



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO.



PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN
INGENIERÍA

FACULTAD DE INGENIERÍA

*“SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UNA
MEZCLA BIFÁSICA DE AMONIACO”*

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE

MAESTRO EN INGENIERÍA

Energía – Proceso y Uso Eficiente de la Energía

P R E S E N T A :

Ing. ISAAC HERNANDEZ ARRIETA

TUTOR

DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ

MEXICO, D.F.

Mayo 2008



JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Martín Salinas Vázquez

Secretario: Dr. William Vicente Y Rodríguez

Vocal: Dr. Arturo Guillermo Reinking Cejudo

1^{er} Suplente: Ing. Augusto Sánchez Cifuentes

2^{er} Suplente: Dr. Pablo Álvarez Watkins

**COORDINADORA DE INGENIERÍA EN PROCESOS
INDUSTRIALES Y AMBIENTALES**

**CIPIA
INSTITUTO DE INGENIERÍA UNAM**

TUTOR DE TESIS:

WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ

*DIOS creo al hombre, por tanto, todo lo
que crea el hombre es creación de DIOS...*

“A Cristo crucificado”

(poema anónimo del siglo xv)

*No me mueve, mi Dios, para quererte
el cielo que me tienes prometido,
ni me mueve el infierno tan temido
para dejar por eso de ofenderte.*

*Tú me mueves, Señor, muéveme el verte
clavado en una cruz y escarnecido,
muéveme ver tu cuerpo tan herido,
muéveme tus afrentas y tu muerte.*

*Muéveme, en fin, tu amor, y en tal manera,
que aunque no hubiera cielo, yo te amara,
y aunque no hubiera infierno, te temiera.*

*No me tienes que dar porque te quiera,
pues aunque lo que espero no esperara,
lo mismo que te quiero te quisiera....*

AGRADECIMIENTOS

A DIOS

Te agradezco mi Señor por todo lo que me has dado, por mi familia, por todas las personas que han dejado huella en mí, por los momentos gratos y por lo malos, por haberme permitido llegar lejos, por dejarme ser una persona útil para los demás, permite llegar más lejos para cumplir mis sueños.

A mis padres MANUEL y EMILIA

Les agradezco por todos los sacrificios que han hecho para formarme, por educarme y darme valores, por creer en mí, por enseñarme a cumplir mis metas y sueños, por apoyarme en todos los momentos más importantes de mi vida, por haberme hecho responsable, por haberme permitido llegar lejos, por pensar en que yo tuviera una mejor expectativa de vida, por ser buenos padres y por pensar en el beneficio de sus hijos más que en el de ustedes, por haber aguantado a un hijo como yo, por haberme permitido ser un miembro más en su familia. Si volviera a nacer, a Dios le pediría que ustedes fueran otra vez mis padres.

A mis hermanos ANDREA, ISMAEL y MÓNICA

Les agradezco hermanos por todo el apoyo que me han brindado, por el ejemplo que me han dado, por sus consejos, por su paciencia para aguantarme, porque no me olvidaré nunca de ustedes, por todo lo que hemos vivido todos estos años en familia.

A mi alma mater:

La UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Le agradezco por haberme formado en su seno, por haber confiado en mí, por permitirme ser una mejor persona para mi patria y mi gente, por que no tengo como pagarle todo lo que me ha dado y ha hecho de mí, nunca me olvidaré de ti y créelo que siempre dejaré tu nombre en alto..... Dios dé mucha vida a la UNAM

A mis mejores amigos ADRIÁN y MAURICIO

Les agradezco por todos los momentos en que los necesité y allí estuvieron, por los momentos que vivimos y que nos hicieron crecer, por ser tal como son, por sus comentarios y consejos en los tiempos difíciles de mi vida. También les quiero agradecer

por medio de ustedes a sus familias por todo lo que han hecho por mí, de verdad que los considero mis hermanos y espero que siempre estemos juntos.....

A mis compañeros y amigos de la primaria Gran Bretaña, de la secundaria ESTIC 89, del CCH-Naucaclpan, de la Facultad de Ingeniería y del Posgrado de Ingeniería

Les agradezco por haber escrito muchas páginas en el libro de mi alma, por las cosas gratas y no tan gratas que compartimos, por todos los que están y por todos los que se fueron y espero que algún día podamos volver a estar todos juntos y recordar todos esos momentos que vivimos, quisiera escribir todos sus nombres porque los tengo presentes, pero esta hoja no alcanzaría, de todos modos gracias a todos...

