



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**

---

---

**FACULTAD DE INGENIERÍA**

**“SIMULACIÓN NUMÉRICA CUASI-  
BIFÁSICA DE UN FLUJO DE AMONÍACO  
DISPERSO EN LA ATMÓSFERA”**

**T E S I S**

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
**INGENIERO MECÁNICO**

P R E S E N T A:

**AURELIANO JAVIER  
MANRÍQUEZ GARCÍA**



DIRECTOR DE TESIS: DR. MARTÍN SALINAS VÁZQUEZ

MÉXICO, D.F. CD. UNIVERSITARIA

2005



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**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:

Porque siempre me han dado la libertad,  
para elegir y cumplir mis sueños.  
Y por estar conmigo, en todo momento

A mí hermana:

Porque ser mi ejemplo a seguir.  
Y por escucharme siempre,  
que necesito ser escuchado.

A Martín Salinas:

Por haber confiado en mí.  
Y por brindarme su amistad.

A William Vicente:

Gracias por tener siempre un minuto de tu tiempo.

A Mariano García:

Por ser uno de los mejores profesores de la F.I.  
Además de ser un buen amigo.

A Ale:

Por todas las risas compartidas,  
y porque siempre has estado ahí.

A Daniela:

Por ser una buena amiga.

A mis amigos:

Por las fiestas, los viajes, los consejos.  
Por filosofar y tener siempre una sonrisa de ellos.

A la Universidad Nacional Autónoma de México:  
Por la cultura y ciencia que me ha brindado.

A CONACYT:

Por el apoyo a este proyecto.  
CONACYT-SEMARNAT-2002-C01-148

# ÍNDICE

ÍNDICE	I
INTRODUCCIÓN	1
1  AMONÍACO	3
1.1  El amoníaco	4
1.2  Aplicaciones del amoníaco	4
1.3  El amoníaco y los riesgos que ocasiona	5
1.3.1  Fuego	5
1.3.2  Explosión	6
1.3.3  La salud y el amoníaco	7
2  EXPERIMENTO	9
2.1  Ensayo de la dispersión atmosférica	10
2.2  Descripción de las pruebas a gran escala	12
3  ECUACIONES DE TRANSPORTE	17
3.1  El problema considerado	18
3.2  Continuidad	19
3.3  Conservación de cantidad de movimiento	19
3.4  Conservación de las especies	20
3.5  Conservación de la energía total	21
3.6  Ecuación de estado y flujo difusivo	23
3.7  Promedio de las ecuaciones	25
3.8  Evaporación	28

3.9	Modelo de Turbulencia	29
3.10	Propiedades de la mezcla	30
4	MÉTODO DE SOLUCIÓN	31
4.1	Método de volúmenes finitos	32
5	DETALLES NUÉRICOS	40
5.1	Condiciones de frontera	41
5.2	Propiedades en la descarga de amoníaco	43
5.3	Diseño del dominio	47
6	RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN NUMÉRICA	49
6.1	Generalidades	50
6.2	Análisis de resultados	50
6.2.1	Velocidad	50
6.2.2	Densidad	53
6.2.3	Amoníaco	56
6.2.4	Partes por Millón	60
7	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	63
7.1	Conclusiones	64
7.2	Recomendaciones	65
	BIBLIOGRAFÍA	66
	APÉNDICES	
	APÉNDICE 1	68
	APÉNDICE 2	75

# Introducción

El amoníaco se presenta de forma natural en el mundo, esto contribuye a que las plantas y animales lo utilicen para la supervivencia de ellos mismos. Sin embargo, el hombre ha tratado de controlar la naturaleza y por lo tanto, ha diseñado métodos de producción y fabricación de esta sustancia, esto a su vez a contribuido a diseñar modelos de prevención en riesgos latentes, ya que el amoníaco es altamente toxico.

En la actualidad el amoníaco ha tenido una amplia utilización y producción, en diversos campos de la industria y para ejemplificar se pueden mencionar sólo algunos: refrigeración, agricultura, resinas sintéticas, plásticos, cervecerías, etc. Estos ejemplos ilustran el porque se debe de tomar una cultura de prevención en posibles accidentes industriales y por lo tanto prevenir el comportamiento de una descarga por accidente, para no exponer vidas humanas o posibles daños colaterales que se puedan tener en el medio ambiente.

Desastres como el ocurrido en Dakar que tuvo como resultado el deceso de 129 personas, a tenido como consecuencia la investigación en este rubro, es por ello que el Instituto Nacional del Medio Ambiente Industria y de Riesgos (INERIS por sus siglas en francés), ha realizado experimentos sobre fugas de amoníaco. Sin embargo, los accidentes también han existido en México y para ello recordemos el caso ocurrido el 13 de abril del año 2005 en Nanchital, Veracruz, en el cual causó 6 decesos, 30 personas intoxicadas y el desalojo de más de 6 mil colonos.

Ejemplos como los anteriores demuestran la necesidad y el interés por seguir haciendo investigaciones a cerca del comportamiento del amoníaco en una descarga hacia la atmósfera.

En el presente trabajo se hace un estudio detallado sobre una descarga de amoníaco a la atmósfera, en estado bifásico, el cual contiene amoníaco líquido y gaseoso. La finalidad de este estudio es poder predecir el alcance que tiene el amoníaco, simulando diferentes condiciones de velocidad y dirección del viento, de esta forma se puede entender más sobre este fenómeno.

La simulación numérica es una herramienta de bajo costo, comparada con experimentos reales, además en un experimento no se pueden controlar las diferentes condiciones ambientales y la repetición de los experimentos es costosa, así como los instrumentos de medición. Es por ello que una alternativa para predecir desastres naturales esta simulación numérica. Sin embargo, también hay que validar los resultados, con experimentos realizados, de esta forma se puede decir que las preediciones son cercanas a la realidad y tomarlas como válidas.

# **CAPÍTULO 1**

## ***AMONÍACO***

El amoniaco se encuentra en el medio ambiente, éste es necesario para la vida de los animales y las plantas. También puede ser manufacturado y así ser ocupado en aplicaciones industriales. Por su alto uso industrial y su gran toxicidad, el amoníaco puede ser un gran problema para las zonas alrededor de las industrias que lo utilizan. Algunas de sus características son mencionadas a continuación.

## 1.1 El amoníaco

El amoníaco es un gas alcalino e incoloro, compuesto por un átomo de nitrógeno (N) y tres átomos de hidrógeno (H) de acuerdo a la fórmula  $\text{NH}_3$  con un olor punzante característico, altamente soluble en agua, que se hace perceptible en concentraciones sobre las 50 partículas por millón (ppm).

En la naturaleza el amoníaco es un subproducto de la fisiología animal y bacterias, esto ocasiona que se encuentre en el aire, suelo, agua, plantas y animales. Sin embargo, no permanece mucho tiempo en el ambiente ya que es incorporado rápidamente por las plantas y bacterias ya que sirve como alimento para las mismas [1].

A temperatura ambiente y presión atmosférica, el amoniaco se encuentra en un estado gaseoso con una densidad  $0.72 \text{ kg/m}^3$ , con un peso molecular de  $17.03 \text{ g/gmol}$ , constituido por un 82.35% de nitrógeno y un 17.65% de hidrógeno (ambos porcentajes en peso). El amoníaco puro ( $\text{NH}_3$ ) condensa a  $-33.35^\circ \text{C}$  en un líquido incoloro y fácilmente movable con una densidad de  $684 \text{ kg/m}^3$  y un calor latente de vaporización de  $328 \text{ cal/g}$ . Y a  $-78^\circ \text{C}$  solidifica para dar cristales incoloros y transparentes [2].

## 1.2 Aplicaciones del amoníaco

El amoniaco tiene una gran diversidad de usos en la industria moderna, la mayoría de sus aplicaciones se relacionan con la refrigeración, por ejemplo: en procesado de alimentos, fábricas de helados, cervecerías, etc., sin embargo, sus aplicaciones en la industria van mas allá, y lo podemos encontrar en la fabricación de abonos; como disolvente en la industria textil de cuero y de papel y como estabilizante en la fabricación de caucho. También se utiliza en la síntesis de ácido nítrico, urea, plásticos, fibras, resinas sintéticas, productos farmacéuticos, pesticidas, explosivos, cianuros, amidas, colorantes, aminas y productos de limpieza; en minería en operaciones de extracción y purificación;

en la industria del petróleo como agente neutralizante, en la fabricación y recuperación de catalizadores de "cracking" y en el desparafinado de aceites lubricantes.

En la industria agrícola se utiliza como fertilizante, representando alrededor del 12% del costo de la producción. EL beneficio a corto plazo es el incremento de la producción de hasta un 50%, sin embargo, también puede ocasionar degradación de las tierras de cultivo y en consecuencia erosión de las mismas.

Los fertilizantes mas comunes que se utilizan para incorporar Nitrógeno al suelo se mencionan en la tabla 1.

<i>Amoníaco anhidro</i>	<i>82% N</i>
<i>Urea</i>	<i>46% N</i>
<i>Nitrato de amonio</i>	<i>33.5 % N</i>
<i>Sulfato de amonio</i>	<i>21 % N</i>
<i>Fosfato diamónico</i>	<i>18 % N</i>

Tabla 1. Fertilizantes comunes

### **1.3 El amoníaco y los riesgos que ocasiona [3]**

#### **1.3.1 Fuego**

El amoníaco es clasificado como un gas no inflamable. Sin embargo, puede ser inflamable sólo en casos que sea expuesto al fuego de una forma directa, este riesgo se incrementa en presencia de algún proceso de combustión.

El amoníaco también es considerado como un gas combustible; bajo ciertas condiciones es posible realizar la combustión del mismo, esto no quiere decir que en condiciones ambientales se pueda realizar la combustión del amoníaco por autoignición, ya que la temperatura necesaria para que ocurra este fenómeno es de 650 C. La temperatura de autoignición es la temperatura mínima con la que un gas reacciona químicamente, produciendo una flama espontánea. La temperatura de autoignición es elevada en el amoníaco ya que está compuesto de hidrógeno y nitrógeno, esté último es un gas inerte y

teniendo un porcentaje de peso molecular mayor, siendo el limitante de la inflamabilidad del amoníaco.

De acuerdo a la National Fire Protection Assosiation (NFPA), el amoníaco puede arder en ciertas condiciones de oxígeno en el aire. Sus limites de inflamabilidad en porcentaje volumétrico se especifican en la tabla 2.

	<b>Límite Inferior</b>	<b>Límite Superior</b>
<i>Porcentaje de inflamabilidad del amoníaco</i>	16 %	25 %

Tabla 2. Inflamabilidad del amoníaco en porcentaje volumétrico

### **1.3.2 Explosión**

Los riesgos que existen para que el amoníaco realice una explosión son mínimos, ya que estamos hablando de que el amoníaco se almacena a una temperatura superior a la temperatura de ebullición del mismo, Por lo que no es probable que se presente un Boiling Liquid Expansion Vapour Explosion (BLEVE por sus siglas en inglés).

El BLEVE es causado por alguna falla en el contenedor en donde se encuentre el amoniaco. Una de las principales causas del mismo es el efecto de la corrosión en los materiales de construcción del tanque, brida, válvula u otro componente que intervenga en el presurizado.

El material del tanque también va a limitar la velocidad de descomposición del amoníaco en hidrógeno y nitrógeno, ya que dicha descomposición se puede llevar a cabo sólo en temperaturas mayores a la temperatura ambiente y por lo tanto, provocar un riesgo de explosión.

El amoníaco puede presentar reacciones violentas e incluso explosivas si se mezcla con los reactivos que se enuncian en la tabla 3.

<b>Reactivos que reaccionan con el amoníaco</b>
Acetaldehído
Acroleína
Boro
Haluros de boro
Calcio
Ácido clórico
Azida de cloro
Monóxido de cloro
Trifluoruro de cloro
Cromo
Anhídrido crómico
Clorato de potasio

Tabla 3. Compuestos Reactivos

### **1.3.3 La salud y el amoníaco [4]**

De acuerdo con el NFPA un riesgo para la salud es cualquier propiedad de un material que directa o indirectamente puede causar lesión o incapacidad, ya sea temporal o permanente, al quedar expuesto por contacto, inhalación o ingestión.

El amoníaco es irritante y corrosivo, cuando se mezcla con agua produce Hidróxido de amonio ( $\text{NH}_4\text{OH}$ ), la cual si entra en contacto con la piel provoca ardor, lo cual es significado que ha atravesado los tejidos y los corroe, al mismo tiempo que se combina con las albúminas, para formar combinaciones solubles en agua y principalmente saponifica las grasas (esto es convertir a las grasas

en jabón). A esta acción de corrosión en los tejidos se le conoce como: Necrosis de Licuefacción, la cual provoca la formación de incisiones blandas, untuosas y traslúcidas.

Los efectos que provoca el amoníaco son clasificados de grado 3, el grado es equivalente a sustancias que causan daños severos a la salud. En exposiciones de corto tiempo podría causar serios daños temporales o residuales, aún con atención medica inmediata.

En la tabla 4, se presentan algunos de los daños que puede causar el estar expuesto al amoníaco.

<b>Tipo de Contacto</b>		<b>Daños causados</b>
<b><i>Inhalación</i></b>	1	Irrita y quema el tracto respiratorio causando laringitis.
	2	Dificultad para respirar, tos y dolor de pecho.
	3	Produce enfisema pulmonar y neumonía, puede ser mortal
	4	En concentraciones de 400 ppm irrita la tráquea; con 1715 ppm produce tos; 2429 ppm existe riesgo de muerte; 5000 ppm muerte inminente.
<b><i>Contacto con los ojos</i></b>	5	Irritación de ojos, provocando dolor, conjuntivitis, lagrimeo e incluso erosión de la cornea. A concentraciones mayores de 29 ppm.
<b><i>Contacto con la piel</i></b>	6	Dolor de la piel, quemaduras. En concentraciones de 10000 ppm.
<b><i>Ingestión</i></b>	7	Destruye los tejidos.
	8	Labios y lengua blanquecinos y edematosos.
	9	Vomito y quemaduras en la boca, esófago, estómago e intestino.
<b><i>Carcinogenicidad</i></b>	10	Lesiones inflamatorias de colon y proliferación celular.
	11	Susceptibilidad de cáncer.

Tabla 4. Efectos del amoníaco en el cuerpo [5] .

# **CAPÍTULO 2**

## ***EXPERIMENTO***

Este trabajo es parte de la solución de diferentes modelos para el estudio de la dispersión de amoníaco con el medio ambiente. Para este motivo, se trató de reproducir un ensayo experimental y comparar los resultados de dispersión de amoníaco a gran escala, realizado en Francia, por el Instituto Francés INERIS (Institut National de l'environnement Industriel et des Risques). En el ensayo del INERIS se realizaron quince experimentos, de los cuales se tomo como el número cuatro, para hacer la comparación entre los resultados experimentales y las predicciones del modelo numérico que se presenta en el siguiente capítulo.

## 2.1 Ensayo de la dispersión atmosférica [2]

El Instituto Francés **INERIS** ha realizado diversos ensayos enfocados hacia el estudio de la dispersión de amoníaco en el medio ambiente, con el fin de poder establecer zonas de seguridad en caso de que exista una fuga accidental.

La dispersión atmosférica de un gas es afectada por las condiciones de salida y meteorológicas, así también de la naturaleza del mismo.

Las fugas de amoníaco pueden ser de diferentes formas:

- Fuga de amoníaco gaseoso a partir de un recipiente que se encuentre presurizado (fuga a partir de la fase gaseosa).
- Fuga de amoníaco bifásico de un recipiente que se encuentre presurizado (fuga a partir de la fase líquida).
- Evaporación de amoníaco en su fase líquida donde la temperatura es inferior o igual a la temperatura de ebullición.
- Fuga de amoníaco líquido a partir de un contenedor criogénico (amoníaco líquido a temperatura inferior a la temperatura de ebullición a presión atmosférica)

El amoníaco presenta características específicas de dispersión de acuerdo con el tipo de salida. El tipo de salida que más se ha estudiado es la fuga de amoníaco bifásico a partir de la fase líquida de un contenedor bajo presión.

Existen estudios realizados en fugas bifásicas, que muestran que es posible clasificar en flujo en tres zonas como lo muestra la *figura 1*.

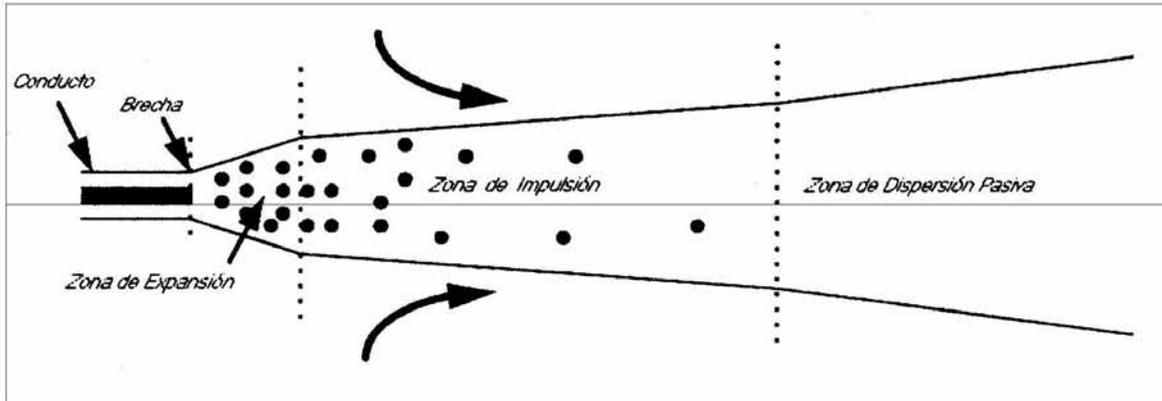


Figura 1. Disipación de un chorro

Estas tres zonas son respectivamente:

La **zona de expansión** la cual es muy pequeña, teniendo una longitud entre 0.5 y 4 veces el diámetro de la abertura, en esta zona es donde ocurre la expansión del gas de la presión del tanque a la presión atmosférica. Cuando ocurre esta despresurización, una fracción del amoníaco líquido sufre un cambio de fase evaporándose casi instantáneamente; a este fenómeno se le conoce como *flash termodinámico*.

La diferencia de velocidades de las fases provoca que la fase gaseosa impulse a la fase líquida dividiéndola en pequeñas gotas. Al final de esta zona existe un flujo bifásico que consiste en amoníaco gaseoso y gotas de amoníaco, esto constituye lo que se conoce como "aerosol".

La **zona de impulsión** permite que la turbulencia deje entrar aire atmosférico en el chorro, el cual contiene energía, con lo cual se tiene una diferencia de temperatura entre el aire y las gotas de amoníaco. Este fenómeno ocasiona un incremento de temperatura en el amoníaco, el cual da como resultado que las pequeñas gotas de amoníaco sufran una evaporación, provocando una disminución de temperatura en el fluido, en consecuencia el fluido se comporta como un gas pesado.

