\left(\frac{T}{T_u}\right) + G_2 (T - T_u) + \frac{G_3}{2} (T^2 - T_u^2) + \frac{G_4}{3} (T^3 - T_u^3) + \frac{G_5}{4} (T^4 - T_u^4) + \frac{G_6}{5} (T^5 - T_u^5)$$

(A4.16)

$$\int_{T_0}^T \frac{C_v^m(T)}{T} dT = -G_1 \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right) + G_2 \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) + G_3 (T - T_0) + \frac{G_4}{2} (T^2 - T_0^2) + \frac{G_5}{3} (T^3 - T_0^3) + \frac{G_6}{4} (T^4 - T_0^4) \quad (\text{A4.17})$$

6) Entalpía y entropía de vaporización

La entalpía de vaporización se calcula empleando la ecuación de Clapeyron:

$$h_{fg} = T v_{fg} \frac{dP_{sat}}{dT_{sat}} \quad (\text{A4.18})$$

Para el propano tenemos que

$$\frac{dP_{sat}}{dT} = P_c \cdot e^{\left(\frac{T_c}{T} - 1 \right) \sum_{i=1}^{\infty} F_i \left(\frac{T}{T_p} - 1 \right)^{i-1}} \cdot \left[\left[-\frac{T_c}{T^2} \right] \sum_{i=1}^{\infty} F_i \left(\frac{T}{T_p} - 1 \right)^{i-1} + \left(\frac{T_c}{T} - 1 \right) \sum_{i=1}^{\infty} F_i \frac{(i-1)}{T_p} \left(\frac{T}{T_p} - 1 \right)^{i-2} \right] \quad (\text{A4.19})$$

La entropía de vaporización se calcula como:

$$s_{fg} = \frac{h_{fg}}{T} \quad (\text{A4.20})$$

Finalmente las propiedades del líquido saturado, u_s y h_s , se calcularon restando u_{fg} y s_{fg} de h_g y s_g respectivamente. Los valores de los coeficientes dados por Reynolds /22/,

$F_i, D_p, G_p, a, b, c, d, A_0, B_0, C_0, D_0, \alpha, \beta$ y γ , se establecen en las Tablas A4.1, A4.2, A4.3, A4.4 y A4.5.

Tabla A 4.1

M_c	T_c	P_c	ρ_c	T_0
44.09 kg/kmol	369.82 K	4.2362 MPa	197.38 kg/m ³	200 K

Tabla A 4.2 Constantes para la relación P-ρ-T

R	1.887326×10^4	b	1.096523×10^{-5}
B ₀	1.366892×10^{-3}	a	7.856721×10^{-1}
A ₀	2.579108×10^2	d	1.639769×10^2
C ₀	3.401044×10^7	c	1.661103×10^5
D ₀	1.07628×10^3	α	5.728034×10^{-9}
E ₀	3.375879×10^{10}	γ	9.157270×10^{-6}

Tabla A 4.3 Constantes para el cálculo de la P_{sat}

F ₁	-6.2309993	F ₆	1.1216551×10^2
F ₂	$-4.4226860 \times 10^{-1}$	F ₇	2.7635840×10^2
F ₃	-1.8839624	F ₈	2.3585357×10^2
F ₄	3.6383362×10^{-1}	T _p	300.0
F ₅	1.5177354×10^1	P _c	4.2359300×10^6

Tabla A 4.4 Constantes para el cálculo de ρ_l

D ₁	1.9738193×10^2	D ₄	-7.7040243×10^3
D ₂	-2.1307184×10^1	D ₅	7.5224059×10^3
D ₃	3.3522024×10^3	D ₆	-2.5663363×10^3

Tabla A 4.5 Constantes para el cálculo de C_v

G ₁	2.0582170×10^5	G ₅	4.5167026×10^{-6}
G ₂	-1.9109547×10^3	G ₆	$-8.6345035 \times 10^{-10}$
G ₃	1.1622054×10^1	u ₀	4.2027216×10^3
G ₄	$-9.7951510 \times 10^{-3}$	s ₀	2.1673997×10^3

En base a las relaciones descritas anteriormente, se desarrolló un programa en FORTRAN que realiza el cálculo del volumen específico, la entalpía, la energía interna y la entropía de líquido y vapor saturado a partir de una presión dada. El listado del programa se presenta al final del presente Apéndice.