A mis amigos y compañeros del MFC Juvenil

Les agradezco por todo lo que han compartido conmigo, por su apoyo, por escucharme, por sus puntos de vista que me han hecho crecer, por haberme permitido expresar lo que tengo en mi corazón y pensamiento, que espero que algo de ello les haya servido.....

Amis compañeros y amigos de la UVM

Les agradezco su amistad, sus atenciones, su apoyo, sus consejos, que aguante mis bromas y mi forma de ser y les digo que nunca los olvidaré y que siempre estaré cuando me necesiten....

Al Dr. William Vicente y Rodríguez y al Dr. Martín Salinas Vázquez

Les agradezco por todo su apoyo, sus consejos y por haber dirigido mi tesis y por haberme abierto las puertas de CIPIA en el Instituto de Ingeniería....

A mis sinodales: Dr. Pablo Álvarez Watkins, Dr. Arturo Reinking Cejudo y el Ing. Augusto Sánchez Cifuentes

Por haber compartido sus conocimientos en el aula conmigo, por su amistad, por haber aceptado ser mis sinodales en mi examen de grado y por que sus consejos fueron los que le dieron detalle a esta tesis....

Amis compañeros y amigos del Instituto de Ingeniería y al Instituto de Ingeniería

Gracias por haberme aceptado y apoyado en todo ámbito, por la amistad que nos une y todos los momentos gratos que hemos compartido, me llevo un recuerdo muy bonito de todos ustedes y cuente conmigo en lo que necesiten...

A todos mis profesores

Les agradezco por haber compartido su conocimiento y por haberme educado en el aula, por su hermosa labor de crear mejores personas, por haber optado por el camino de la docencia para poder ayudar a su gente y a su patria. Espero algún día, y es mi deseo, poder también contribuir en el progreso de mi patria compartiendo mi conocimiento a los demás en un aula.....

A todos lo que contribuyeron en la realización de este trabajo de tesis, Trabajadores y Académicos de la UNAM, Ingenieros, Maestros en Ingeniería, Doctores en Ingeniería

Les agradezco por haberme guiado y compartido sus conocimientos así como su amistad, para la realización de este trabajo de tesis....

ISAAC HERNÁNDEZ ARRIETA.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1	INTRODUCCIÓN	1
1.1	Antecedentes	1
1.2	Riesgos del Amoniac	2
1.3	Descripción del problema	4
1.4	Alcance y estructura de la tesis	4
CAPÍTULO 2	ECUACIONES DE TRANSPORTE	6
2.1	Introducción	6
2.2	Continuidad	6
2.3	Conservación de la energía	6
2.4	Conservación de las especies	7
2.5	Conservación de la energía total	8
2.6	Ecuación de estado y Flujo difusivo	9
2.7	Promediado de las ecuaciones	11
2.8	Evaporación	14
2.9	Modelo de turbulencia	15
2.10	Propiedades de la mezcla	16
2.11	Ecuaciones para la fase dispersa	16
2.12	Ecuaciones Lagrangeanas	17
2.12.1	Ecuación de Posición	17
2.12.2	Ecuación de cantidad de movimiento	17
2.12.3	Ecuación de masa para la partícula	18
2.12.4	Ecuación de entalpía para la partícula	19
2.13	Modelo estocástico de turbulencia	21
CAPÍTULO 3	MÉTODOS DE SOLUCIÓN	23
3.1	Introducción	23
3.2	Método de solución para las ecuaciones eulerianas	23
3.2.1	Método de volúmenes finitos	23
3.3	Genra	29
3.3.1	Cálculo del paso temporal lagrangeano	30