Una vez que la fase líquida se evaporó por completo, la energía calienta el chorro y lo convierte completamente en un gas.

En la **zona de dispersión pasiva**, la velocidad del chorro va disminuyendo paulatinamente hasta alcanzar la velocidad del viento. A este fenómeno se le conoce como dispersión pasiva en la atmósfera y se hablará de él como tal.

En el caso de que existieran obstáculos lo suficientemente cerca de la fuga modificará de manera importante la fase inicial de la dispersión y por lo tanto se modificará la dispersión en la atmósfera.

Por otro lado, si el obstáculo se encuentra lejos de la fuga no modificará el estado físico de la expulsión, modificando únicamente el flujo de las masas del gas.

## **2.2 Descripción de las pruebas a gran escala**

Los quince ensayos realizados por el INERIS simulan las diferentes configuraciones más cercanas a las condiciones reales de trabajo en una industria, de los cuales se hace referencia al experimento cuatro, ya que éste consiste en una fuga de amoníaco en fase líquida, dicha configuración se muestra en la *figura 2*.

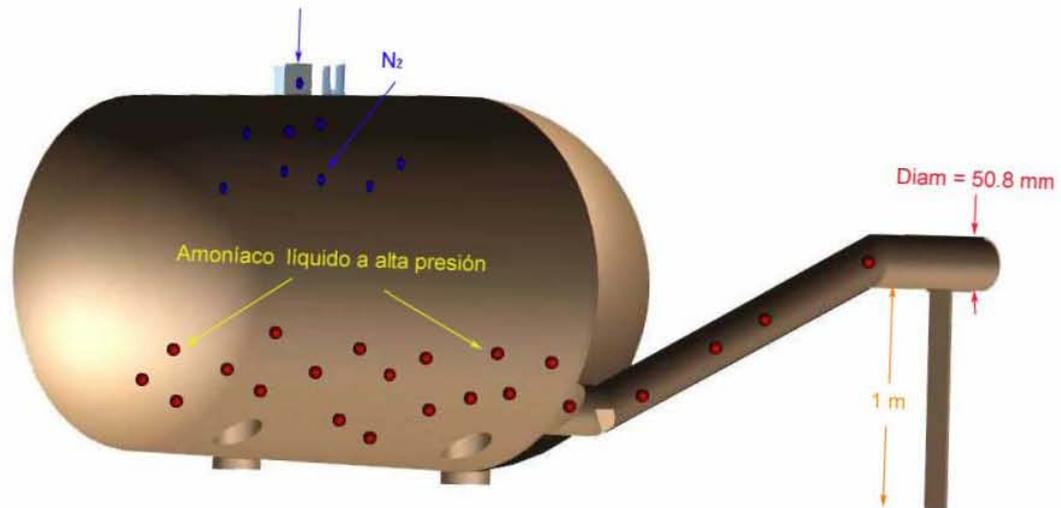


Figura 2. Configuración del experimento

En este trabajo se tomó como referencia el trabajo número 4 realizado por INERIS, el cual realizó quince ensayos con distintas configuraciones, el ensayo número 4 consiste en una fuga en fase líquida horizontal a un metro de altura a través de un orificio de 50.8 mm.

En el ensayo anterior se inyectó nitrógeno, con el fin de mantener una presión constante durante el experimento.

Dicho ensayo tuvo una duración de 600 segundos en los cuales se liberaron 2520 kilogramos de amoníaco, teniendo así un gasto másico de 4.2 kilogramos por segundo.

El ensayo experimental se realizó en el Centro de Estudios Científicos y Técnicos de Aquitaine. Se colocaron los contenedores de amoníaco sobre una plancha de concreto de 15 cm de espesor.

Dichos contenedores son de  $12 \text{ m}^3$  cada uno, el amoníaco se almacena bajo condiciones de saturación como lo muestra la figura.

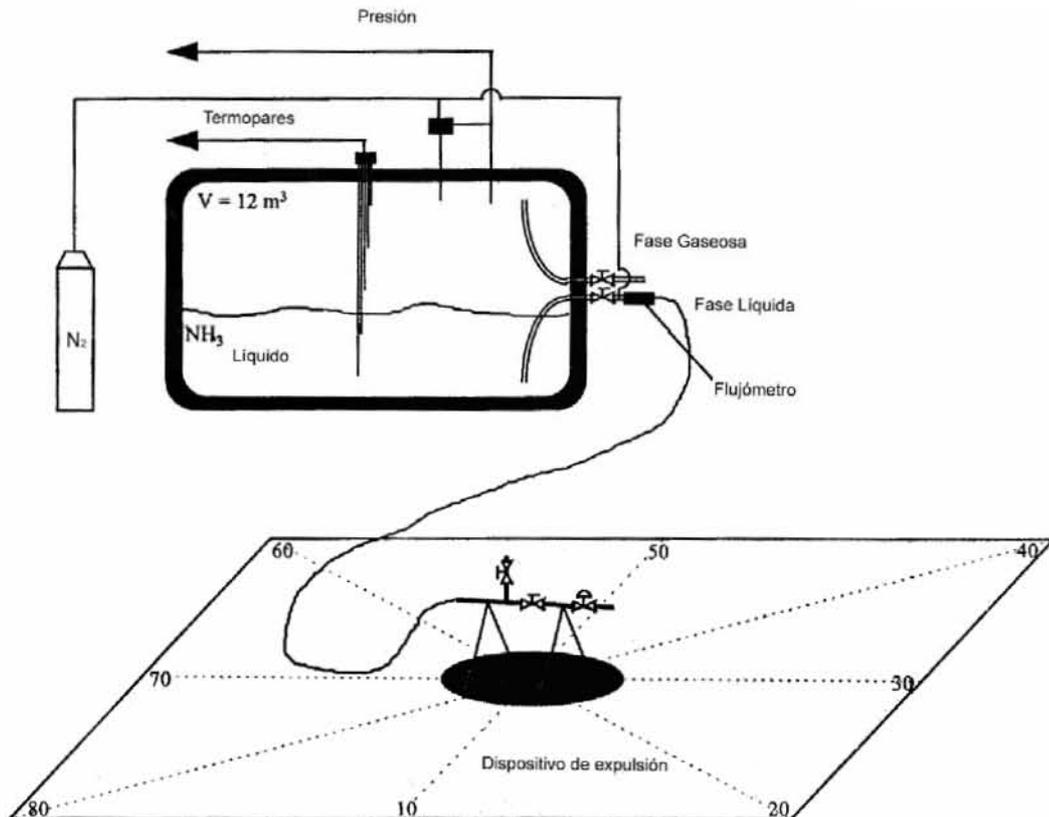


Figura 6: Representación de las instalaciones del INERIS.

Las condiciones meteorológicas influyen en gran medida en la dispersión del amoníaco, por lo que el registro de dichas condiciones cobra gran importancia. Para conocer las condiciones meteorológicas fue colocado un mástil de 10 metros a 350 metros del punto de expulsión; se colocaron en el tres anemómetros de copa a 1.5, 4 y 7 metros de altura y un anemómetro ultrasónico situado a 10 metros de altura.

Se colocó una estación meteorológica, en la cual se registraron las medidas de temperatura, humedad relativa y la radiación solar.

Las condiciones meteorológicas durante el ensayo son de gran importancia ya que la distribución de concentraciones está influenciada en gran medida por éstas. La temperatura ambiental durante el ensayo es de 12.5°C, una humedad

relativa de 82% y una velocidad del viento de 3 metros por segundo a una dirección de 290°.

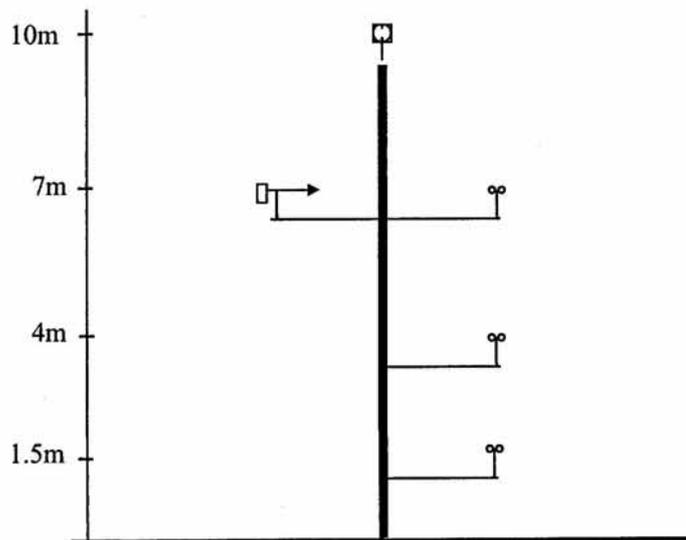


Figura 7. Mástiles para medir las condiciones meteorológicas

Los resultados obtenidos del ensayo son los siguientes:

Distancia	Concentración
[m]	[ppm]
20	65000
50	27000
100	16000
200	10000
500	1200
800	500

Tabla 1. Resultados del ensayo [2].

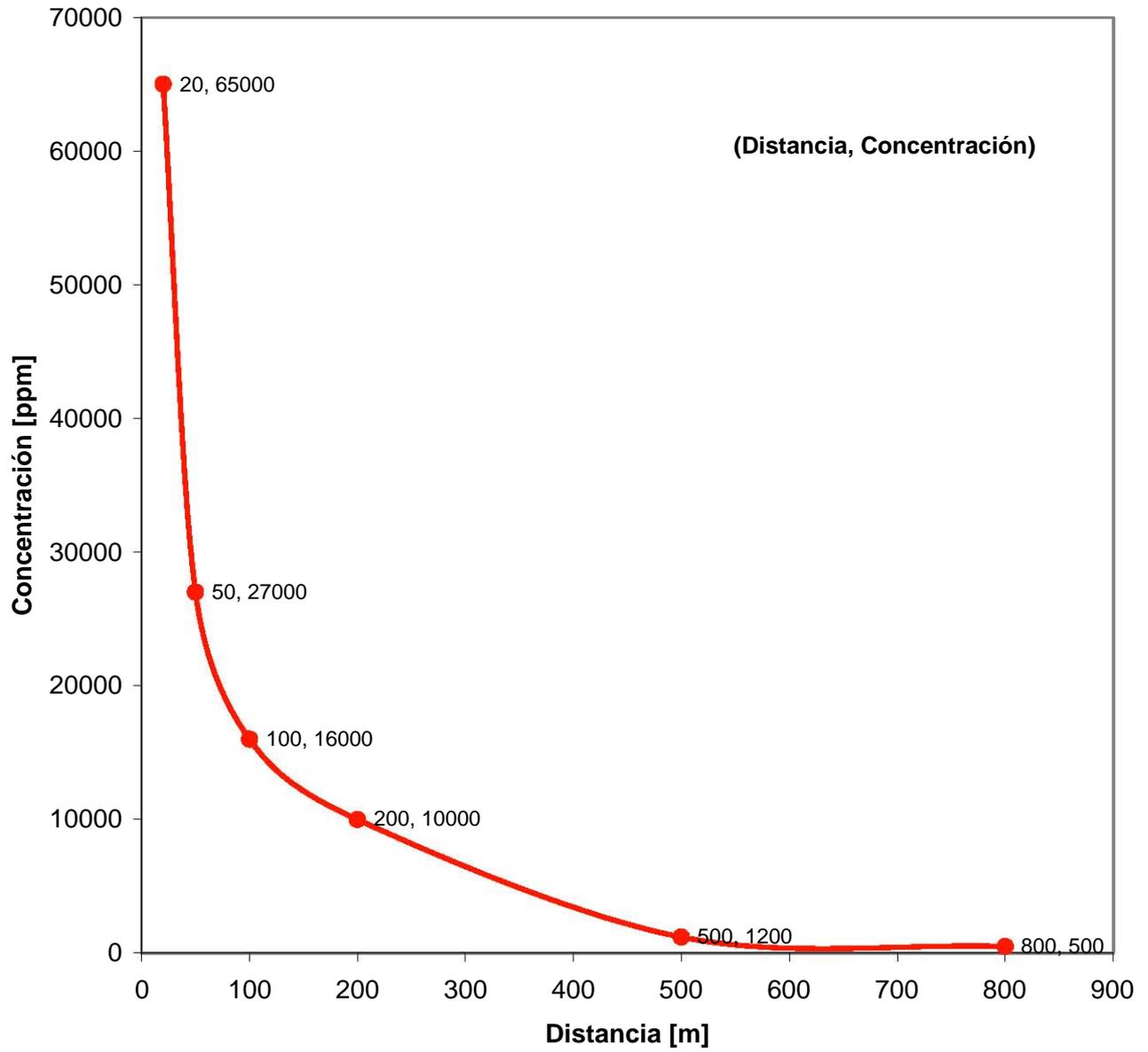


Figura 8. Gráfica de los resultados experimentales (Proporcionada por el INERIS).

# CAPÍTULO 3

## ECUACIONES DE TRANSPORTE

En este capítulo se presenta el modelo algebraico de deslizamiento, como una alternativa para resolver la simulación de un flujo de amoníaco en estado bifásico. Así también se presentan las ecuaciones de continuidad, conservación de cantidad de movimiento, conservación de las especies, conservación de la energía total, ecuación de estado y flujo difusivo, promedio de las ecuaciones, evaporación, modelo de turbulencia y propiedades de la mezcla.

### **3.1 El problema considerado**

La mezcla que se desea simular es una fuga de amoníaco en un estado bifásico (gas y líquido), como la mostrada en el capítulo precedente. Para resolver este problema existen modelos eulerianos-eulerianos o eulerianos-lagrangianos, que resuelven ecuaciones de transporte para cada fase; sin embargo, el modelo algebraico de deslizamiento proporciona una alternativa de solución.

El modelo postula que existe un medio continuo en el cual hay una fase dispersa. Estas pueden ser gotitas, burbujas o partículas sólidas, dispersas en una fase de transporte. Para este proyecto se trata de amoníaco gaseoso y pequeñas gotas de la misma sustancia. Las dos fases continúas al mezclarse y dispersarse se comportan como una sola fase, con características que pueden o no depender de las fases mezcladas; dichas características se refieren a la densidad y viscosidad de la mezcla.

Cada fase que se dispersa es representada por una ecuación de la concentración de la especie. La ecuación de transporte para cada fase dispersa permite el movimiento relativo entre ésta y la fase continua. Este transporte de la fase dispersada se conoce como deslizamiento de la fase.

Se asume que la velocidad del deslizamiento se puede calcular de las ecuaciones algebraicas que implican solamente variables locales, más bien que de las ecuaciones diferenciales parciales completas.

### 3.2 Continuidad

La ecuación de continuidad expresa la conservación de masa y se puede escribir como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (1)$$

donde  $v$  y  $\rho$  son la velocidad y la densidad instantáneas de la mezcla respectivamente.

### 3.3 Conservación de cantidad de movimiento

La conservación de cantidad de movimiento del flujo se describe por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}' + \rho \vec{f}_m \quad (2)$$

donde  $p$  es la presión,  $\vec{\tau}'$  es el tensor de esfuerzos viscosos y  $\vec{f}_m$  son las fuerzas másicas, por ejemplo la gravedad,  $\vec{g}$ .

La ley de Navier-Poisson establece que el tensor de esfuerzos viscosos es [6]:

$$\vec{\tau}' = \mu(\nabla \vec{v} + \nabla v_T) + (\mu\nu - 2/3\mu)(\nabla \cdot \vec{v})\vec{\delta} \quad (3)$$

donde  $\mu$  es la viscosidad molecular de la mezcla,  $\mu_v$  es el coeficiente de viscosidad volumétrico y  $\delta_{ij}$  es el tensor delta de Kronecker. El coeficiente de viscosidad volumétrico,  $\mu_v$ , es nulo para los gases monoatómicos. Por lo general, el coeficiente de viscosidad volumétrico se desprecia.

Si se sustituye la ecuación (3) en (2), se obtienen las ecuaciones de Navier-Stokes:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[ \mu \left( \nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \vec{\delta} \right) \right] + \rho \vec{g} \quad (4)$$

### 3.4 Conservación de las especies

En una mezcla de  $N$  especies, la fracción másica de una especie química  $\alpha$  es:

$$Y_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_T} \quad (5)$$

donde  $m_\alpha$  es la masa de la especie y  $m_T$  es la masa total de la mezcla (contenida en el mismo volumen). De acuerdo con la definición (5), la suma de todas las fracciones másicas de las especies es uno.  $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1$ .

La conservación de la especie  $\alpha$  se expresa, en términos de la fracción másica por la ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_\alpha) = -\nabla \cdot \vec{J}_\alpha + S_\alpha \quad \alpha = 1, 2, \dots, N \quad (6)$$

donde  $\bar{J}_\alpha$  es el flujo difusivo y  $S_\alpha$  es la tasa de formación neta de la especie  $\alpha$ . Para satisfacer la ecuación de continuidad (1), se cumple que  $\sum_{\alpha=1}^N S_\alpha = 0$  y  $\sum_{\alpha=1}^N \bar{J}_\alpha = 0$ . El flujo difusivo de la especie  $\alpha$ ,  $\bar{J}_\alpha$  se trata más adelante.

En este caso  $S_\alpha = 0$  puesto que se está considerando que la sustancia no reacciona.

### 3.5 Conservación de la energía total

La energía total de la mezcla es la suma de las energías interna, cinética y potencial:

$$e = u + \frac{1}{2}|\bar{v}|^2 + U \quad (7)$$

donde  $e$ ,  $u$  y  $U$  son respectivamente la energía específica total, interna y potencial, y  $\bar{g} = -\nabla U$ .

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( u + \frac{1}{2}|\bar{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[ \rho \bar{v} \left( u + \frac{1}{2}|\bar{v}|^2 + U \right) \right] = \nabla \cdot (\bar{\tau}' \cdot \bar{v}) - \nabla \cdot (p\bar{v}) - \nabla \cdot \bar{J}_e + \dot{Q}_r \quad (8)$$

donde  $\bar{J}_e$  es el flujo difusivo de calor y  $\dot{Q}_r$  es el intercambio de calor por radiación. En la ecuación (8), los dos primeros términos del lado derecho representan el trabajo de las fuerzas viscosas y de presión.

La entalpía de la mezcla se define como:

$$h = u + \frac{p}{\rho} \quad (9)$$

En términos de la entalpía de la mezcla, la ecuación de la energía total es:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( h + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[ \rho \vec{v} \left( h + \frac{1}{2} |\vec{v}|^2 + U \right) \right] = \frac{Dp}{Dt} + \nabla \cdot (\vec{\tau}' \cdot \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_h + \dot{Q}_r \quad (10)$$

donde  $D/Dt = \partial/\partial t + \vec{v} \cdot \nabla$ , es la derivada sustancial, y  $\nabla \cdot (\vec{\tau}' \cdot \vec{v})$  es la disipación viscosa,  $\Phi_v$ .