SUBROUTINA PARA EL CÁLCULO DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DEL
PROPANO

```

SUBROUTINE TPF(PARA)
  IMPLICIT REAL*8(A-Z)
  COMMON/FP/Z(40)
  COMMON/BLOCK/C0(5),C1(12),C2(10),C3(6),C4(8)
  COMMON/DER/DFXN,PF,TF
  COMMON E(7),SR,PI,AJ,PD
  EXTERNAL FSAT
  IF(PARA-4.D2)1,1,2
2 P=PARA
  IF(P.LT.8.6D0) GO TO 6
  IF(P.GT.103.42D5) GO TO 6
  PF=P
  CALL NEWTON(FSAT,1.D-7,50,270.D0,T)
  GO TO 3
1 T=PARA
3 CALL PRT(T,P)
  E(1)=T
  RETURN
6 PRINT 7
7 FORMAT(1X,'P IS OUT OF RANGE')
  RETURN
  END
C.....
SUBROUTINE PROPTP(P,V,X,U,H,S)
  IMPLICIT REAL*8(A-Z)
  DIMENSION Z(40)
  COMMON E(7),SR,PI,AJ,PD/FP/Z
  CALL TPF(P)
  X=(V-Z(2))/Z(20)
  U=Z(22)*(1-X)+Z(23)*X
  S=Z(6)*(1-X)+Z(7)*X
  H=Z(4)*(1-X)+Z(5)*X
  RETURN
  END
C.....
SUBROUTINE PGAS(T,P,V,U,H,S)
  IMPLICIT REAL*8(A-Z)
  EXTERNAL FDEN
  COMMON/BLOCK/C0(5),C1(12),C2(10),C3(6),C4(8)/DER/DFXN,PF,TF
C   P=C1(1)*T*RO+(C1(2)*C1(1)*T-C1(3)-C1(4)/T**2+C1(5)/T**3-C1(6)/T**4)
C   **RO**2+(C1(7)*C1(1)*T-C1(8)-C1(9)/T)*RO**3+C1(11)*(C1(8)+C1(9)/T)*RO**6
C   **C1(10)*RO**3/T**2*(1.D0+C1(12)*RO**2)*DEXP(-C1(12)*RO**2)
  PF=P
  TF=T
  RO=P/C1(1)/T
  CALL NEWTON(FDEN,1.D-7,20,RO,RO)
  V=1./RO
  A1=(C1(2)*C1(1)*T-C1(3)-C1(4)/T**2+C1(5)/T**3-C1(6)/T**4)
  A2=(C1(7)*C1(1)*T-C1(8)-C1(9)/T)
  A3=C1(11)*(C1(8)+C1(9)/T)