3.3.2	Movimiento de la partícula.....	30
3.3.3	Integración de las ecuaciones de masa, cantidad de movimiento y entalpía.....	31
3.3.3.1	Ecuación de cantidad de movimiento de la partícula.....	31
3.3.3.2	Ecuación de la masa de la partícula.....	32
3.3.3.3	Ecuación de la entalpía de la partícula.....	32
3.3.3.4	Cálculo de los términos fuentes.....	34
3.3.3.5	Criterio de estancamiento.....	35
3.3.3.6	Rebote de partícula.....	35
3.3.3.7	Propiedades del fluido en la posición de la partícula.....	36
3.3.3.8	Fracción volumétrica de la partícula.....	36
3.3.3.9	Concentración másica de la partícula.....	37
3.3.3.10	Densidad de mezcla.....	37
 CAPÍTULO 4 DESCRIPCIÓN DEL EXPERIMENTO.....		38
4.1	Introducción.....	38
4.2	Ensayo de la dispersión	38
4.3	Descripción de las pruebas.....	40
 CAPÍTULO 5 SIMULACIÓN DE LA DESCARGA DE AMONIACO BIFÁSICA		44
5.1	Introducción.....	44
5.2	Mallado.....	44
5.3	Condiciones de frontera.....	48
5.4	Propiedades en la descarga de amoniaco.....	49
5.5	Constitución del código de la simulación.....	52
 CAPÍTULO 6 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN		56
6.1	Campos de Velocidad	56
6.2	Concentración de amoniaco.....	59
6.3	Entalpía	61
6.4	Partículas	63
6.5	Transferencia de Masa	68
6.6	Transferencia de Calor.....	70
6.7	Comparación de resultados.....	71

CAPÍTULO 7	CONCLUSIONES.....	72
BIBLIOGRAFÍA.....		75

INDICE DE FIGURAS.

Figura 3.1 Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.....	25
Figura 3.2 Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional	25
Figura 3.3 Rebote de partícula	36
Figura 4.1 Zonas de disipación de un chorro	40
Figura 4.2 Representación de las instalaciones del INERIS....	42
Figura 4.3 Distribución de los anemómetros para medir las condiciones meteorológicas	43
Figura 4.4 Gráfica de los resultados experimentales (Proporcionada por el INERIS)	44
Figura 5.1 Dimensiones del dominio.....	45
Figura 5.2 Caras del dominio	46
Figura 5.3 Regiones en las direcciones X y Y.....	47
Figura 5.4 Longitudes de cada región.....	47
Figura 5.5 Dominio de la descarga.....	48
Figura 5.6 Condiciones de frontera, con entrada de aire Lateral	49
Figura 6.1 Perfiles de velocidad en el dominio.....	57
Figura 6.2 Perfiles de velocidad en un plano xy	58
Figura 6.3 Perfiles de velocidad en un plano yz	58
Figura 6.4 Perfiles de velocidad en un plano xz	59

Figura 6.5 Perfiles de concentración de amoniaco gaseoso...	60
Figura 6.6 Perfiles de C1 en un plano yz	60
Figura 6.7 Perfiles de C1 en un plano xz	61
Figura 6.8 Perfiles de H1 en el dominio	62
Figura 6.9 Perfiles de H1 en un plano yz	62
Figura 6.10 Perfiles de entalpia en un plano xz	63
Figuras 6.11 y 6.12 Trayectorias de las partículas en el dominio.....	64
Figura 6.13 y 6.14 Acercamiento a las trayectorias de las partículas en el dominio.....	65
Figura 6.15 Gráfica de la variación de temperaturas de la fase continua y dispersa.....	66
Figura 6.16 Comportamiento del diámetro de la partícula.....	67
Figura 6.17 Comportamiento del diámetro con respecto a la temperatura.....	68
Figuras 6.18 y 6.19 Superficie de transferencia de masa.....	69
Figuras 6.20 y 6.21 Superficie de transferencia de calor.....	70

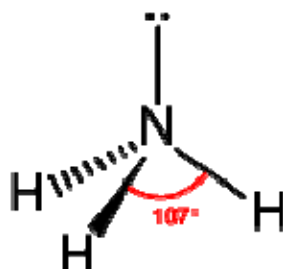
CAPITULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

En la actualidad, los problemas de evaluación y seguridad industrial han tomado mayor relevancia, debido al incremento en el uso de sustancias peligrosas que se requieren para generar otros insumos utilizados ya sea por la misma industria o por el consumidor final. Tales sustancias requieren un manejo y control adecuado. Entre ellas se encuentra el amoníaco. Esta sustancia tiene múltiples aplicaciones en la industria como por ejemplo: en la nitruración del acero, en la fabricación de fertilizantes, ácidos nítricos, explosivos y otros reactivos como el ácido sulfúrico, amidas, nitritos, etc. Se usa también en la mayoría de los artículos de limpieza así como en el aire acondicionado y refrigeración por sus propiedades como refrigerante.