En flujos de baja velocidad, el número de Mach ( $Ma = \bar{v}_o / \sqrt{\gamma R_c T_o}$ , donde  $\gamma$  es la relación entre las capacidades térmicas a presión y a volumen constante) es pequeño,  $Ma \ll 1$ , y por lo tanto, la energía cinética comparada con la entalpía es despreciable.

En el presente trabajo no se estudia la zona cercana a la boquilla, donde  $M$  puede ser grande. Aquí el flujo se comienza a estudiar cuando se ha expandido y su velocidad es relativamente baja, pero el número de Froude es grande,  $Fr = \bar{v}_o^2 / \bar{g} l_o \gg 1$  por lo tanto, las fuerzas de inercia son mucho mayores que las gravitatorias.

El término  $Dp/Dt$  es importante si se tienen en el sistema de gradientes de presión extrema, como ondas de choque o detonaciones, que no es el caso a analizar en esta Tesis.

El número de Eckert,  $Ec = \bar{v}_o^2 / C_p T_o$  es un indicador de la contribución de la disipación de la energía cinética al nivel total de la entalpía. Cuando, como es el caso de los fluidos estudiados en esta Tesis,  $Ec \ll 1$ , el término  $\Phi_v$  se puede despreciar.

El término  $\vec{J}_h$  se presenta más adelante.

El intercambio de energía por radiación,  $\dot{Q}_r$ , puede ser importante en flujos con combustión cuando las temperaturas son altas. Inicialmente no se considera en este

trabajo; más adelante, el efecto de la radiación en los flujos estudiados se evaluará con el modelo de pérdidas de calor por radiación.

### 3.6 Ecuación de estado y flujo difusivo

Las ecuaciones anteriores deben ser suplementadas con ecuaciones de estado que relacionen la presión, la densidad y la temperatura, y por expresiones para los flujos difusivos.

En términos de la densidad de las especies constitutivas, la densidad de la mezcla se calcula como:

$$\rho = \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{\rho_{\alpha}}} \quad (11)$$

Si se supone una mezcla de gases ideales, en el caso de aire-amoniaco gaseoso:

$$\rho = \frac{P}{RT \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{W_{\alpha}}} \quad (12)$$

La temperatura se calcula a partir de la definición de la entalpía de la mezcla:

$$h = \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} h_{\alpha} \quad (13)$$

donde  $h_{\alpha}$  es la entalpía de cada especie de la mezcla. La entalpía de la especie  $\alpha$  es la suma de las entalpías térmica y química:

$$h_{\alpha} = \int_{T_0}^T C_{p,\alpha} T' dT' + \Delta h_{f,\alpha} \quad (14)$$

donde  $C_{p,\alpha}$  es el calor específico a presión constante de la especie,  $T_0$  es la temperatura de referencia y  $\Delta h_{f,\alpha}$  es la entalpía de formación de la especie  $\alpha$ ,

definido como el calor liberado cuando un kilomol de sustancia es formado a partir de sus elementos en el estado estándar.

Si se aplican las suposiciones anteriores y se sustituyen las expresiones de flujos difusivos, las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento, especies químicas y energía se pueden escribir como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}) = 0 \quad (15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{v}) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[ \mu \left( \nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \bar{v}) \bar{\delta} \right) \right] + \rho \bar{g} \quad (16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} Y_\alpha) = \nabla \cdot \Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha \quad (17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \bar{v} h) = -\nabla \cdot \bar{J}_h + Q_R \quad (18)$$

Cuando  $C_p$  puede suponerse constante, la expresión (18) se puede escribir como:

$$\bar{J}_h = -\frac{k}{C_p} \nabla h \quad (19)$$

El número de Prandtl,  $Pr$ , Se define como:

$$Pr = \mu \frac{C_p}{k} \quad (20)$$

En términos del número de Prandtl, la expresión (22) se puede escribir como:

$$\vec{J}_h = -\Gamma_h \nabla_h \quad \Gamma_h = \frac{\mu}{Pr} \quad (21)$$

### 3.7 Promedio de las ecuaciones

El flujo en los sistemas analizados en este estudio, como en la mayoría parte de los problemas de interés práctico, es el carácter turbulento del flujo. Una de las características de los flujos turbulentos es la variación aleatoria e irregular tanto en el espacio como en el tiempo de las propiedades del fluido.

El promedio de las ecuaciones instantáneas de conservación es una de las alternativas para la simulación de flujos turbulentos. Con este método se promedian todas las fluctuaciones de las escalas temporales y se resuelven ecuaciones de transporte para los valores medios de las propiedades del fluido. Estas ecuaciones no son cerradas, por lo cual se requieren modelos que replacen los términos no cerrados.

En flujos con densidad variable se pueden usar dos tipos de promedio. Uno es el promedio de Reynolds, el cual toma a la densidad como constante, y el otro es el promedio de Favre [7], que en este caso, se ocupa de la densidad variable.

Con fines de ilustración, se presentará con el símbolo  $\Phi$  cualquier propiedad transportada, tales como la fracción másica de la especie  $Y_\alpha$ , la entalpía  $h$  y las componentes de velocidad,  $\vec{v}$ . Los valores instantáneos de estas propiedades son escritos en términos de un promedio y una fluctuación turbulenta:

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (22)$$

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad (23)$$

Los dos promedios  $\bar{\Phi}$  y  $\tilde{\Phi}$  están definidos como:

$$\bar{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \Phi^{(i)} \quad \text{Promedio muestral de Reynolds} \quad (24)$$

$$\tilde{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \rho^{(i)} \Phi^{(i)} \quad \text{Promedio muestral de Favre} \quad (25)$$

En donde  $\Phi^{(i)}$  es la muestra  $i$  del conjunto de realizaciones  $n_e$  de un experimento.

De las definiciones anteriores:

$$\overline{\rho\Phi''} = 0, \quad \overline{\Phi''} \neq 0 \quad (26)$$

Con la definición de los dos promedios se obtiene:

$$\bar{\Phi} = \tilde{\Phi} + \overline{\Phi''} \quad (27)$$

$$\overline{\Phi''} = -\frac{\overline{\rho'\Phi''}}{\bar{\rho}} \quad (28)$$

$$\overline{\rho'\Phi''} = \overline{\rho'\Phi'} \quad (29)$$

$$\overline{u_i\Phi'} = u_i\Phi'' + \frac{\overline{\rho'u_i\Phi''}}{\bar{\rho}} + \overline{u_i\Phi''} \quad (30)$$

Uno de los motivos para aplicar el promedio de Favre en las ecuaciones instantáneas de transporte, es que cuando se aplica dicho promedio, genera ecuaciones muy sencillas que no incluyen correcciones con fluctuaciones de la densidad en las ecuaciones resultantes.

Si se aplica el promedio de Favre a las ecuaciones instantáneas de continuidad, cantidad de movimiento y energía, se obtiene:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}) = 0 \quad (31)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{v}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{v}) = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot \left[ \mu \left( \nabla \tilde{v} + (\nabla \tilde{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{v}) \bar{\delta} \right) \right] - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}' \tilde{v}') + \rho \bar{g} \quad (32)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} Y_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} Y_\alpha) = \nabla \cdot \Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}' Y_\alpha) + S_\alpha \quad (33)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{h}) = -\nabla \cdot \bar{J}_h - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}' h'') \quad (34)$$

Si el promedio de Favre se aplica en la ecuación homogénea se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{\phi}_z) = -\nabla \cdot (\Gamma \nabla \tilde{\phi}_z) - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}' \tilde{\phi}_z) \quad (35)$$

Las ecuaciones anteriores tienen una forma idéntica a las correspondientes ecuaciones instantáneas, con un término adicional ( $u_i \Phi''$ ), que involucra las fluctuaciones de la velocidad y el escalar  $\Phi$ , y que representa físicamente el transporte convectivo de  $\Phi$  por movimientos turbulentos. En flujos turbulentos, el término (I) de las ecuaciones anteriores es generalmente despreciable ante (II). Por lo tanto, las ecuaciones (37),(38),(39), (40) y (41) se escriben como:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}) = 0 \quad (36)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{v}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{v}) = -\nabla \bar{p} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}' \tilde{v}') + \rho \bar{g} \quad (37)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} Y_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} Y_\alpha) = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}' Y_\alpha) + S_\alpha \quad (38)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{h}) = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}' h'') \quad (39)$$

$$-\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{v} \phi_z) = -\nabla \cdot (\rho \bar{v}'' \tilde{\phi}_z) \quad (40)$$

Si el flujo es de baja velocidad ( $Ma \ll 1$ ) generalmente se supone que las fluctuaciones de la presión son despreciables [8]. Por lo tanto, los valores medios de la densidad se pueden expresar como función de una presión de referencia  $p_0$ :

$$\bar{p} = p_0 \left( R_c T \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1} \quad (41)$$

Donde  $\tilde{\phi}_\alpha$  representa la fracción másica de las especies; tanto  $\alpha = 1, \dots, N+1$ .

Para poder hacer el cierre de las ecuaciones (42), (43), (44), y (45) hace falta, también conocer el valor medio de la densidad  $\bar{\rho}$ . Esta cantidad se puede escribir como:

$$\bar{\rho} = \rho(\bar{T}, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_N) \quad (42)$$

### 3.8 Evaporación

Se considera que las gotas de amoníaco cambian de fase debido a que el aire tiene la capacidad de absorber cierta cantidad de amoníaco líquido por lo que la transferencia de masa por cada gota esta dada por:

$$E_v = K_m A_s (C_{sat} - C_g) \rho \quad (43)$$

donde  $k_m$  es un coeficiente de transferencia de masa y  $A_s$  es el área superficial.  $C_g$  es la concentración de las especies de gas.  $\rho$  es la densidad.

Para una partícula esférica en un fluido a bajo número de Reynolds, el número de Sherwood (Sh) es aproximadamente 2. El coeficiente de transferencia de masa está dado por:

$$K_m = Sh \frac{D}{D_p} \quad (44)$$

donde D es el coeficiente de difusión de las especies en la mezcla y  $D_p$  es el diámetro de la partícula.

Es posible determinar el número de partículas mediante la siguiente ecuación [10]:

$$n_p = \frac{6r_2}{\pi D_p^3} \quad (45)$$

### **3.9 Modelo de Turbulencia [9]**

El término  $(\rho \tilde{v} \tilde{v})$  es llamado el esfuerzo de Reynolds, por lo que se tendrá que modelar a partir de la aproximación de Boussinesque. Éste se modela como un término disipativo en función de una viscosidad turbulenta. La viscosidad total está dada por:

$$\mu_{total} = \mu + \mu_{turbulenta} \quad (46)$$

Para encontrar la viscosidad se requiere de un modelo. En este caso se utilizó el modelo  $k-\varepsilon$ , ya que resuelve las ecuaciones de transporte de la energía cinética turbulenta  $k$  y la disipación  $\varepsilon$ .

$$\text{Energía} \quad \frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = (P_k - \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial j} \left( \frac{v_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) \quad (47)$$

$$\text{Disipación} \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial j} \left( \frac{v_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \quad (48)$$

donde

$$P_k = v_T \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left( k + v_T \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (49)$$

las constantes tienen los siguientes valores:  $C_\mu=0.09$ ,  $\sigma_k=1.0$ ,  $\sigma_\varepsilon=1.314$ ,  $C_{\varepsilon 1}=1.4$

$C_{\varepsilon 2}=1.92$

las variables  $k$  y  $\varepsilon$  son para la fase gaseosa y son calculadas usando los gradientes de velocidad de la fase gaseosa.

Los términos turbulentos de la ecuación de energía y de las especies se obtienen a partir de considerar un  $Pr_t$  y  $Sc_t$  constantes e iguales a 0.7 y 1.0 respectivamente.

### 3.10 Propiedades de la mezcla [10]

Para calcular las propiedades de la mezcla, se utiliza la siguiente ecuación general:

$$\phi_m = (1 - \Sigma(P T_i)) * \phi_c + \Sigma(P T_i) * \phi_i \quad (50)$$

$\phi_m$  = Propiedad de la mezcla

$\phi_c$  = Propiedad de la fase continúa.

$\phi_i$  = Propiedad de la fase dispersa.

# **CAPÍTULO 4**

## ***MÉTODO DE SOLUCIÓN***

El objetivo de este capítulo es presentar el método de solución de las ecuaciones presentadas en el capítulo anterior.

Este capítulo comienza con la descripción del método de volúmenes finitos, que se utiliza para resolver las ecuaciones que caracterizan la aerodinámica del flujo medio.

#### 4.1 Método de volúmenes finitos

Las ecuaciones medias de continuidad, cantidad de movimiento y del modelo de turbulencia introducidas en el capítulo anterior, se pueden representar mediante una ecuación general, donde la variable dependiente está representada por  $\tilde{\phi}$  :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla_\phi) = \bar{S}_\phi \quad (1)$$

donde  $\Gamma_\phi$  es el coeficiente de difusión y  $\bar{S}_\phi$  es el término fuente. Los términos del lado derecho de la ecuación (1) son el término transitorio, convectivo y de difusión respectivamente. Los términos  $\Gamma_\phi$  y  $\bar{S}_\phi$  están especificados para cada variable  $\tilde{\phi}$  .

(Para la ecuación de continuidad,  $\tilde{\phi} = 1$ .)

La ecuación (1) se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con este método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control (figura 1), asociando a cada uno de ellos un punto nodal. De forma similar se discretiza el tiempo en intervalos temporales. La ecuación diferencial se integra en cada volumen de control y en cada intervalo temporal, y el resultado es una ecuación discretizada que relaciona los valores de  $\tilde{\phi}$  para un determinado grupo de puntos nodales. Esta ecuación algebraica expresa el principio de conservación de  $\tilde{\phi}$  en el volumen finito, de la misma manera que la ecuación diferencial lo expresa para un volumen infinitesimal. La ecuación algebraica para un nodo P puede expresarse en forma general como:

$$a_p \tilde{\phi}_p = \sum_{i,I=E,W,N,S,H,L} a_i \tilde{\phi}_i + a_T \tilde{\phi}_T + B \quad (2)$$

donde el subíndice  $I$  representa las celdas vecinas,  $i$  la cara entre las celdas  $P$  e  $I$ ,  $T$  el valor correspondiente en el intervalo temporal anterior, y  $B$  el término fuente. La deducción detallada de la ecuación (2) puede consultarse en numerosos textos de fluidodinámica computacional, por ejemplo en Patankar [11], Ferziger-Peric [12].

En el caso de una malla cartesiana, decalada (“staggered”) y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), un volumen de control bidimensional (por sencillez) es como el que se muestra en la figura 2. (el espesor de la celda en dirección  $z$  puede considerarse la unidad.) En una malla decalada, las variaciones se encuentran definidas en el centro de la celda, mientras que las componentes de velocidad correspondientes a la celda se encuentran desplazadas en cada dirección a las caras de la celda.

En la figura 2 se muestra la notación de la celda y de sus vecinas. Dada una celda  $P$ , sus vecinas se notarán según las iniciales de los puntos cardinales (en ingles) en las direcciones  $x$  e  $y$  y como Low y High en la dirección  $z$ . Las caras de la celda se notan con la misma nomenclatura, pero con letras minúsculas.

El tiempo también se discretiza. Las celdas en la dirección temporal se llaman intervalos temporales. La celda  $P$  en el paso temporal se nota como  $T$ .

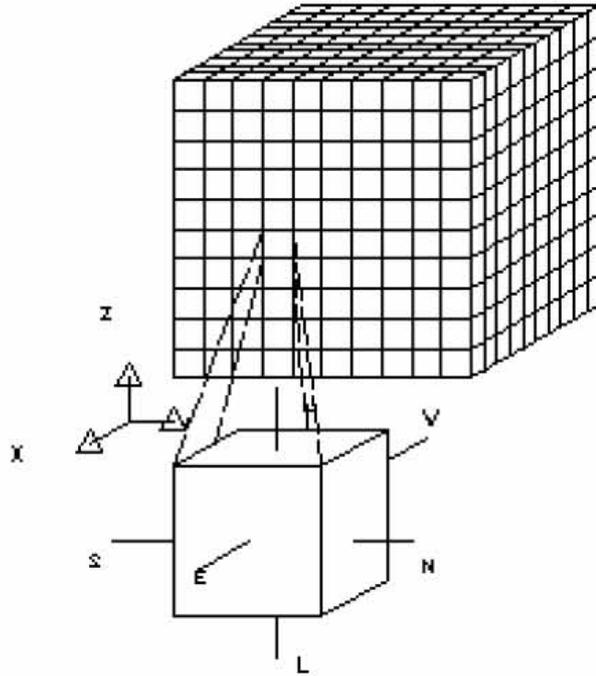


Figura 1: Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

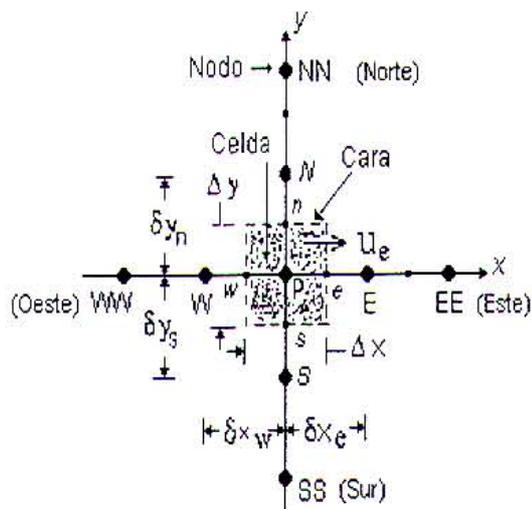


Figura 2: Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional

A continuación, se presentan los términos de la ecuación discretizada (2).

Definiendo los símbolos  $F$ ,  $D$ , y  $Pe$  como:

$$F = \bar{\rho} \tilde{v}_i, \quad D = \frac{\Gamma}{\delta \tilde{i}}, \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (3)$$

donde  $\tilde{v}_i$  es la velocidad en la cara  $i$ ,  $\delta \tilde{i}$  es la distancia entre los nodos que incluyen la cara  $i$  y  $Pe$  es de número de Peclet, que es una relación entre la convección y la difusión,  $\tilde{v}$  es la velocidad en la cara  $i$  y  $x_i$ . (Las expresiones  $F$  y  $D$  representan el efecto de los términos convectivo y difusivo de la ecuación de transporte (1) respectivamente.)

Los coeficientes  $a_i$  de la ecuación (2) son:

$$a_i = D_i f(|Pe_i|) + \max(-F_i, 0) \quad (4)$$

Los valores  $F$  y  $D$  en la cara de la celda de la ecuación (4) son:

$$F_i = (\bar{\rho} \tilde{v})_i \Delta_i, \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{(\delta \tilde{i})}, \quad i=n, s, e, w \quad (5)$$

donde  $\Delta_i$  es la longitud de la cara  $i$ .