```

```

A4=C1(10)/T**2
B1=C1(2)*C1(1)+2.D0*C1(4)/T**3-3.*C1(5)/T**4+4.D0*C1(6)/T**5
B2=C1(7)*C1(1)+C1(9)/T**2
B3=-C1(11)*C1(9)/T**2
B4=-2.D0*C1(10)/T**3
D1=RO
D2=0.5*RO**2
D3=0.2*RO**5
D4=DEXP(-C1(12)*RO**2)*(-RO**2*0.5-1./C1(12))+1./C1(12)
P=RO*C1(1)*T+A1*RO**2+A2*RO**3+A3*RO**6+A4*RO**3*(1.+C1(12)*
*RO**2)*DEXP(-C1(12)*RO**2)
U=C4(1)*DLOG(T/C0(5))+C4(2)*(T-C0(5))+0.5*C4(3)*(T**2-C0(5)**2)+
*C4(4)/3.*(T**3-C0(5)**3)+0.25*C4(5)*(T**4-C0(5)**4)+0.2*C4(6)*
*(T**5-C0(5)**5)+(A1-T*B1)*D1+(A2-T*B2)*D2+(A3-T*B3)*D3+(A4
*-T*B4)*D4+C4(7)
H=U+P/RO
S=-C4(1)*(1./T-1./C0(5))+C4(2)*DLOG(T/C0(5))+C4(3)*(T-C0(5))
*+0.5*C4(4)*(T**2-C0(5)**2)+C4(5)*(T**3-C0(5)**3)/3.
*+C4(6)*(T**4-C0(5)**4)*.25-C1(1)*DLOG(RO)-B1*D1-B2*D2
*-B3*D3-B4*D4+C4(8)
RETURN
END
SUBROUTINE SAT(T,P,RO,DPDT)
IMPLICIT REAL*8(A-Z)
COMMON/BLOCK/C0(5),C1(12),C2(10),C3(6),C4(8)
TP=(T/C2(9))-1.D0)
P=C0(3)*DEXP((C0(2)/T-1.D0)*(C2(1)+C2(2)*TP+C2(3)*TP**2
*+C2(4)*TP**3+C2(5)*TP**4+C2(6)*TP**5+C2(7)*TP**6+C2(8)*TP**7))
A=C2(1)+C2(2)*TP+C2(3)*TP**2+C2(4)*TP**3
*+C2(5)*TP**4+C2(6)*TP**5+C2(7)*TP**6+C2(8)*TP**7
DPDT=P*(-C0(2)/T**2*A+(C0(2)/T-1.D0)/C2(9)*(C2(2)+2.*C2(3)*TP
*+3.*C2(4)*TP**2+4.*C2(5)*TP**3+5.*C2(6)*TP**4
*+6.*C2(7)*TP**5+7.*C2(8)*TP**6))
X=1.-T/C0(2)
RO=C3(1)+C3(2)*X**(1./3.)+C3(3)*X**(2./3.)
*+C3(4)*X+C3(5)*X**(4./3.)+C3(6)*X**(5./3.)
RETURN
END
SUBROUTINE PRT(T,P)
IMPLICIT REAL*8(A-Z)
COMMON/BLOCK/C0(5),C1(12),C2(10),C3(6),C4(8)/FP/Z(40)
CALL SAT(T,P,ROF,DPDT)
CALL PGAS(T,P,Z(3),Z(23),Z(5),Z(7))
Z(20)=Z(3)-1./ROF
Z(21)=T*Z(20)*DPDT
SFG=Z(21)/T
Z(4)=Z(5)-Z(21)
Z(6)=Z(7)-SFG
Z(1)=P
Z(2)=1./ROF
Z(22)=Z(4)-P*Z(2)
Z(24)=Z(23)-Z(22)
Z(10)=1625.
Z(11)=0.128

```



```

Z(12)=1.127D-4
Z(13)=0.11D-4
RETURN
END
SUBROUTINE NEWTON(F,EP,M,X1,XF)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/DER/DFXN,P,T
NITER=0
XN=X1
DO 200 I=1,M
NITER=NITER+1
DFXN=(F(XN+EP*XN)-F(XN))/EP/XN
XN1=XN-(F(XN)/DFXN)
DELN=ABS((XN1-XN)/XN1)
IF(DELN.LE.EP) THEN
GOTO 201
ENDIF
200 XN=XN1
201 CONTINUE
XF=XN
RETURN
END
FUNCTION FDEN(RO)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/BLOCK/C0(5),C1(12),C2(10),C3(6),C4(8)/DER/DFXN,PF,TF
T=TF
FDEN=C1(1)*T*RO+(C1(2)*C1(1)*T-C1(3)-C1(4)/T**2+C1(5)/T**3
*-C1(6)/T**4)*RO**2+(C1(7)*C1(1)*T-C1(8)-C1(9)/T)*RO**3
*+C1(11)*(C1(8)+C1(9)/T)*RO**6+C1(10)*RO**3/T**2*(1.D0
*+C1(12)*RO**2)*DEXP(-C1(12)*RO**2)-PF
DFXN=C1(1)*T+(C1(2)*C1(1)*T-C1(3)-C1(4)/T**2+C1(5)/T**3
*-C1(6)/T**4)*RO**2.+(C1(7)*C1(1)*T-C1(8)-C1(9)/T)*RO**2*3.
*+C1(11)*(C1(8)+C1(9)/T)*RO**5*6.+C1(10)*RO**2/T**2*
*C1(12)*(3.D0+3.*C1(12)*RO**2-2.*C1(12)**2*RO**4)*DEXP(
*-C1(12)*RO**2)
RETURN
END
FUNCTION FSAT(T)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/BLOCK/C0(5),C1(12),C2(10),C3(6),C4(8)/DER/DFXN,PF,TF
TP=(T/C2(9)-1.D0)
FSAT=C0(3)*DEXP((C0(2)/T-1.D0)*(C2(1)+C2(2)*TP+C2(3)*TP**2
*+C2(4)*TP**3+C2(5)*TP**4+C2(6)*TP**5+C2(7)*TP**6+C2(8)*TP**7))-PF
A=C2(1)+C2(2)*TP+C2(3)*TP**2+C2(4)*TP**3
*+C2(5)*TP**4+C2(6)*TP**5+C2(7)*TP**6+C2(8)*TP**7
DFXN=PF*(-C0(2)/T**2*A+(C0(2)/T-1.D0)/C2(9)*(C2(2)+2.*C2(3)*TP
*+3.*C2(4)*TP**2+4.*C2(5)*TP**3+5.*C2(6)*TP**4
*+6.*C2(7)*TP**5+7.*C2(8)*TP**6))
RETURN
END
BLOCK DATA
IMPLICIT REAL*8(A-Z)
COMMON/BLOCK/C0(5),C1(12),C2(10),C3(6),C4(8)
DATA C0/44.09,369.82,4.2362D6,197.38,200.0/