El amoníaco o amoniaco es un compuesto químico cuya molécula consiste en un átomo de nitrógeno (N) y tres átomos de hidrógeno (H) de acuerdo a la fórmula NH_3 .



A temperatura y presión normales el amoníaco es un gas incoloro de olor muy penetrante y más ligero que el aire. Por ser un gas anhidro, tiene una fuerte afinidad por el agua y se disuelve fácilmente en esta; se evapora rápidamente. Sus disoluciones acuosas son alcalinas y tienen un efecto corrosivo frente a metales y tejidos vivos.

Se obtiene de manera natural como deshecho de proteínas de animales y vegetales; es también manufacturado, pues es un subproducto de la industria del petróleo.

A condiciones ambiente, presión y temperatura, el amoníaco se encuentra en estado de agregación gaseosa con una densidad de $0.72 \text{ [kg/m}^3\text{]}$. Su peso molecular es de 17.03 [Kg/Kgmol] ; constituido por 82.35% de nitrógeno y 17.65% de hidrógeno ambos porcentajes en peso. En su punto de ebullición normal de -33.35°C , tiene una densidad como líquido de $684 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ y un calor latente de vaporización de 328 [cal/g] . Su punto de congelamiento es de -77.7°C . [1]

1.2 Riesgos del amoniaco

El amoniaco no es considerado como un gas inflamable, ya que no es fácil que entre en combustión en condiciones ambientales normales, pues su temperatura de ignición es de $651 \text{ [}^\circ\text{C]}$ debido a que es un gas inerte, lo que hace que su porcentaje en masa molecular sea el que limita su inflamabilidad, pero puede arder bajo ciertas condiciones en fase vapor cuando se expone al fuego directo y el riesgo aumenta cuando está en presencia de otros combustibles.

El riesgo por explosión es bajo, pero puede existir, pues si el amoniaco es almacenado a una temperatura mayor que la temperatura de ebullición, puede presentar una explosión por la expansión de vapor a líquido caliente BLEVE (boiling liquid expansion vapour explosion). Este tipo de accidente ocurre cuando se llega a dar una falla o ruptura en el contenedor o por la nucleación espontánea del amoniaco, que es una evaporación rapidísima de toda la masa líquida, pues el amoniaco a altas temperaturas se descompone en hidrógeno y nitrógeno y presentar reacciones violentas en presencia de otros reactivos como: acetaldehído, acroleína, boro, haluros de boro, calcio, ácido clórico, azida de cloro, monóxido de cloro, trifluoruro de cloro, cromo, anhídrido crómico y clorato de potasio, por mencionar algunos. También el amoniaco y sus disoluciones acuosas son flamables en contacto con el flúor y el yodo, ya que forman compuestos explosivos.

Generalmente, el amoniaco es almacenado en fase líquida a alta presión, por lo que en caso de una fuga, la caída de presión va a producir un fenómeno denominado “flashing”, que consiste en un cambio de fase líquida a gaseosa de una fracción de amoniaco, mientras la fracción restante se queda en la fase líquida en forma de pequeñas gotas, lo cual ocasiona una gran nube de vapor y pequeñas gotas en las inmediaciones del accidente.

La forma en que ocurre la dispersión de la sustancia, depende de las condiciones de salida del contenedor (presión de almacenamiento, tamaño de la ruptura, entre otros) y por las condiciones meteorológicas y topográficas.

El amoniaco puede generar riesgos a la salud ya que es irritante, corrosivo y soluble al agua, lo que favorece a ser agresivo con los materiales y con los tejidos animales y vegetales.

Los daños que provoca el amoniaco pueden llegar a ser severos y pueden causar una lesión o incapacidad temporal o permanente, al quedar expuesto al contacto, inhalación o ingestión.

A continuación se muestran algunos daños causados por el amoniaco.