Para determinar  $F_i$  se necesita conocer  $\bar{\rho}$  y  $\tilde{u}_i$  en la cara de la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (1) requiere también el conocimiento de la variables escalar,  $\tilde{\phi}$ , en la cara de la celda. La velocidad  $\tilde{v}_i$  está calculada en la cara de la malla decalada; pero  $\bar{\rho}$  y  $\tilde{\phi}$  están calculados en el nodo

y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes  $a_i$  de la ecuación discretizada (2).

La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante en precisión y convergencia de la solución. El cálculo de  $\tilde{\rho}$  y  $\tilde{\phi}_i$  da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función  $f(|Pe|)$  de la ecuación (4) depende del esquema de interpolación. Por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas,  $f(|Pe|)=1$ , y para el sistema híbrido:

$$f(|Pe|) = \max(0, 1 - 0.5|Pe|) \quad (6)$$

En el apéndice D se presentan algunos de los esquemas de discretización lineales y no lineales de alto orden, que se utilizan en esta Tesis en la discretización del término convectivo de las ecuaciones de cantidad de movimiento y del modelo de turbulencia.

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\bar{\rho}_T \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (7)$$

Para el cálculo del término  $D_i$  (5) se necesita obtener el coeficiente de difusión,  $\Gamma$ , en la cara de la celda. EL coeficiente  $\Gamma$  no es necesariamente una constante, sino probablemente función de valores variables que se conocen en los nodos (por ejemplo la temperatura), y por tanto es necesario interpolarlo a la cara. Esta

interpolación puede ser aritmética o armónica. Para la cara e, por ejemplo, estas interpolaciones son:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x(\Gamma_P + \Gamma_E)}{2\delta x_e} \qquad \Gamma_e = \frac{2\delta x_e}{\Delta x\left(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E}\right)} \qquad (8)$$

El término fuente de la ecuación general (1),  $\bar{S}_\phi$ , se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v}\tilde{\phi}_p \qquad (9)$$

donde el término  $\bar{S}_{\phi,v}$  se elige de acuerdo a la relación existente entre  $\bar{S}_\phi$  y  $\tilde{\phi}$ , en caso de depender el primero del segundo. El objetivo de la linealización del término fuente es mejorar la convergencia de la solución.

Con esta suposición, los términos  $B$  y  $a_p$  de la ecuación (2) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c} \Delta x \Delta y + a_T \tilde{\phi}_T \qquad (10)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v} \Delta x \Delta y \qquad (11)$$

La ecuación (2) se aplica en cada celda del dominio, para cada  $\bar{\phi}$  y para cada paso temporal  $\Delta t$ , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales (los coeficientes  $a$  pueden depender, directa o indirectamente de  $\tilde{\phi}$ , por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal).

Para resolver este sistema de ecuaciones se puede utilizar cualquier método de resolución de ecuaciones lineales.

En el cálculo de las velocidades, a partir de las ecuaciones de cantidad de movimiento, se tiene el inconveniente de que la presión, cuyo gradiente aparece como término fuente en estas ecuaciones de cantidad de movimiento, no tiene una ecuación propia para calcularla. Una solución ampliamente utilizada es transformar la ecuación de continuidad en una ecuación para la presión.

Entre los algoritmos iterativos que se basan en este procedimiento están los de la familia SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure- Linked Equations) [13]. El algoritmo utilizado en esta Tesis para resolver el problema de acoplamiento velocidad-presión pertenece a esta familia.

El proceso de solución de este sistema de ecuaciones es iterativo y durante éste, las ecuaciones del sistema, en general, no se cumplen; el desbalance entre la parte izquierda y derecha de la ecuación se denomina residuo. La convergencia del proceso iterativo se da cuando los residuos disminuyen.

Para procurar o acelerar esta convergencia se utiliza un método de relajación de algunas de las variables dependientes y propiedades. Se emplean dos tipos de relajación: la inercial y la lineal. La relajación inercial se emplea para las velocidades y los parámetros de turbulencia, y aumenta el dominio diagonal de la matriz de coeficientes al agregar a la ecuación de cualquier variable  $\phi$  el término fuente

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\bar{\rho}V_P}{\Delta t_f} (\tilde{\phi}_P^{(n-1)} - \tilde{\phi}_P^{(n)}) \quad (12)$$

Donde  $V_P$  es el volumen de la celda  $P$ ,  $\Delta t_f$  es el intervalo de tiempo falso y el superíndice  $n$  se refiere al número de iteración.

Para la presión y la densidad se emplea la relajación lineal dada por:

$$\tilde{\phi}_P^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_P^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_P^{(n-1)} \quad (13)$$

donde  $\alpha$  es el factor de relajación, el superíndice *sol* se refiere al valor de la propiedad proporcionado por el “solver” en la iteración actual. El factor de relajación,  $\alpha$ , normalmente toma valores entre 0 y 1.

El criterio de convergencia utilizado para detener el proceso iterativo para un paso temporal dado y pasar al siguiente es tal que, para cada variable, la suma de los valores absolutos de los residuos en todo el dominio sea menor que un determinado porcentaje de un valor de referencia.

En este proyecto, se usó el código de fluido-dinámica computacional PHOENICS para resolver las ecuaciones que describen aerodinámica del flujo: continuidad, cantidad de movimiento y turbulencia.

# **CAPÍTULO 5**

## ***DETALLES NUMÉRICOS***

El diseño del dominio utilizado en los cálculos numéricos, depende de las condiciones de frontera, y de éste la eficiencia de la simulación. Es decir que si no se tiene un buen diseño, los resultados pueden estar erróneos. Cabe mencionar, que también algunos de los datos se han obtenido del ensayo experimental

## 5.1 Condiciones de frontera.

Para la simulación numérica, es necesario establecer las condiciones de frontera en el dominio como son la densidad, temperatura, velocidad, presión, etc. Algunas de estas condiciones se obtienen resolviendo las ecuaciones que se enuncian en el siguiente apartado.

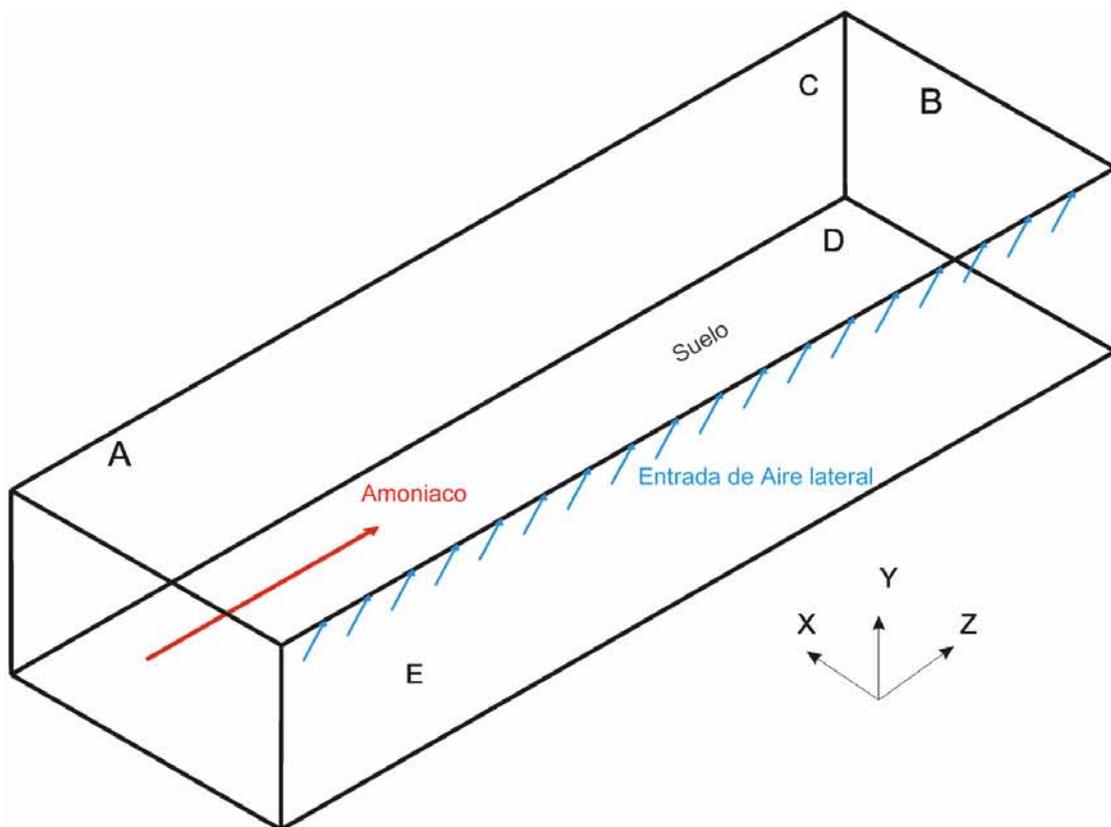


Figura 1. Condiciones de frontera, con entrada de aire lateral.

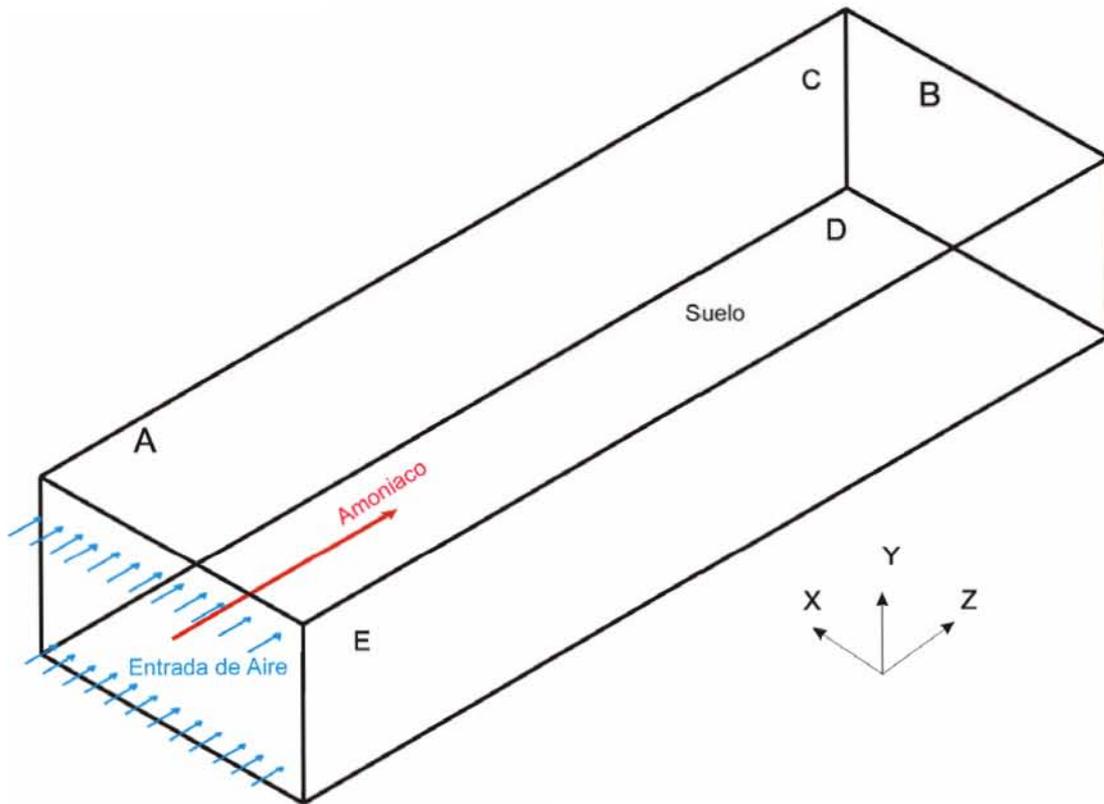


Figura 2. Condiciones de frontera, con entrada de aire paralelo a la entrada de amoníaco.

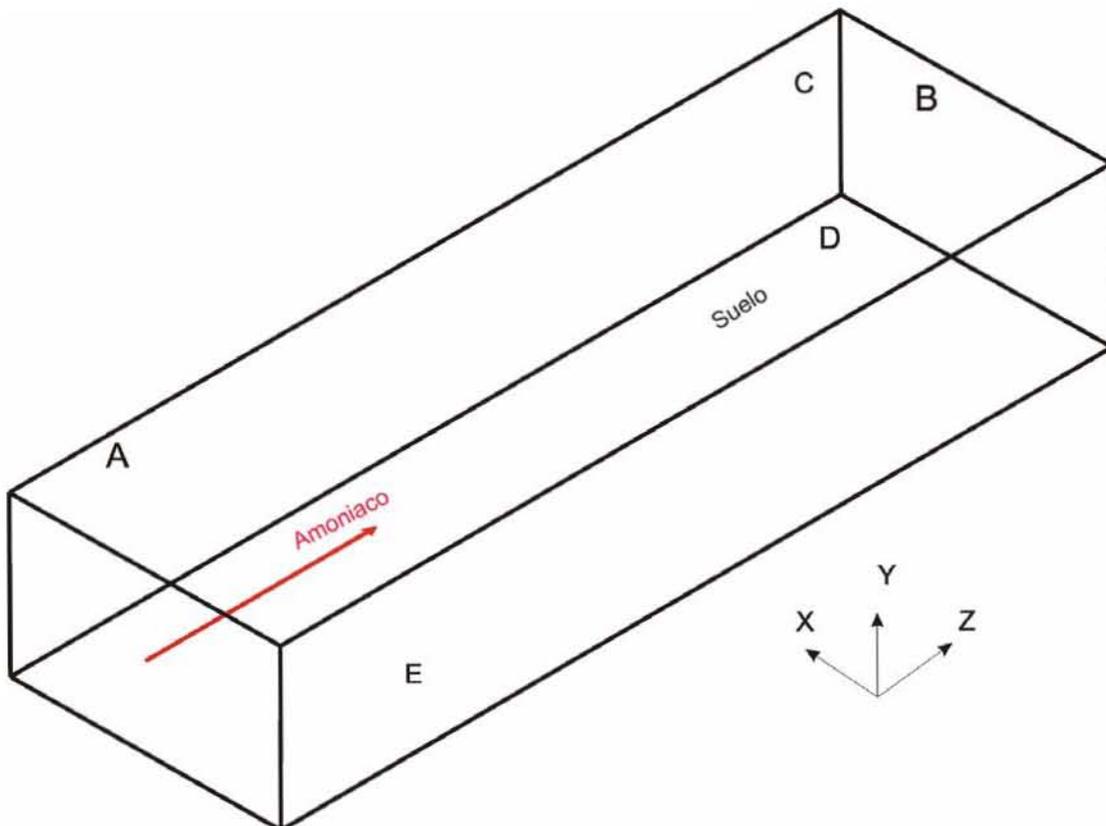


Figura 3. Condiciones de frontera, sin entradas de aire.

En las figuras 1, 2 y 3, se muestra un esquema del dominio, y de las condiciones en las que entra el viento con respecto a la entrada de amoniaco, éste entra a una velocidad de 64.03 m/s.

En la figura 1, las fronteras A, B, C, son salidas del sistema y D es el piso que se encuentra a 1m de la boquilla. También en esta imagen se observa que el aire entra con un ángulo  $\theta$ , por la frontera E. Al tener esta variación va a tener una repercusión en los resultados.

La figura 2, el aire entra paralelo al amoniaco a suna velocidad de 3 m/s. Mientras que la figura 3, ilustra el caso en que sólo se tiene entrada de amoniaco

Las condiciones atmosféricas que se tomaron en cuenta para realizar la simulación numérica son: temperatura ambiente, que se tuvo durante el experimento fue de 12.5 °C, dirección del viento de 290°, velocidad de 3 m/s y humedad relativa de 82%.

Para el amoniaco se consideró un gasto de 4.2 Kg/s y el diámetro de la fuga es de 2 pulgadas, es decir, 5.08 cm, a un metro de altura tomando como referencia el suelo.

## **5.2 Propiedades en la descarga de amoniaco [2]**

Las propiedades en la descarga de amoniaco se pueden obtener a partir de las condiciones en las que se encuentra el contenedor ( $P_{int}, T_{int}$ ).

- Las condiciones de presión y temperatura en la salida del contenedor.
- El gasto másico.
- La proporción gas-líquido ( calidad ) del fluido en la salida del contenedor.

El modelo propuesto es expresado en las ecuaciones siguientes:

- ecuación de Euler:

-

$$\frac{U_b^2}{2} = \alpha_p^2 \left( \int_{P_b}^{P_{int}} v dP \right) \quad (1)$$

- Ecuación de la presión interna en función de la temperatura.

$$P_{int} = P_{sat} = \exp\left(B - \frac{A}{T}\right) \quad (2)$$

$P_{int}$  = Presión interna

$P_{sat}$  = Presión de saturación

- ecuación de volumen específico ( $v$ )

$$v = (1 - x)v_{liq} + xv_{gas} \quad (3)$$

$v_{liq}$  = volumen específico del líquido

$v_{gas}$  = volumen específico del gas

Después de integrar la ecuación (1) queda escrita:

$$\frac{U_b^2}{2} = \alpha_p^2 \left( \frac{P_{int} - P_b}{\rho_{liq}} + cp_{liq}(T_{int} - T_b) - cp_{liq}T_b \ln\left(\frac{T_{int}}{T_b}\right) \right) \quad (4)$$

Esta expresión permite determinar la velocidad del fluido en la fuga en función de la diferencia de presiones entre el contenedor y el ambiente.

El coeficiente  $\alpha_p$  es un factor de corrección empírico que permite tomar en cuenta los efectos de la fricción.

Es necesario determinar la presión del fluido en la fuga. La existencia de un gradiente de presión entre el contenedor y la salida provoca una aceleración importante del fluido. La velocidad del fluido será limitada por la velocidad de propagación de las ondas de presión en el fluido, es decir, la velocidad del sonido.

Consideramos el caso crítico en el cual se considera que la velocidad del fluido a la salida, es igual a la velocidad del sonido en el fluido bifásico de calidad  $X_b$ . la expresión para calcular la velocidad del sonido es la siguiente:

$$U_{son} = \frac{P_b A}{\rho_b T_b \sqrt{c p_{liq} T_b \left( 1 + \left( \frac{A}{T_b} - 1 \right) \text{Ln} \left( \frac{T_{int}}{T_b} \right) \right)}} \quad (5)$$

La densidad del fluido en la salida del contenedor,  $\rho_b$ , es obtenida a partir de la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{\rho_b} = \frac{1}{\rho_{liq}} + \frac{\text{Ln} \left( \frac{T_{int}}{T_b} \right) c p_{liq} T_b^2}{A \cdot P_b} \quad (6)$$

Una vez obtenida la densidad es posible determinar la calidad que tiene el fluido a la salida con la ecuación de volumen específico:

$$X_b = \frac{\frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_{liq}}}{\frac{1}{\rho_{gas}} - \frac{1}{\rho_{liq}}} \quad (7)$$

Finalmente la determinación del gasto másico esta dada por:

$$G_b = \rho_b A_b U_b \quad (8)$$

donde  $A_b$  es el área de la abertura.