```

DATA C1/1.887326D2,1.366892D-3,2.579108D2,3.401044D7,1.076728D9,
*3.375879D10,1.096523D-5,7.85672D-1,1.639769D2,1.661103D5,
*5.728034D-9,9.157270D-6/
DATA C2/-6.2309993,-4.422686D-1,-1.8839624,3.6383362D-1,
*1.5177354D1,1.1216551D2,2.7635840D2,2.3585357D2,300.,4.2359300D6/
DATA C3/1.9738193D2,-2.1307184D1,3.3522024D3,-7.7040243D3,
*7.5224059D3,-2.5663363D3/
DATA C4/2.0582170D5,-1.9109547D3,1.1622054D1,-9.7951510D-3,
*4.5167026D-6,-8.6345035D-10,4.2027216D5,2.1673997D3/
END

APÉNDICE 5

DISCRETIZACIÓN DEL DOMINIO

	Y (m)	Z (m)	X/2 (m)
1	12.53	1080.35	2.50
2	30.85	1920.28	16.21
3	52.26	2521.34	41.27
4	75.97	2881.72	73.72
5	101.50	3001.41	112.16
6	128.70	3006.61	155.72
7	157.20	3033.93	203.91
8	187.00	3117.20	256.33
9	218.00	3255.10	312.61
10	250.00	3448.95	372.55
11	267.90	3698.74	435.87
12	308.20	4003.18	502.50
13	365.90	4363.55	
14	439.00	4779.87	
15	526.10	5250.84	
16	626.40	5777.74	
17	739.20	6359.29	
18	863.90	6996.78	
19	1000.00	7688.91	
20		8436.99	
21		9241.00	
22		10100.44	
23		11014.27	
24		11984.81	
25		13010.00	

INTERVALOS DE TIEMPO (SIMULACIÓN METANO)

	T (s)
1	349.11
2	801.99
3	1305
4	1842.3
5	2408.4
6	2997
7	3606.3
8	4232.7
9	4875.3
10	5532.3
11	6202.8
12	6885.9
13	7579.8
14	8284.5
15	9000

INTERVALOS DE TIEMPO (SIMULACIÓN PROPANO)

	T (s)	T (s)
1	982.1	1155.55
2	2256.8	2654.85
3	3670.8	4319.15
4	5184.2	6099.5
5	6776	7975
6	8435	9922
7	10150	11940.5
8	11907	14014
9	13720	16142.5
10	15680	18315
11	17451	20537
12	19376	22797.5
13	21329	25096.5
14	23310	27428.5
15	25326	29793.5
16	27363	32175
17	29428	34622.5
18	31514	37081
19	33628	39567
20	35763	42080.5
21	38290	44616
22	40096	47179
23	42294	49764
24	44513	52371
25	46746	55000
26	49000	
27	51268	
28	53557	
29	55860	
30	58177	
31	60515	
32	62860	
33	65226	
34	67606	
35	70000	