Tipo de Interacción	Daño Causado
Inhalación	<ul style="list-style-type: none"> • Irrita y quema el tracto respiratorio produciendo laringitis y dificultad de respirar. • Daños severos a los pulmones y corazón. • Convulsiones, coma y muerte.
Contacto con ojos y piel	<ul style="list-style-type: none"> • Conjuntivitis. • Erosión y pérdida de la vista. • Quemaduras en la piel • Congelación de la parte en contacto.
Ingestión	<ul style="list-style-type: none"> • Efecto destructivo en tejidos

	<ul style="list-style-type: none">• Nauseas, vómito y quemaduras en la boca, esófago, estómago, intestino delgado y cáncer de colon
--	---

El máximo nivel permisible de exposición establecido por la administración de seguridad y salud del trabajo de los Estados Unidos es de 50 ppm, en 8 horas. Por efectos de inhalación, niveles de 300 ppm resultan en daño inmediato a la salud y la vida. En un rango de concentraciones por volumen de aire entre 15 y 28% el amoniaco es flamable.

1.3 Descripción del problema

El estudio de la dispersión atmosférica del amoniaco es de gran interés; por un lado, los usos del amoniaco son numerosos en la fabricación de productos nítricos, y por el otro, el amoniaco es una sustancia muy tóxica, corrosiva, inflamable y explosiva, en ciertas circunstancias. Solo hay que recordar el accidente en Dakar, Senegal, cuando una fuga de una cisterna de 22 toneladas provocó la muerte de 129 personas y 1100 heridos, la mayoría con efectos irreversibles en pulmones, piel y ojos.

Las fugas de amoniaco representan problemas de seguridad, de salud y ambientales, ya que es una sustancia con gran solubilidad, y la alcalinidad de los compuestos que forman son perjudiciales para los seres vivos. Por lo cual es de gran importancia generar una herramienta que permita predecir o inferir el alcance de una pluma de amoniaco, cómo se va dispersando con el tiempo y hasta que distancia puede llegar a afectar, desde el momento de la fuga. Esto resulta importante, ya que en zonas industriales donde se deben tomar en cuenta el riesgo por fuga de amoniaco, ayudaría al establecimiento de zonas de seguridad, donde los niveles de concentración no produzcan daños a la salud.

1.4 Alcance y estructura de la tesis

El objetivo de la tesis es simular numéricamente una fuga de amoniaco de gran escala para la cual se tienen datos experimentales. Estos datos experimentales permitirán validar el modelo numérico. Para simular la dispersión del amoniaco se utilizará un modelo Euleriano-Lagrangiano, en el cual la parte

Euleriana se aplica a la fase continua (gas) y la parte Lagrangiana a la fase dispersa.

La estructura de la tesis es la siguiente:

En el presente capítulo se define el objetivo de la tesis, así como se presenta una explicación de la importancia de desarrollar el tema.

En el capítulo 2 se presentan las ecuaciones y fundamentos matemáticos que se empleados para la simulación de la dispersión del chorro de amoniaco.

Una descripción de los métodos de solución de las ecuaciones del capítulo 2 se presentan en el capítulo 3.

El ensayo experimental que sirve de base para la simulación numérica es descrito en el capítulo 4.

El capítulo 5 está constituido por las condiciones de frontera y las propiedades iniciales con las que se desarrolla la simulación.

Los resultados obtenidos en este estudio, son presentados y descritos en el capítulo 6.

La interpretación y análisis de resultados y las conclusiones a las que se llegaron son detallados en el capítulo 7.

CAPÍTULO 2

ECUACIONES DE TRANSPORTE

2.1 Introducción

En este capítulo se detallarán las ecuaciones que se utilizarán para describir la fuga de amoníaco.

Primero se presentan las ecuaciones fundamentales que gobiernan a un flujo viscoso e incompresible partiendo por la ecuación de continuidad, cantidad de movimiento, energía y por último, la ecuación de la especie química.

Como en este estudio se desea simular una fuga de amoníaco en un estado bifásico (gas y líquido); para resolver las ecuaciones de transporte de este problema existen modelos que son: eulerianos-eulerianos y euleriano-lagrangeanos, que más adelante se explicarán en que consisten, así como serán resueltas las ecuaciones tanto para la fase continua (gas) como para la fase dispersa (líquido).