Para determinar la concentración de amoniaco en partes por millón (ppm), es necesario conocer la fracción volumétrica del amoniaco dentro de la mezcla. La fracción volumétrica total es:

$$Y_{aire} + Y_{amoniaco} = Y_{total} \quad (9)$$

donde

$$Y_{amoniaco} = \frac{c}{M_{amoniaco}} \quad Y_{aire} = \frac{c}{M_{aire}} \quad (10)$$

$Y_{amoniaco}$  = Fracción volumétrica del amoniaco.

$Y_{aire}$  = Fracción volumétrica del aire.

$Y_{total}$  = Suma de las fracciones volumétricas del amoniaco y aire.

$c$  = Fracción másica

Sustituyendo y multiplicando por  $1 \times 10^6$  queda:

$$ppm_{Amoniaco} = \left( \frac{\frac{c}{M_{Amoniaco}}}{\frac{(1-c)}{M_{Aire}} + \frac{c}{M_{Amoniaco}}} \right) \times 1 \times 10^6 \quad (11)$$

$ppm_{Amoniaco}$  = Partes por millón de amoniaco.

donde “c” es la fracción másica del amoniaco y  $M$  es la masa molecular del aire y amoniaco respectivamente.

### 5.3 Diseño del dominio

El dominio de la simulación se dividió en  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . En el plano  $x$  se discretiza en tres regiones, la primera tiene una longitud de 1.5 m y 10 celdas, en la segunda se tienen 2 celdas en 5.1 cm, y la última es de 1.5 m con 10 celdas (figura1).

En la dirección  $y$  se dividió en tres regiones, dos de ellas tienen una longitud de 1m y un número de 10 celdas cada una, una tercera región se encuentra en el centro y mide 5.1 cm con 2 celdas dentro de ésta (figura 1).

Por último en la figura 2 se ilustra el plano  $y$ - $z$ , en donde la dirección  $z$  tiene una distancia de 10m y dentro de ésta hay 100 celdas (figura 2).

Las zonas, en los cuales se ha refinado la malla, se debe a que en éstas se encuentra la salida del amoniaco y por lo tanto dichas zonas se convierten en un

punto importante para obtener información trascendental, y así poder hacer la comparación entre los resultados experimentales y numéricos.

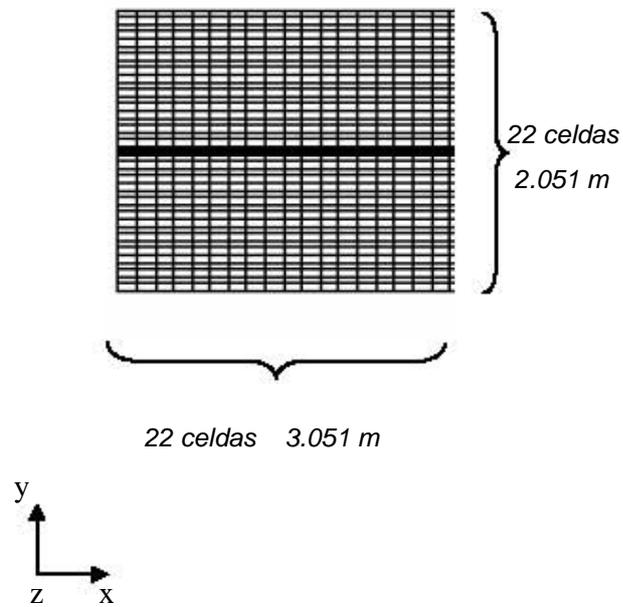


Figura 1. Plano X-Y

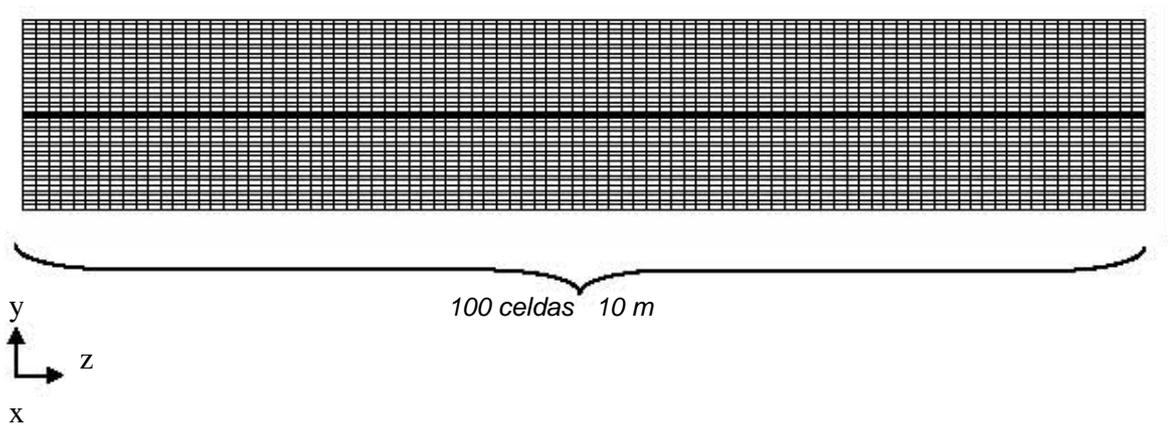


Figura 2. Plano Z-Y

# **CAPÍTULO 6**

## ***RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN NUMÉRICA***

El análisis de resultados y la comparación con el experimento realizado por el INERIS, son necesarios para validar el modelo numérico, de esta forma se comprueba la veracidad de los cálculos aquí obtenidos

## **6.1 Generalidades**

En la simulación numérica, se implementaron tres diferentes casos, como ya se mencionó en el capítulo anterior: simulación con entrada de aire lateral con respecto a la salida de amoniaco (caso 1), simulación sin entradas de aire (caso 2) y simulación con entrada de aire paralelo a la fuga de amoniaco (caso 3). Para cada uno de dichos casos, se hicieron mediciones de concentración de amoniaco líquido, gaseoso, velocidad, y concentración de amoníaco en partes por millón. Estos últimos resultados fueron comparados con los resultados experimentales que se mencionaron en el capítulo 2.

Las mediciones se realizaron a lo largo del eje de salida del amoníaco en la dirección axial y en línea recta, esto hace que los resultados numéricos estén limitados en una sola dirección y por lo tanto la variación de las variables en otras direcciones no fueron evaluadas.

## **6.2 Análisis de Resultados**

### **6.2.1 Velocidad**

En la figura 1 se muestra el campo de velocidades, para el caso 1. En esta imagen se puede observar la influencia de la entrada de aire lateral, ya que el flujo de amoniaco se desvía en dirección x, la escala de colores muestra la magnitud del vector velocidad de acuerdo a como se va disipando el flujo.

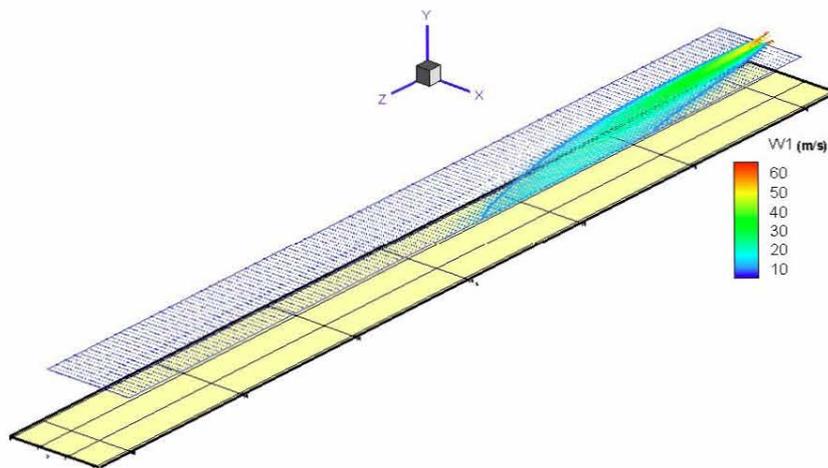


Figura 1. Campos de Velocidad Caso 1

La figura 2 ilustra el comportamiento del caso 2, en éste los vectores de velocidad se disipan a lo largo del eje axial, estos vectores son únicamente del flujo de amoniaco, ya que este caso tiene ausencia de aire.

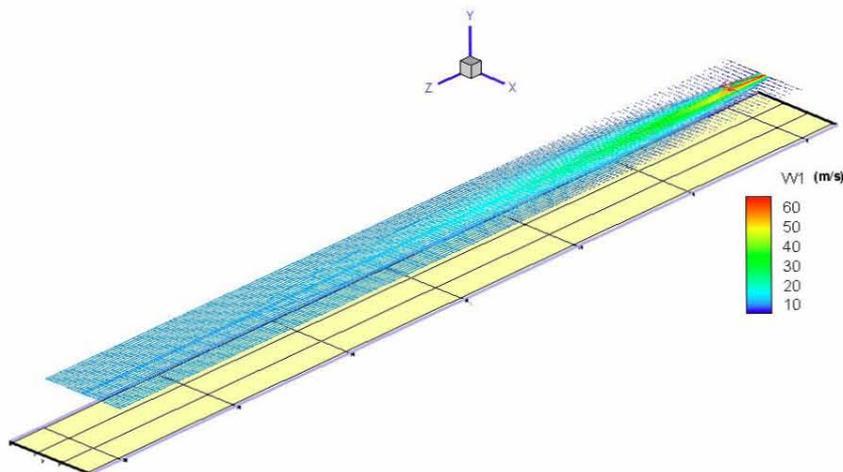


Figura 2. Campos de Velocidad para el caso 2

La figura 3 muestra los vectores de velocidad para el caso 3, la escala de colores muestra que la velocidad máxima es de 65 m/s, esto es a causa de que la

entrada de aire es paralela a la de amoniaco, por consiguiente el vector velocidad tiene una magnitud mayor, comparada con los casos anteriores.

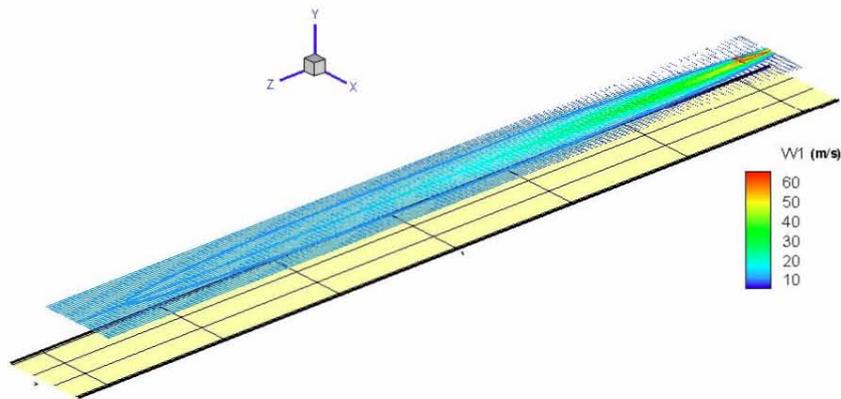


Figura 3. Campos de Velocidad caso 3

La gráfica de la figura 4, es la comparación de los resultados de los tres casos anteriores, aquí podemos analizar la variación de la velocidad sobre el eje longitudinal de salida de amoniaco  $X= 17$ ,  $Y=17$  (ver capítulo anterior). Las tres curvas tienen una caída de 64 m/s a 44 m/s en una distancia de 2 m, ya que en esta zona se realiza la expansión del fluido, después de esta distancia las curvas se separan, principalmente la del caso 1, ya que esta cae hasta 1.5 m/s manteniéndose constante hasta finalizar la simulación, en cambio las curvas del caso 2 y 3, son muy similares, solo la del caso 3 esta por arriba de la del caso 2, y esto es consecuencia de la entrada de aire que es paralela a la fuga de amoniaco la diferencia que existe en estas dos predicciones es de 3 m/s, siendo esta la velocidad de entrada del aire en el plano  $Z=1$ .

## Velocidad

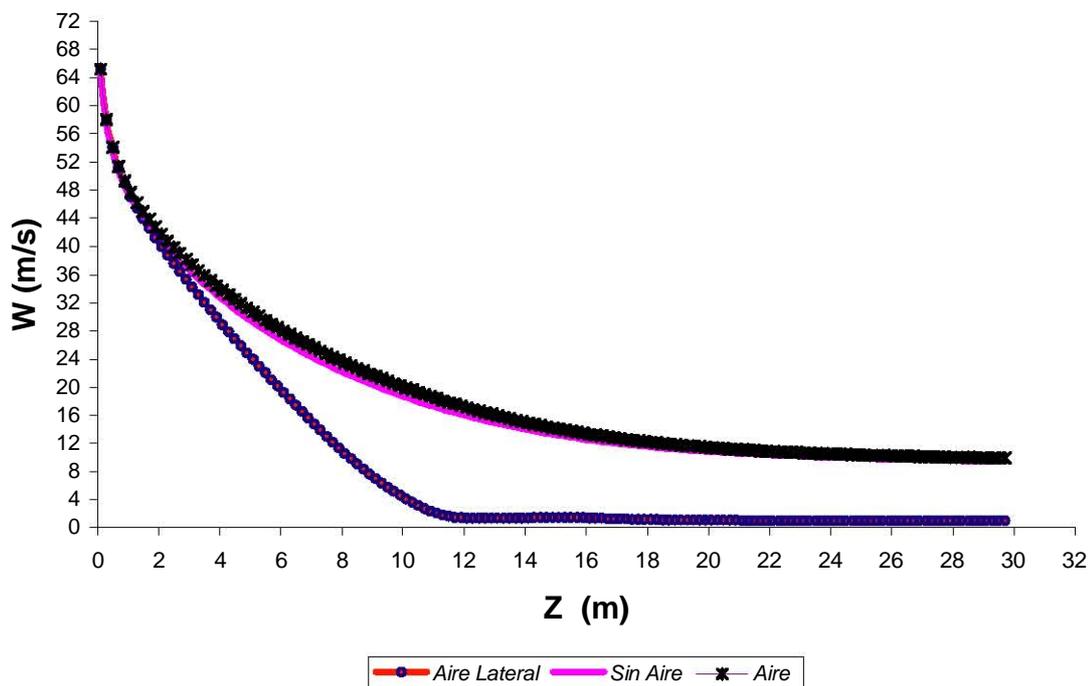


Figura 4. Grafica comparativa de la velocidad.

### 6.2.2 Densidad

La variación en la densidad es ocasionado por el tipo de fluido que se está manejando, en capítulos anteriores se hizo la mención de que se trata de un fluido bifásico y por lo tanto la densidad cambia de acuerdo a la composición de la mezcla.

Para el caso 1, la figura 5 muestra la variación de la densidad, que va cambiando conforme la mezcla también lo va haciendo, ya que al salir de la boquilla es cuando se tiene el máximo valor de densidad, esto es porque la muestra está compuesta con la mayor concentración de amoníaco líquido. Por una parte el aire lateral contribuye a la disminución de la densidad pues propicia que el amoníaco viaje mas rápido, ya que lo arrastra en dirección X, de la misma forma el valor de la densidad disminuye al evaporarse el amoníaco líquido.

En la figura 6, se ilustra la densidad para el caso 2, ésta se extiende a todo lo largo del eje axial del dominio computacional, esto es ocasionado por la ausencia de entrada de aire en el dominio, por lo que la dispersión de la mezcla sólo se debe a la cantidad de movimiento inicial del chorro de la mezcla, sin embargo, comparando este caso con el caso 3, se puede apreciar que la figura 7,

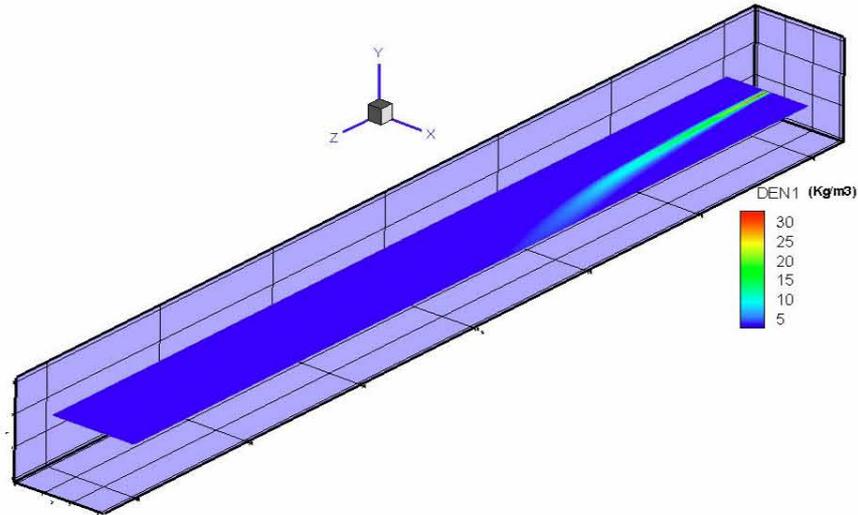


Figura 5. Densidad en el caso 1.

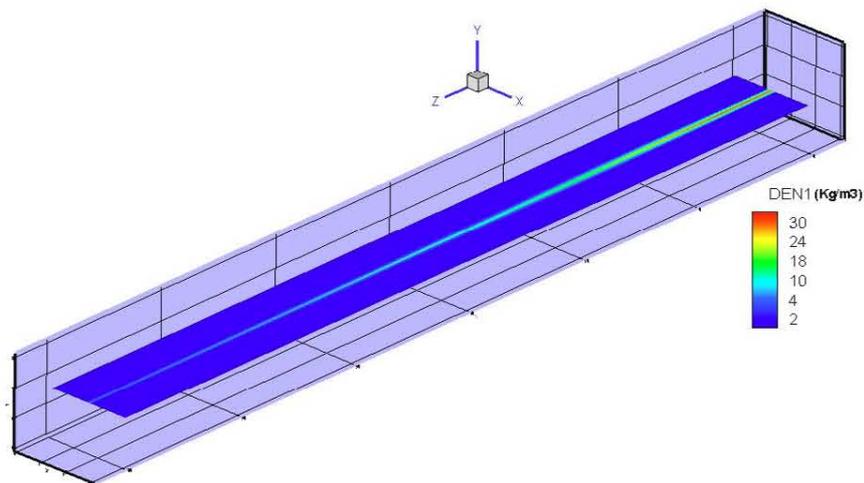


Figura 6. Densidad en el caso 2.

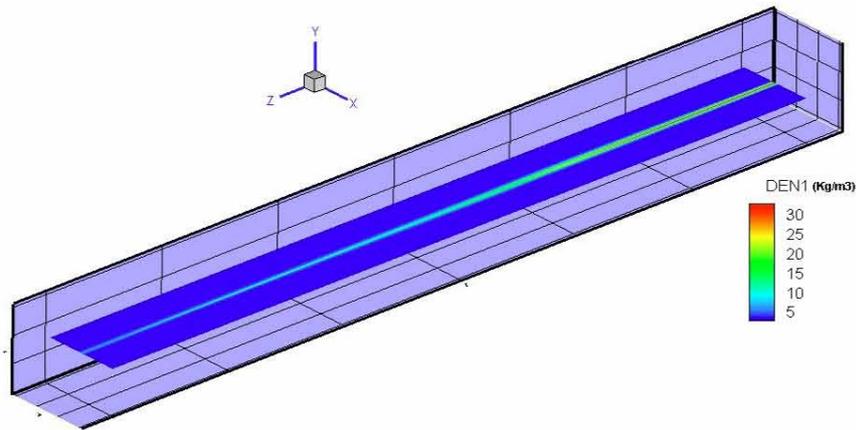


Figura 7. Densidad en el caso 3.

que ilustra el caso 3 tiene un espesor menor comparado con la figura anterior, donde la mezcla es mayormente arrastrada por el aire, además de que la cantidad total de gas que entra es mayor.

La gráfica de la figura 8, es una representación de las predicciones de la densidad para los tres casos anteriores en ella se puede ver como influye el gasto de aire en la entrada, su dirección de entrada, en la densidad de la mezcla en el eje longitudinal de salida.

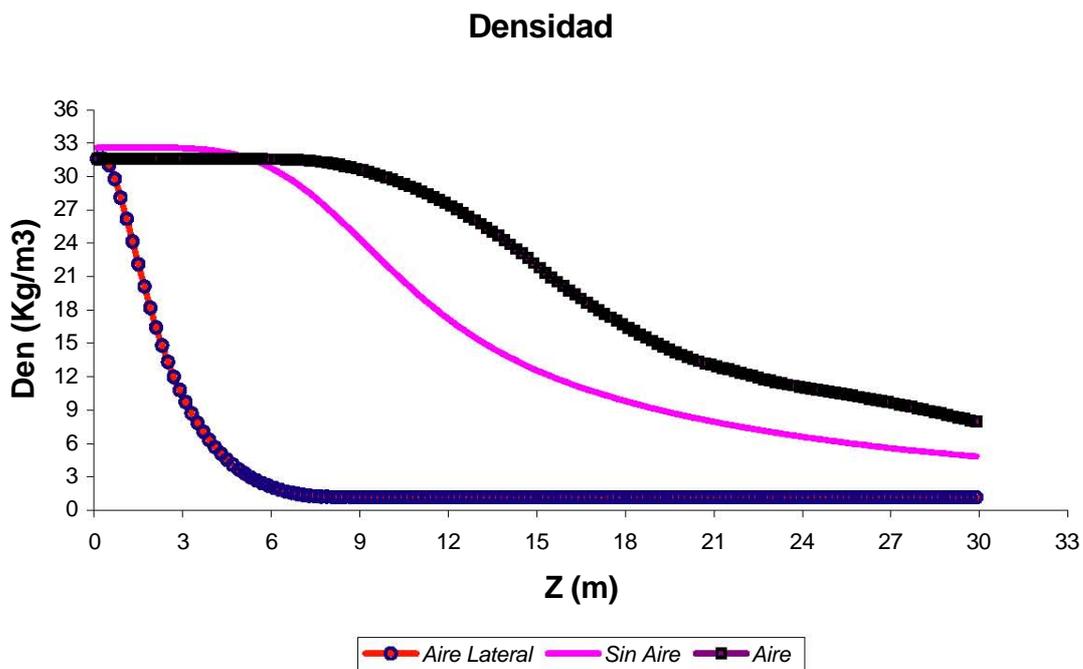


Figura 8. Densidad a lo largo del eje axial.

El aire de entrada transporta al flujo del chorro, y éste cambia de dirección, esta es la principal causa por la cual el valor de la densidad desciende drásticamente, en el eje de salida del chorro. Igualmente, la influencia del aire se hace sentir cuando tenemos una ausencia de éste en la entrada y el flujo se desplaza más lentamente, por lo tanto en el caso 3 tenemos densidades mayores en el caso 2. En otras palabras cuando el gasto de aire de entrada es mayor, el valor de la densidad decrece a mayor distancia.

### **6.2.3 Amoniaco**

El amoniaco que entra al sistema se encuentra en un estado bifásico. En las figuras 9, 11 y 13, se describe la trayectoria que tiene el amoniaco líquido, para cada uno de los casos.

Para fines prácticos de programación, a esta fracción se le ha denominado PT1, y para las tres predicciones la fracción volumétrica tiene un valor de 0.0460 y se obtuvo de acuerdo a las ecuaciones del capítulo 3. El comportamiento de estas especies es muy similar al comportamiento del amoníaco gaseoso, el cual entra con una fracción volumétrica de 0.954, y ha sido denominado como PT0, para fines de programación. En las figuras 10,12 y 14, se observa el comportamiento de esta fase.

Las figuras 9 y 10, ilustran el comportamiento de PT1 y PT0; para el caso 1, el aire lateral transporta al amoniaco en dirección del eje X. El amoníaco líquido se evapora al salir de la boquilla, transformándose en amoníaco gaseoso y de esta forma se incrementa el valor de la fracción volumétrica de PT0, la evaporación es paulatina, dependiendo de la capacidad del aire para absorber la fase líquida. En la escala de colores de las figuras anteriores, se muestra el valor volumétrico de cada fase. En las gráficas de las figuras 15 y 16, las lecturas se tomaron en dirección de Z, en el salida de amoníaco ( $X=17$ ,  $Y=17$ ), se observa una disminución del valor de PT1, y de la misma forma se incrementa el valor de PT0, Esto quiere

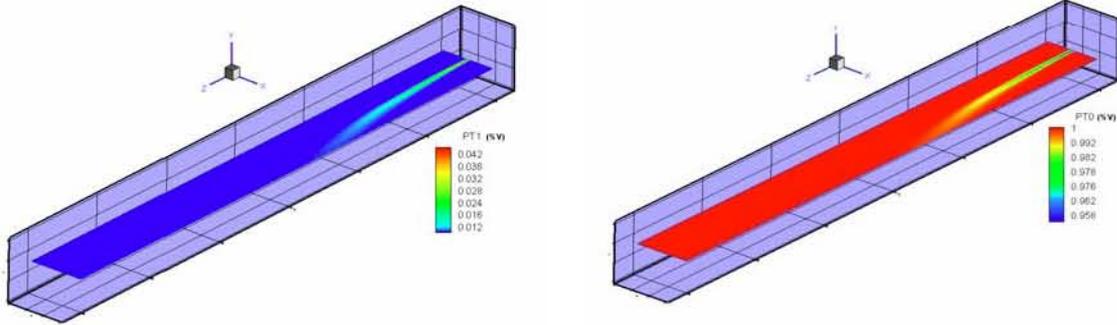


Figura 9. Amoníaco líquido en el caso 1. Figura 10. Amoníaco gaseoso en el caso 2.

decir, que el amoníaco se evaporó con dicha velocidad a lo largo de la línea en donde se tomaron las lecturas. También recordemos que el amoníaco a temperatura y presión ambiental, se encuentra en forma de gas, por eso la naturaleza del amoníaco líquido es transformarse en gas, al salir del contenedor.

En las figuras 11 y 12, se ilustra el caso 2, en donde hay ausencia de aire, provocando que al amoníaco le cueste trabajo desplazarse a lo largo del eje Z, limitando su alcance y también tenemos más concentración de amoníaco gaseoso a una distancia menor de la boquilla de salida, ya que éste no se diluye con aire entrante.

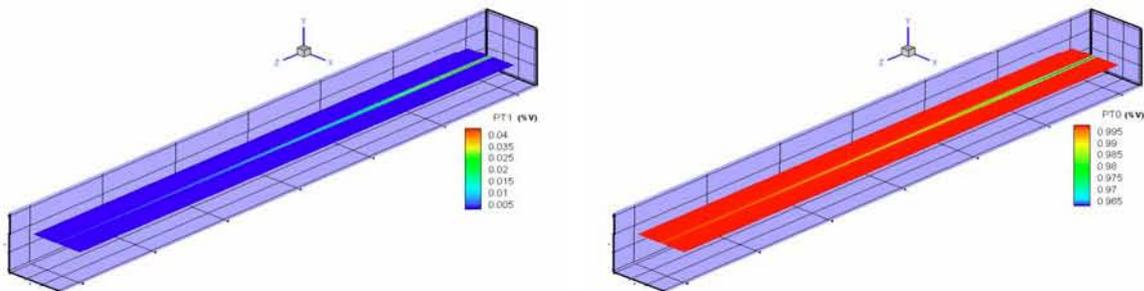


Figura 11. Fase líquida en el caso 2. Figura 12. Fase gaseosa en el caso 2.

El caso contrario es ilustrado en las figuras 13 y 14; en éste se tiene una entrada de aire paralela a la salida de amoníaco, el aire influye arrastrando a una mayor longitud al chorro de amoníaco, provocando también que el aire diluya al amoníaco gaseoso, por el contrario al amoníaco líquido lo transporta a lo largo del eje axial.

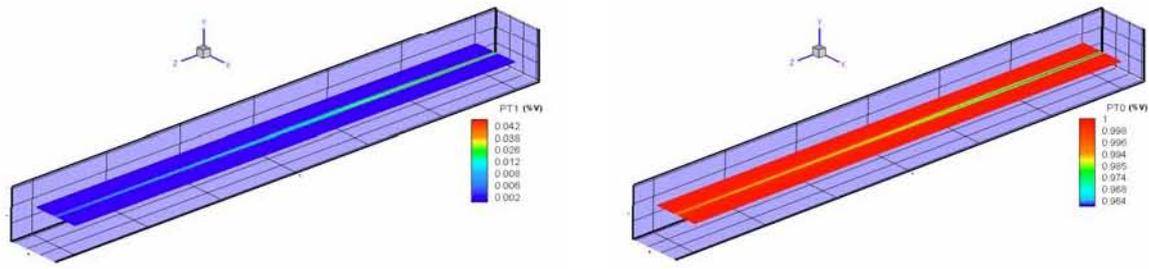


Figura 13. Fase líquida en el caso 3. Figura 14. Fase gaseosa en el caso 4.

Igualmente en el caso 2 y 3, no hay que perder de vista el efecto del campo gravitatorio, estas fuerzas atraen al flujo hacia el piso, siendo el amoníaco líquido quien sufre más el efecto de este fenómeno físico, ya que su densidad es mayor comparada con el amoníaco gaseoso. En la figura 16, se detalla el efecto.

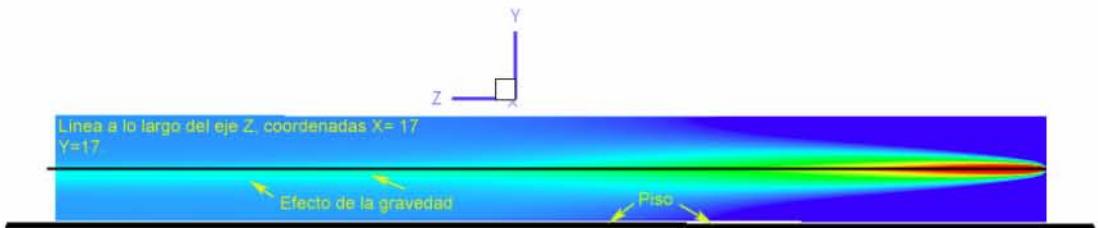


Figura 16. Efectos de la gravedad.

La gráfica de resultados de la figura 15, representa el comportamiento de la fase líquida, aquí se puede ver la diferencia que existe entre las tres simulaciones numéricas, en sus tres diferentes condiciones. En 30 m se tienen pequeñas fracciones de amoníaco líquido, cuando tenemos ausencia de aire paralelo y cuando éste se hace presente, el caso contrario es cuando el aire lateral propicia el cambio de dirección del chorro.

## Amoniaco Líquido

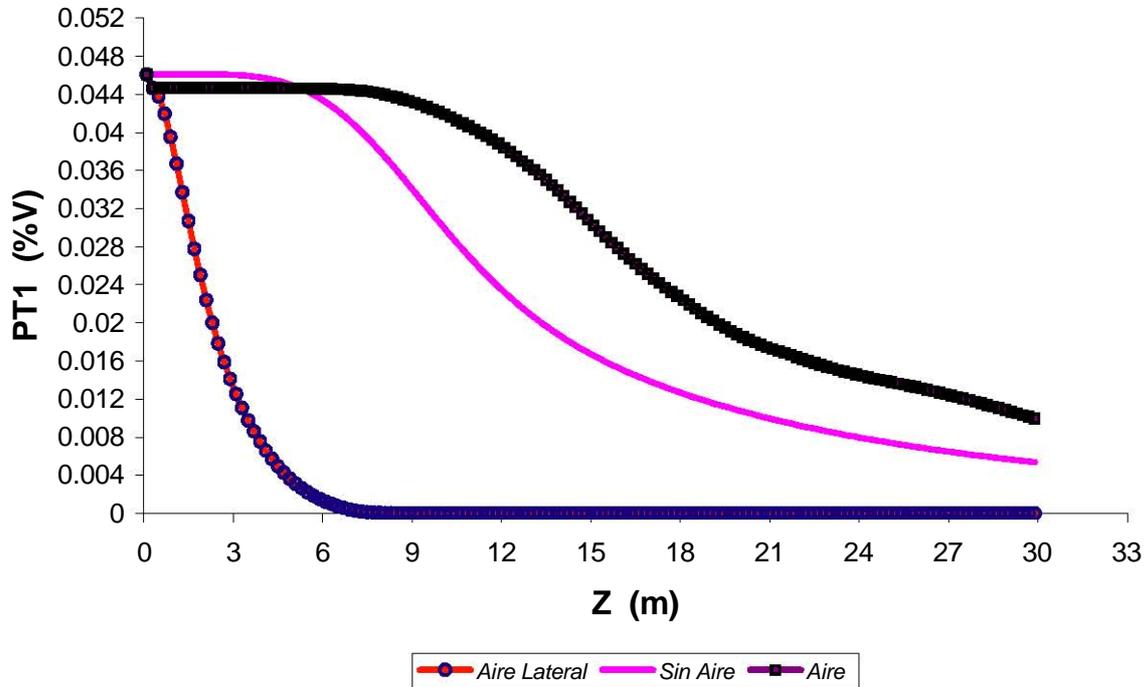


Figura 15. Gráfica del amoníaco líquido.

La figura 17, muestra la gráfica de resultados para el complemento de la mezcla (fase gaseosa). En ésta se muestra lo mencionado anteriormente respecto al aire lateral y el cambio de valor que tiene esta en 4 m; en cambio cuando se tiene aire paralelo y ausencia del mismo, el amoníaco comienza a tener un comportamiento de transformación de fase aproximadamente a 8 m.

## Amoniaco Gaseoso

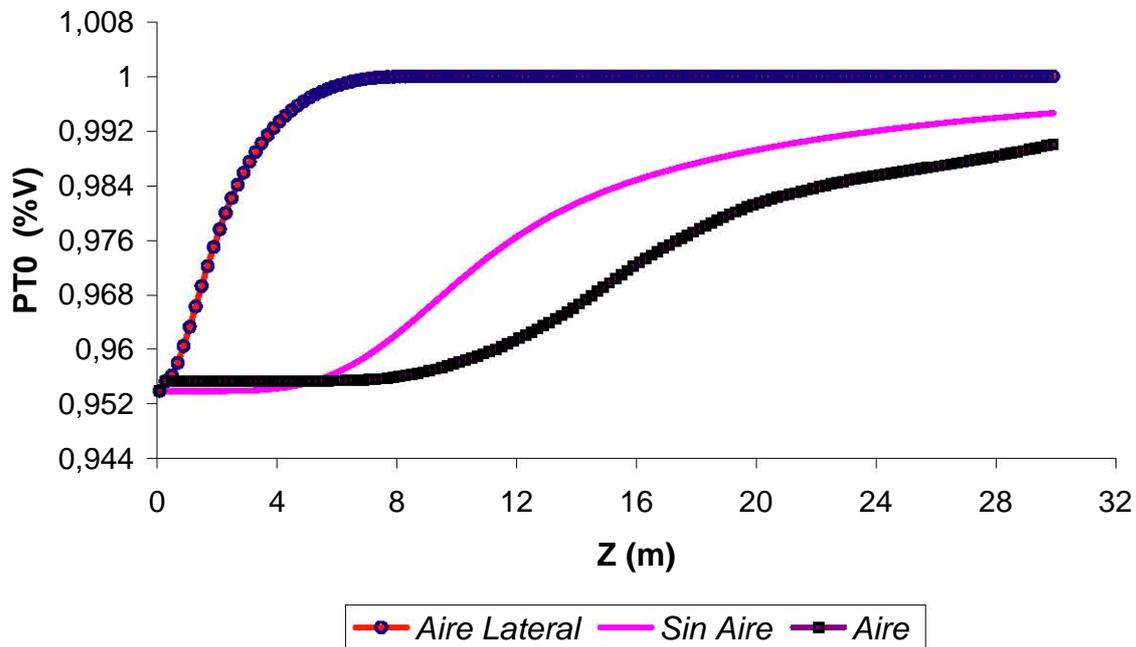


Figura 17. Gráfica del amoníaco gaseoso.

### 6.2.4 Partes por Millón

Las partes por millón (PPM) se encuentran en función de las concentraciones de amoníaco líquido y gaseoso. Hay que resaltar que son las PPM el parámetro de validación para la parte numérica, ya que en los datos obtenidos del INERIS sólo se encuentran los resultados relacionados con este parámetro. Recordando que de la concentración de PPM, dependen los riesgos a la salud que pueda provocar un accidente con amoníaco (véase capítulo 1).

En el caso uno el efecto del aire lateral ocasiona que la concentración llegue a un valor muy cercano a cero, esto se puede visualizar en la grafica de la figura 18, sin embargo, esto no quiere decir que no existen concentraciones altas en PPM. Únicamente que se están tomando lecturas en una sola dirección.

En la figura 18, se tienen las gráficas de los tres casos de validación numérica y los datos experimentales [2] que se tomaron para hacer la comparación. Sí en el capítulo 3 se presentó la gráfica de los resultados experimentales, aquí se tomaron los datos que se encuentran en los primeros 50 m, ya que la simulación se realizó en 30 m, por lo tanto, son los puntos de comparación con los resultados obtenidos.

### Partes por Millón

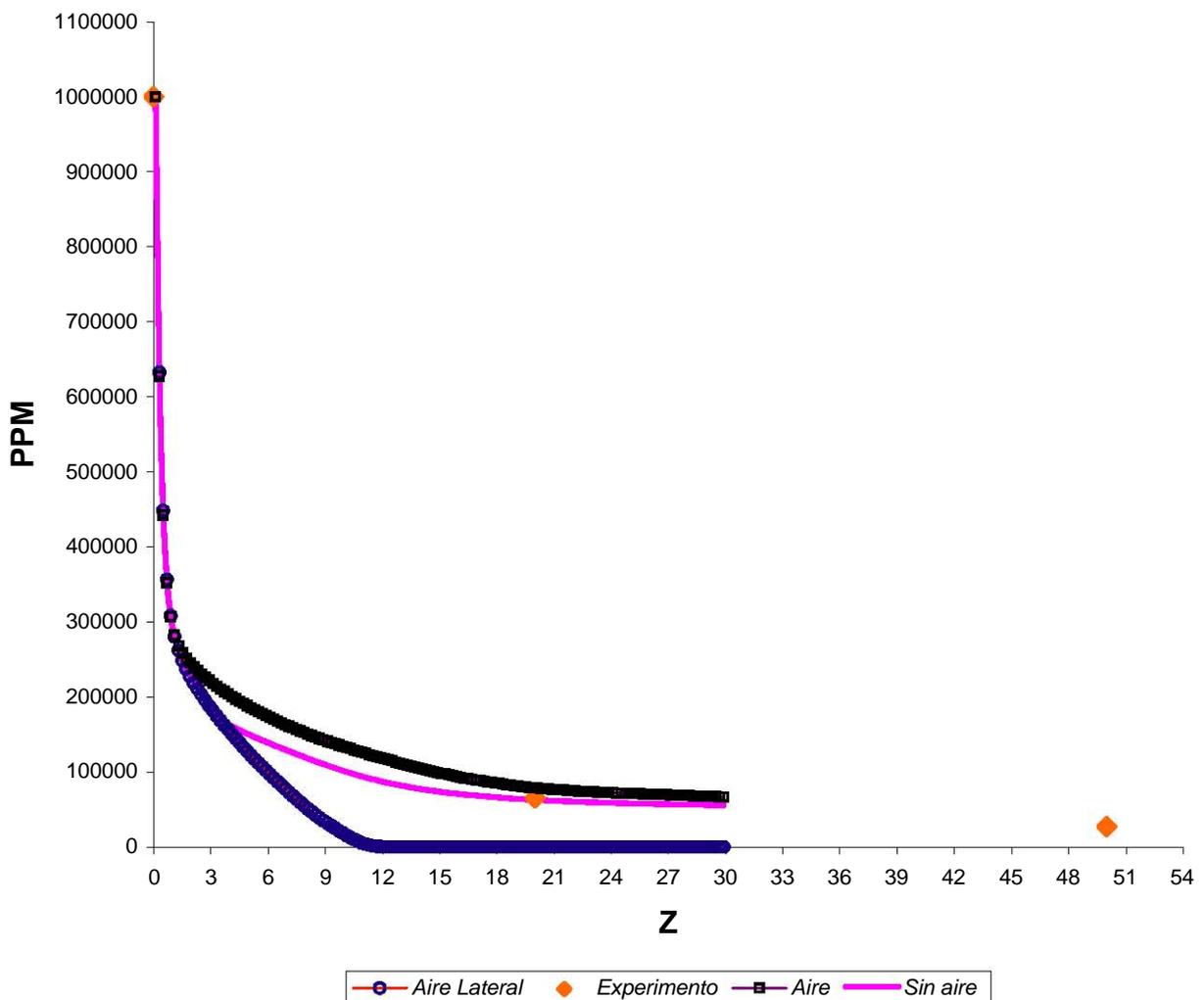


Figura 18. Gráfica de la concentración de amoníaco en partes por millón.

La curva que forma el caso que se encuentra si aire, interseca uno de los puntos del experimento, en cambio el caso con entrada de aire se encuentra por arriba. Sin embargo, en el caso del experimento el viento puede cambiar en instantes muy cortos de tiempo y por lo tanto las lecturas que se tienen no se pueden controlar.

En los casos de simulación, se dejaron las entradas de aire estacionarias y no se evaluaron esos cambios de dirección del viento.

Aunque se han mencionado algunas de las posibles causas de error, los resultados se aproximan de manera considerable de las concentraciones en PPM, por lo tanto, el modelo numérico del deslizamiento, queda validado con el ensayo experimental del INERIS.

En la gráfica de la figura 19, se comparan los resultados numéricos del caso 2 y 3 con los resultados experimentales, hasta los primeros 30 m. Inmediatamente después se hace una comparación hasta los 200 m, ésta se realizó con una extrapolación de los resultados obtenidos en la primera sección de la gráfica, con la finalidad de comprobar la tendencia de los resultados a una longitud mayor. Para realizar la extrapolación se utilizó una función como la mostrada en la figura.

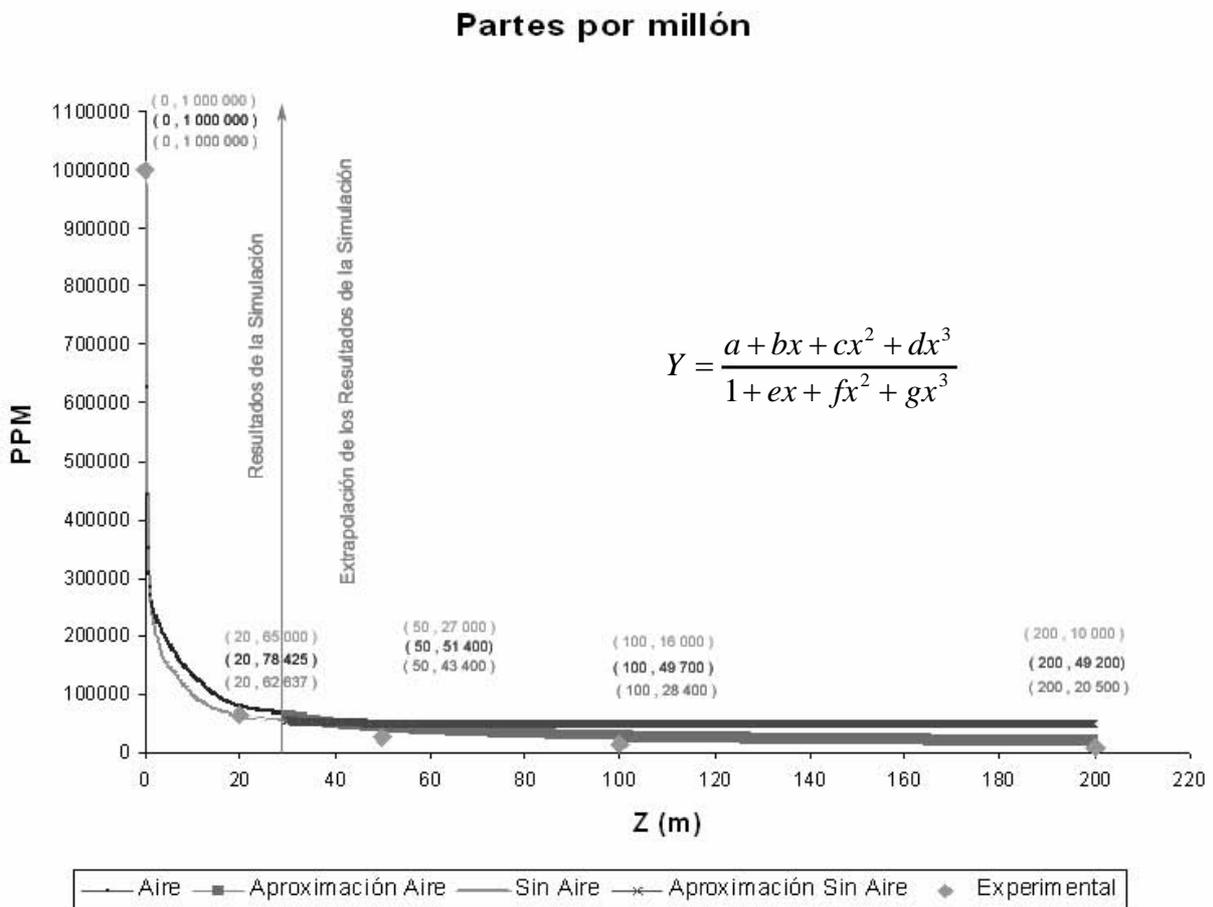


Figura 19. Gráfica de extrapoliación de resultados

# **CAPÍTULO 7**

## ***CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES***

El modelo de deslizamiento utilizado en la validación de resultados, es aplicado a flujos cuasi-bifásicos y por lo tanto los resultados obtenidos son una aproximación a un flujo bifásico.

## 7.1 Conclusiones

El viento lateral que se incluyó en uno de los casos tuvo un impacto significativo en los resultados de concentración en cada fase (pt0 y pt1), así como en las ppm. Esto es porque al entrar el aire con un ángulo de inclinación con respecto a la salida de amoníaco, provoca que el fluido sea arrastrado hacia un costado del sistema y por lo tanto las concentraciones no se puedan medir a lo largo de la salida en donde se encuentra la fuga.

La fase líquida es atraída hacia el suelo, esto es una consecuencia de la influencia de la gravedad. En las imágenes, el efecto no se puede ver muy claro, la fase líquida es la que tiene una densidad mayor comparada con la del gas, ocasiona que la mezcla caiga al ser más pesada que el aire. Al evaporarse en su totalidad o al caerse al suelo el líquido, la mezcla se levanta ya que el amoníaco gas es menos denso que el aire. Este último fenómeno no se logra ver en este trabajo.

Las condiciones de frontera se mantienen estables durante la simulación, esto es porque se está simulando sólo un estado de condiciones ambientales. Sin embargo, en el experimento éstas pudieron cambiar durante el desarrollo del mismo, ya que no se puede tener un control de las mismas en un experimento que se realizó al aire libre.

El efecto de la evaporación limita el recorrido del amoníaco, ya que en este trabajo no se ha considerado la humedad y por lo tanto el amoníaco líquido se evapora más rápido que en el caso experimental. Es por esta razón que al compararse con los resultados experimentales, en donde existe la humedad del

medio ambiente, la dispersión de amoníaco tiene un alcance de mayor longitud, comparado con los 30 m de la simulación.

Un trabajo previo al presente desarrollo es: “Modelo numérico de la dispersión de amoníaco en fase gaseosa en el medio ambiente, como consecuencia de un accidente industrial” [15]. A diferencia del presente trabajo, sólo se trabajó con amoníaco gaseoso, por lo cual el alcance de la dispersión es mayor en comparación los resultados que se obtuvieron en este trabajo. Otra punto importante de la comparación, son los efectos de la gravedad, ya que aquí ha sido tomada en cuenta la influencia de la misma.

## **7.2 Recomendaciones**

Una recomendación en próximos trabajos es tener lecturas de concentración, no sólo a lo largo de la salida de amoníaco. Sin embargo, por el momento sólo se cuenta con esta información, pero se sabe que el INERIS posee más datos, que podrían servir para este fin

En próximos trabajos se pueden hacer simulaciones con ecuaciones que describen el comportamiento de un flujo bifásico, validando los resultados con el experimento y a su vez compararlos con el modelo cuasi-bifásico, esto daría más rango de comparación y de validación con la realidad.

Las condiciones de frontera de un experimento al aire libre no se pueden controlar en su totalidad, por eso es recomendable hacer validaciones con diferentes condiciones de frontera a la utilizadas en el presente trabajo y a su vez utilizar el modelo de deslizamiento, para hacer comparaciones entre lo que se ha validado y validar próximos casos.

# BIBLIOGRAFÍA

- [1] Dekker. M. **Ammonia**, Ed. by a.v. slack, g. Russell james
- [2] Bouet Rémy, **Ammoniac Essais de Dispersion atmosphérique à grande échelle**, INERIS Francia 1999.
- [3] González M. Diego, Pérez C. Rafael, **Simposio Regional Sobre Preparativos para Emergencia y Desastres Químicos: Un reto para el siglo XXI**, México 30 Octubre- 1 Noviembre, Aspectos Teóricos sobre la Planificación de la Emergencia en el Lugar del Accidente, Pan American Health Organization, 1996.
- [4] Marambio Denté Eduardo, Salinas Vázquez María del Rayo, **Manual de Seguridad para los laboratorios de la Facultad de Química**, Facultad de Química UNAM, Departamento Editorial 1998.
- [5] Rojas Jiménez Pablo, **Riesgos de Impacto a la Comunidad en Plantas de Proceso que maneja Amoníaco**, 1994.
- [6] R.Aris. **Vectors, Tensors and the Basic Equations os Fluid Mechanics**
- [7] A.Favre. **Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics**. SIAM, 1969.
- [8] W.P. Jones. **Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion**.
- [9] Harlow F.H y Nakayama P.I. **Transport of Turbulence Energy Decay Rate**. LA-3854, Los Alamos Science Lab., U.California, USA. 1968.
- [10] Enciclopedia CHAM. [www.cham.co.uk](http://www.cham.co.uk). 2005
- [11] S.V. Pantankar. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. Hemisphere Publishing Corporation, January 1980.
- [12] H.H. Ferziger and M. Peric. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. Springer-Verlag.
- [13] D.B. Spalding. D.B. Spalding. **Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, Heat Transfer and Math Transfer Process. Technical Report HTS/8011**, Imperial College of science Technology and Medicine, 1980.

- [14] J.C. Ludwing, H.Q. Qin, and D.B Spalding. The ***phoenics reference manual. Techical Report CHAM TR/200***, CHAM Ltd, London, 1989.
- [15] Iglesias. O.F. ***Modelo Numérico de la Dispersión de Amoníaco en Fase Gaseosa en el Ambiente como Consecuencia de un Accidente Industrial***.UNAM. México D.F 2004.

# APENDICE I

## DATOS DE ENTRADA

```
TALK=f;RUN(1,1)
  GROUP 1. Run title and other preliminaries
TEXT(fuga de amoniaco)
INTEGER(NYB,NZB,NYIN,NZIN,NZJ1,NZJ2)

  ** Thermodynamic and eddy-break-up constants
PRESS0=1E5

  ** Thermodynamic and eddy-break-up constants
  ** Boundary specifications

  ** Domain specifications

  GROUP 3. X-direction grid specification
  STEADY=T
  LSTEP=1500.0
  TLAST=460.0
  GRDPWR(T,LSTEP,TLAST,1.0)

Nx=32
NREGx=3
IREGx=1; GRDPWR(X,15,1.5,1.0)
"q1" 237 lines, 5791 characters
TALK=f;RUN(1,1)
  GROUP 1. Run title and other preliminaries
TEXT(fuga de amoniaco)
INTEGER(NYB,NZB,NYIN,NZIN,NZJ1,NZJ2)

  ** Thermodynamic and eddy-break-up constants
PRESS0=1E5

  ** Thermodynamic and eddy-break-up constants
  ** Boundary specifications

  ** Domain specifications

  GROUP 3. X-direction grid specification
  STEADY=T
  LSTEP=1500.0
  TLAST=460.0
  GRDPWR(T,LSTEP,TLAST,1.0)

Nx=32
NREGx=3
IREGx=1; GRDPWR(X,15,1.5,1.0)
IREGx=2; GRDPWR(x,2,0.051,1.0)
TALK=f;RUN(1,1)
  GROUP 1. Run title and other preliminaries
TEXT(fuga de amoniaco)
INTEGER(NYB,NZB,NYIN,NZIN,NZJ1,NZJ2)
```

\*\* Thermodynamic and eddy-break-up constants  
PRESS0=1E5

\*\* Thermodynamic and eddy-break-up constants  
\*\* Boundary specifications

\*\* Domain specifications

GROUP 3. X-direction grid specification  
STEADY=T  
LSTEP=1500.0  
TLAST=460.0  
GRDPWR(T,LSTEP,TLAST,1.0)

Nx=32  
NREGx=3  
IREGx=1; GRDPWR(X,15,1.5,1.0)  
IREGx=2; GRDPWR(x,2,0.051,1.0)  
IREGx=3; GRDPWR(x,15,1.5,1.0)  
TALK=f;RUN(1,1)  
GROUP 1. Run title and other preliminaries  
TEXT(fuga de amoniaco)  
INTEGER(NYB,NZB,NYIN,NZIN,NZJ1,NZJ2)

\*\* Thermodynamic and eddy-break-up constants  
PRESS0=1E5

\*\* Thermodynamic and eddy-break-up constants  
\*\* Boundary specifications

\*\* Domain specifications

Group 4. y-direction grid specification  
Ny=32  
NREGy=3  
TALK=f;RUN(1,1)  
GROUP 1. Run title and other preliminaries  
TEXT(fuga de amoniaco)  
INTEGER(NYB,NZB,NYIN,NZIN,NZJ1,NZJ2)

\*\* Thermodynamic and eddy-break-up constants  
PRESS0=1E5

\*\* Thermodynamic and eddy-break-up constants  
\*\* Boundary specifications

\*\* Domain specifications

GROUP 3. X-direction grid specification  
STEADY=T  
LSTEP=1500.0  
TLAST=460.0

GRDPWR(T,LSTEP,TLAST,1.0)

Nx=32  
NREGx=3  
IREGx=1; GRDPWR(X,15,1.5,1.0)  
IREGx=2; GRDPWR(x,2,0.051,1.0)  
IREGx=3; GRDPWR(x,15,1.5,1.0)  
\*\*\*\*\*

Group 4. y-direction grid specification

Ny=32  
NREGy=3  
IREGY=1; GRDPWR(y,15,1.5,1.0)  
TALK=f;RUN(1,1)  
GROUP 1. Run title and other preliminaries  
TEXT(fuga de amoniaco)  
INTEGER(NYB,NZB,NYIN,NZIN,NZJ1,NZJ2)

\*\* Thermodynamic and eddy-break-up constants  
PRESS0=1E5

\*\* Thermodynamic and eddy-break-up constants  
\*\* Boundary specifications

\*\* Domain specifications

GROUP 3. X-direction grid specification

STEADY=T  
LSTEP=1500.0  
TLAST=460.0  
GRDPWR(T,LSTEP,TLAST,1.0)

Nx=32  
NREGx=3  
IREGx=1; GRDPWR(X,15,1.5,1.0)  
IREGx=2; GRDPWR(x,2,0.051,1.0)  
IREGx=3; GRDPWR(x,15,1.5,1.0)  
\*\*\*\*\*

Group 4. y-direction grid specification

Ny=32  
NREGy=3  
IREGY=1; GRDPWR(y,15,1.5,1.0)  
IREGY=2; GRDPWR(y,2,0.051,1.0)  
IREGY=3; GRDPWR(y,15,1.5,1.0)  
\*\*\*\*\*

Group 5. z-direction grid specification

Nz=150  
NREGz=1  
IREGZ=1; GRDPWR(z,150,30.0,1.00)

GROUP 7. Variables stored, solved & named

NAME (C1) = PT0  
NAME (C2) = PT1

```

STORE ( DEN1 , VISL, c12, c10,c11 )
STORE (DTA1, DTA2, DTA3, DTA4,DTA5,DTA6)
SOLVE ( PT0,PT1,VFOL)
solve(p1,v1,w1,u1)
solve(maca)
store(PPM)
store(VAPO)
  TERMS (CACA,Y,Y,Y,N,Y,N)
TURMOD(KEMODL)

```

```

SOLUTN(P1 ,Y,Y,Y,N,N,N)
  SOLUTN(V1 ,Y,Y,N,N,N,N)
  SOLUTN(W1 ,Y,Y,N,N,N,N)
  SOLUTN(KE ,Y,Y,N,N,N,N)
  SOLUTN(EP ,Y,Y,N,N,N,N)

```

GROUP 8. Terms (in differential equations) & devices  
GALA=T

```

TERMS(VFOL,N,N,N,N,P,P)
TERMS(PT0,Y,Y,Y,N,Y,N)

```

```

  TERMS(PT1,Y,Y,Y,N,Y,N)
GROUP 9. Properties of the medium (or media)
RHO1 = GRND; RHO2 = 1.1614
ENUL = GRND
PHINT (PT0) = 1.1614
PHINT (PT1) = 682.94
CINT (PT1) = 30.242E-6
PRNDTL (PT0) = 184.6e-7
PRNDTL (PT1) = 101.5e-7

```

GROUP 11. Initialization of variable or porosity fields  
\*\* Initial values

```

FIINIT(P1)=0.00;FIINIT(V1)=-0.01;FIINIT(W1)=0.10
FIINIT(KE)=0.01;FIINIT(EP)=0.010;FIINIT(PT0)=1.0
FIINIT(PT1)=0.0

```

GROUP 13. Boundary conditions and special sources

```

ig(13)=20

real(keini,epini,vm,rhom,pt1in,rhom2)
real(gf1,gf2,gf3,gf4,gf5,gf6,gf7,gf8)
vm=5.0
keini=(0.07*vm)**2
epini=((0.09**0.75)*keini**1.5)/(0.1*56E-3)

RHOM=1.1614
RHOM2=0.6894

```

PATCH (ENTRADA\_1 , WEST, 1, 1, 1, ny, 1,nz,1,tlast)  
COVAL (ENTRADA\_1, P1, fixflu, 2.82\*RHOM)  
COVAL (ENTRADA\_1, V1 ,onlyms, 0.0 )  
COVAL (ENTRADA\_1, U1 ,onlyms, 2.82)  
COVAL (ENTRADA\_1, W1 ,onlyms, 1.03)  
COVAL (ENTRADA\_1 , VFOL ,onlyms, 1. / RHOM)  
COVAL ( ENTRADA\_1 , PT1 ,fixval, 0.0)  
COVAL (ENTRADA\_1 , PT0 ,fixval, 1.0)  
COVAL (ENTRADA\_1 , maca ,fixval, 0.0)

PATCH ( ASM\_2ENTRADA , LOW , 1, nx, 1, NY,1, 1, 1, tlast)  
COVAL ( ASM\_2ENTRADA , P1 ,fixflu, 0.01\*RHOM)  
COVAL ( ASM\_2ENTRADA , V1 ,onlyms, 0.0 )  
COVAL ( ASM\_2ENTRADA , U1 ,onlyms, 0.0 )  
COVAL ( ASM\_2ENTRADA , W1 ,onlyms, 0.01)  
COVAL ( ASM\_2ENTRADA , VFOL ,onlyms, 1. / RHOM)  
COVAL ( ASM\_2ENTRADA , PT1 ,fixval, 0.0)  
COVAL ( ASM\_2ENTRADA , PT0 ,fixval, 1.0)  
COVAL ( ASM\_2ENTRADA , maca ,fixval, 0.0)

OUTLET (ASM\_6OUT, LOW, 1, NX, 1,NY, 1,1,1,1)  
VALUE (ASM\_6OUT, P1, 0.0)  
VALUE (ASM\_6OUT, PT0, 1.)  
VALUE (ASM\_6OUT, PT1, 0.)  
VALUE (ASM\_6OUT, VFOL, 1/rhom)

PATCH ( ASM\_1ENTRADA , LOW , 16, 17, 16, 17,1, 1, 1, tlast)  
COVAL ( ASM\_1ENTRADA , P1 ,fixflu, 64.0301\*14.0\*RHOM)  
COVAL ( ASM\_1ENTRADA , V1 ,onlyms, 0.0 )  
coval ( asm\_1entrada , u1 ,ONLYMS, 0.0 )  
COVAL ( ASM\_1ENTRADA , W1 ,onlyms, 64.0301)  
COVAL ( ASM\_1ENTRADA , VFOL ,onlyms, 1. / (4.0\*RHOM))  
COVAL ( ASM\_1ENTRADA , PT1 ,fixval, 0.0460987)  
COVAL ( ASM\_1ENTRADA , PT0 ,fixval, 0.9539013)  
COVAL ( ASM\_1ENTRADA , maca ,fixval, 3.0)

WALL(WALL1,south,1,NX,1,1,1,nz,1,1)

OUTLET (ASM\_1OUT, HIGH, 1, NX, 1,NY, NZ,NZ,1,1)  
VALUE (ASM\_1OUT, P1, 0.0)  
VALUE (ASM\_1OUT, PT0, 1.)  
VALUE (ASM\_1OUT, PT1, 0.)  
VALUE (ASM\_1OUT, VFOL, 1/rhom)

```
OUTLET (ASM_3OUT, east, nx, NX, 1,NY, 1,NZ,1,1)
VALUE (ASM_3OUT, P1, 0.0)
VALUE (ASM_3OUT, PT0, 1.)
VALUE (ASM_3OUT, PT1, 0.)
VALUE (ASM_3OUT, VFOL, 1/rhom)
```

```
OUTLET (ASM_4OUT, north, 1, NX, NY,NY, 1,NZ,1,1)
VALUE (ASM_4OUT, P1, 0.0)
VALUE (ASM_4OUT, PT0, 1.)
VALUE (ASM_4OUT, PT1, 0.)
VALUE (ASM_4OUT, VFOL, 1/rhom)
```

Inserte pared como salida

```
OUTLET (ASM_5OUT, west, 1, 1, 1,NY, 1,NZ,1,1)
VALUE (ASM_5OUT, P1, 0.0)
VALUE (ASM_5OUT, PT0, 1.)
VALUE (ASM_5OUT, PT1, 0.)
VALUE (ASM_5OUT, VFOL, 1/rhom)
```

```
PATCH(ASM_DIFF,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,1)
COVAL(ASM_DIFF,pt1,FIXFLU,GRND1)
```

```
PATCH(WVAPO,FREEVL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,tlast)
COVAL(WVAPO,PT0,FIXFLU,GRND5)
COVAL(WVAPO,PT1,FIXFLU,GRND5)
COVAL(VAPORIS0,C3,GRND2,GRND5)
COVAL(VAPORIS0,PHIS,FIXFLU,GRND5)
```

```
PATCH(GRAVITY,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,tlast)
COVAL(GRAVITY,V1,FIXFLU,-9.81)
```

\*\* Whole-field source for fuel

```
GROUP 15. Termination of sweeps
LSWEEP=6500
restrt(all)
LITER(PT0) = 2
LITER(PT1) = 5
ENDIT(PT0) = 1E-8
ENDIT(PT1) = 1E-5
```

```
GROUP 17. Under-relaxation devices
relax(V1,falsdt, 0.01)
relax(p1,linrlx, 0.5)
relax(w1,falsdt, 0.01)
relax(ke,falsdt, 0.01)
relax(ep,falsdt, 0.01)
relax(u1,falsdt, 0.01)
```

RELAX (PT0, LINRLX, 0.5)  
RELAX (PT1, LINRLX, 0.5)  
RELAX (maca, LINRLX, 0.5)  
VARMAX(U1)=100.0  
VARMIN(U1)=-100.0  
VARMAX(V1)=100.0  
VARMIN(V1)=-100.0  
VARMAX(W1)=100.0  
VARMIN(W1)=-100.0  
VARMAX(PT1)=.06  
VARMIN(PT0)=.94  
VARMAX(maca)=1.0  
VARMIN(maca)=0.0

VARMIN(SURN)=0; VARMAX(SURN)=1

GROUP 18. Limits on variables or increments to them

GROUP 19. Data communicated by satellite to GROUND

rg(30)=0.28e-4

ASLP = T  
LASLPB = T  
LASLPA = T

GROUP 21. Print-out of variables

NPRINT=LSWEEP  
OUTPUT(P1,Y,Y,Y,Y,Y,Y)  
OUTPUT(V1,Y,Y,Y,Y,Y,Y);OUTPUT(W1,Y,Y,Y,Y,Y,Y)

GROUP 22. Spot-value print-out  
IXMON=21;IYMON=11;IZMON=15;TSTSWP=5

GROUP 23. Field print-out and plot control  
NPLT=1  
ITABL=1  
iyprf=NY-2  
STOP

# APENDICE II

## Subrutina Ground

```
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,
121,23,24),IGR
25 CONTINUE
RETURN
C*****
C
C--- GROUP 1. Run title and other preliminaries
C
1 GO TO (1001,1002,1003),ISC
C
1001 CONTINUE
IVAPO=LBNAME('VAPO')
C
C * -----GROUP 1 SECTION 3 -----
C--- Use this group to create storage via MAKE, GXMAKE etc which it is
C essential to dump to PHI (or PHIDA) for restarts
C User may here change message transmitted to the VDU screen
IF(.NOT.NULLPR.AND.IDVCGR.EQ.0)
1 CALL WRYT40('GROUND file is GROUND.F of: 230597 ')
CALL make(yg2d)
C
RETURN
C * -----GROUP 1 SECTION 3 -----
C--- Use this group to create storage via GXMAKE which it is not
C necessary to dump to PHI (or PHIDA) for restarts
C
1003 CONTINUE
GO TO 25
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 (81,82,83,84,85,86,87,88,89,810,811,812,813,814,815,816)
  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
C--- Entered when UCONV =.TRUE.; block-location indices are:
C LD11 for east and north (accessible at the same time),
C LD12 for west and south (accessible at the same time),
C LD2 for high (which becomes low for the next slab).
C User should provide INDVAR and NDIREC IF's as appropriate.
  RETURN
  89 CONTINUE
C * ----- SECTION 9 ---- Diffusion coefficients
C--- Entered when UDIFF =.TRUE.; block-location indices are LAE
C for east, LAW for west, LAN for north, LAS for
C south, LD11 for high, and LD11 for low.
C User should provide INDVAR and NDIREC IF's as above.

```

```

C EARTH will apply the DIFCUT and GP12 modifications after the user
C has made his settings.
C
C RETURN
810 CONTINUE
C * ----- SECTION 10 --- Convection neighbours
C RETURN
811 CONTINUE
C * ----- SECTION 11 --- Diffusion neighbours
C RETURN
812 CONTINUE
C * ----- SECTION 12 --- Linearised sources
C RETURN
813 CONTINUE
C * ----- SECTION 13 --- Correction coefficients
C RETURN
814 CONTINUE
C * ----- SECTION 14 --- User's own solver
C RETURN
815 CONTINUE
C * ----- SECTION 15 --- Change solution
C RETURN
816 CONTINUE
C * ----- SECTION 16 --- Change DVEL/DPs
C RETURN
C
C * See the equivalent section in GREX for the indices to be
C used in sections 7 - 16
C
C * Make all other group-8 changes in GROUP 19.
C*****
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
C RETURN
901 CONTINUE
C * ----- SECTION 11 -----
C For TMP2.LE.GRND----- phase-2 temperature Index TEMP2
C RETURN
902 CONTINUE
C * ----- SECTION 12 -----
C For EL1.LE.GRND----- phase-1 length scale Index LEN1
C RETURN
903 CONTINUE
C * ----- SECTION 13 -----
C For EL2.LE.GRND----- phase-2 length scale Index LEN2
C RETURN
904 CONTINUE
C * ----- SECTION 14 -----
C For SOLVE(TEM1)----- phase-1 specific heat

```

```

RETURN
905 CONTINUE
C * ----- SECTION 15 -----
C For SOLVE(TEM2)----- phase-2 specific heat
RETURN
91 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 -----
C For RHO1.LE.GRND--- density for phase 1      Index DEN1

RETURN
92 CONTINUE
C * ----- SECTION 2 -----
C For DRH1DP.LE.GRND--- D(LN(DEN))/DP for phase 1
C                               Index D1DP

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

RETURN
97 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 -----
C For PRNDTL( ).LE.GRND--- laminar PRANDTL nos., or diffusivity
C                               Index LAMPR

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 (101,102,103,104,105),ISC
101 CONTINUE
C * ----- SECTION 1 -----
C For CFIPS.LE.GRND--- inter-phase friction coeff.
C                               Index INTFRC

RETURN
102 CONTINUE

```

```

C * ----- SECTION 2 -----
C For CMDOT.EQ.GRND- inter-phase mass transfer Index 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
105 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 -----
C For CVM.EQ.GRND--- virtual mass coefficient
C                               Index LD12
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
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
RETURN
1312 CONTINUE
C----- SECTION 13 ----- value = GRND1
RETURN
1313 CONTINUE
C----- SECTION 14 ----- value = GRND2
RETURN
1314 CONTINUE
C----- SECTION 15 ----- value = GRND3
RETURN
1315 CONTINUE
C----- SECTION 16 ----- value = GRND4
RETURN
1316 CONTINUE
C----- SECTION 17 ----- value = GRND5
IF (STORE(IVAPO)) THEN
  L0SIZE=L0F(ISIZE)
  L0CACA=L0F(ICACA)
  L0VAPO=L0F(IVAPO)
  L0P1=L0F(P1)
  L0R=L0F(PT1)
  L0VOL=L0F(VOL)

DO ICELL=1, NXNY

ai=61.738483127
bi=-4292.76093304
ci=-7.32596195279
di=1.76691895473e-3
ei=8.86642792471e-6
TMsanta=300
size=30.242E-6
psatu=exp(ai+bi/(TMsanta)+ci*log(TMsanta))
& +di*(TMsanta)+ei*(TMsanta)*(TMsanta)
if(F(L0P1+ICELL).le.0.0) then
  pparcial=100*F(L0CACA+ICELL)
else
  pparcial=(100+F(L0P1+ICELL/1000.0))*F(L0CACA+ICELL)
endif
F(L0VAPO+ICELL)=2.0*2.8e-5*3.1416*(size)
& *(psatu-pparcial)*6.0*F(PT1+ICELL)
& /((8.314/17.04)*(TMsanta)*3.1416*(size)**3)
if(iz.eq.1.and.icell.eq.861.and.isweep.eq.2) then
write(*,*) psatu,pparcial,F(L0VAPO+ICELL),F(PT1+ICELL)

```

```

write(*,*) F(L0size+ICELL)
endif
ENDDO
ENDIF
IF(NPATCH(1:7).EQ.'WVAPO') THEN
IF(INDVAR.EQ.PT1) CALL FN2 (VAL,IBOUT,0.0,-1.0)
IF(INDVAR.EQ.PT2) CALL FN2 (VAL,IBOUT,0.0, 1.0)
ENDIF
RETURN
1317 CONTINUE
C----- SECTION 18 ----- value = GRND6
RETURN
1318 CONTINUE
C----- SECTION 19 ----- value = GRND7
RETURN
1319 CONTINUE
C----- SECTION 20 ----- value = GRND8
RETURN
1320 CONTINUE
C----- SECTION 21 ----- value = GRND9
RETURN
1321 CONTINUE
C----- SECTION 22 ----- value = GRND10
RETURN
C*****
C
C--- GROUP 14. Downstream pressure for PARAB=.TRUE.
C
14 CONTINUE
RETURN
C*****
C* Make changes to data for GROUPS 15, 16, 17, 18 GROUP 19.
C*****
C
C--- GROUP 19. Special calls to GROUND from EARTH
C
19 GO TO (191,192,193,194,195,196,197,198,199,1910,1911),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.
IF(isweep.eq.isweep) THEN
c PT1=LBNAME('C3')
c CALL FN13(c10,c2,c3,c4,c5,0.0,1.0,1.0,1.0,1.0)
c CALL FN13(c11,c6,c7,c8,c9,0.0,1.0,1.0,1.0,1.0)
c CALL FN10(c12,c10,c11,0.0,1.0,1.0)
ENDIF
RETURN
194 CONTINUE
C * ----- SECTION 4 ---- Start of iterations over slab.
RETURN
1911 CONTINUE
C * ----- SECTION 11---- After calculation of convection
C fluxes for scalars, and of volume
C fractions, but before calculation of
C scalars or velocities

```

```

RETURN
199 CONTINUE
C * ----- SECTION 9 ---- Start of solution sequence for
C                               a variable
RETURN
1910 CONTINUE
C * ----- SECTION 10---- Finish of solution sequence for
C                               a variable
RETURN
195 CONTINUE
C * ----- SECTION 5 ---- Finish of iterations over slab.
RETURN
196 CONTINUE
C * ----- SECTION 6 ---- Finish of iz slab.
if(isweep.eq.lisweep) then
  mPT1=lbname('PT1')
  mCACA=lbname('MACA')
  mPT0=lbname('PT0')

  mPPM=lbname('PPM')

  Call GETYX(mPT1,grc1,nydim,nxdim)
  Call GETYX(mCACA,grc2,nydim,nxdim)
  Call GETYX(mPT0,grc4,nydim,nxdim)

  DO jx=1,nxdim
  DO jy=1,nydim
    grc3(jy,jx)=1E6*(grc1(jy,jx)+grc2(jy,jx)*grc4(jy,jx))/
1      (grc1(jy,jx)+grc2(jy,jx)*grc4(jy,jx)
1      +(1.-grc2(jy,jx))*grc4(jy,jx))
  ENDDO
  ENDDO
  CALL SETYX(mPPM,grc3,nydim,nxdim)
  ENDIF

RETURN
197 CONTINUE
C * ----- SECTION 7 ---- Finish of sweep.

IERR=-1
open (unit=50,file='vuelcaphi',iostat=ierr,status='OLD')
IF(IERR.eq.0)THEN
close(unit=50,status='DELETE')
CALL WRIT40('PDFGR:File vuelcaphi found !!!!!!!!!!!!!!!')
CALL WRYT40('PDFGR:Writing fields to F2  ')
CALL WRYT40('PDFGR:Execution will resume afterwards')
CALL DUMPS('FLDS',' ',2,1,0,0)

ENDIF
RETURN
198 CONTINUE
C * ----- SECTION 8 ---- Finish of time step.
C.....Temporal Dump
if (.not.steady.and.(ig(13).gt.0)) then
  CALL DUMPS('A ',', ',istep,ig(13),0,0)
c  if (.not.steady.and.(mod(istep,ifdump).eq.0)) then
c    CALL DUMPS('A ',', ',istep,1,0,0)
c  endif
endif
C

```

```

C
  RETURN
C*****
C
C--- GROUP 20. Preliminary print-out
C
  20 CONTINUE
  RETURN
C*****
C--- GROUP 21. Special print-out to screen
  21 CONTINUE
  GO TO 25
C*****
C* Make changes to data for GROUP 22 only in GROUP 19.
C*****
C
C--- GROUP 23. Field print-out and plot control
  23 CONTINUE
  RETURN
C*****
c
C--- GROUP 24. Dumps for restarts
C
  24 CONTINUE
  END

```