Por último se hace una revisión general de la turbulencia como introducción al modelo k-ε que es el que se utilizó en este trabajo.

2.2 Continuidad

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (2.1)$$

donde \vec{v} y ρ son la velocidad y la densidad instantáneas de la mezcla no reactiva respectivamente.

2.3 Conservación de la cantidad de movimiento

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}' + \rho \vec{f}_m \quad (2.2)$$

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 [4]:

$$\vec{\tau}' = \mu(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) + (\mu_v - 2/3\mu)(\nabla \cdot \vec{v})\vec{\delta} \quad (2.3)$$

donde μ es la viscosidad molecular de la mezcla, μ_v es el coeficiente de viscosidad volumétrico y $\vec{\delta}$ es el tensor delta de Kronecker [4][2]. El coeficiente de viscosidad volumétrico, μ_v , es nulo para los gases monoatómicos. Por lo general, el coeficiente de viscosidad volumétrico se desprecia [3].

Si se sustituye la ecuación (2.3) en (2.2), se obtienen las ecuaciones de Navier- Stokes:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{v})\vec{\delta} \right) \right] + \rho \vec{g} \quad (2.4)$$

2.4 Conservación de las especies

En una mezcla de N especies, la fracción másica de una especie química α es:

$$Y_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_T} \quad (2.5)$$

donde m_α 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 (2.5), la suma de todas las fracciones másicas de las especies es uno. $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1$.

La conservación de la especie α se expresa, en términos de la fracción másica por la ecuación:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_\alpha) = -\nabla \cdot \vec{J}_\alpha + S_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots, N \quad (2.6)$$

donde \vec{J}_α es el flujo difusivo y S_α es la tasa de formación neta de la especie α . Para satisfacer la ecuación de continuidad (2.1), se cumple que $\sum_{\alpha=1}^N S_\alpha = 0$ y $\sum_{\alpha=1}^N \vec{J}_\alpha = 0$. El flujo difusivo de la especie α , \vec{J}_α se trata más adelante.

Puesto que no se va a considerar que el amoniaco reaccione, el término de la tasa de reacción química es cero ($S_\alpha = 0$).

2.5 Conservación de la energía total

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

$$e = u + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \quad (2.7)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(u + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \vec{v} \left(u + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \right) \right] = \nabla \cdot (\vec{\tau}' \cdot \vec{v}) - \nabla \cdot (p\vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_e + \dot{Q}_r \quad (2.8)$$

donde \vec{J}_e es el flujo difusivo de calor y \dot{Q}_r es el intercambio de calor por radiación. En la ecuación (2.8), 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:

$$h = u + \frac{p}{\rho} \quad (2.9)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(h + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \right) \right] + \nabla \cdot \left[\rho \vec{v} \left(h + \frac{1}{2}|\vec{v}|^2 + U \right) \right] = \frac{Dp}{Dt} + (\vec{\tau}' : \nabla \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_h + \dot{Q}_r \quad (2.10)$$

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

En flujos de baja velocidad, el número de Mach ($Ma = \bar{v}_o / \sqrt{\gamma R_c T_o}$, donde γ es la relación entre los calores específicos a presión y a volumen constante) es pequeño $Ma \ll 1$, la energía cinética comparada con la entalpía es despreciable [145][4].

Como se verá en el siguiente capítulo, en el presente trabajo no se estudia la zona cercana a la fuga donde Ma puede ser grande, por lo que el flujo se comienza a estudiar cuando se ha expandido y su velocidad es relativamente baja aunque 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 [141][3], que no es el caso a analizar en esta Tesis.

El número de Eckert, $Ec = \bar{v}_o^2 / CpT_o$ 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 Φ_v se puede despreciar.

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

2.6 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:

$$\rho = \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{\rho_{\alpha}}} \quad (2.11)$$

Si se supone una mezcla de gases ideales:

$$\rho = \frac{p}{RT \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_{\alpha}}{W_{\alpha}}} \quad (2.12)$$

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

$$h = \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} h_{\alpha} \quad (2.13)$$

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

$$h_{\alpha} = \int_{T_o}^T Cp_{\alpha} T' dT' + \Delta h_{f,\alpha} \quad (2.14)$$

donde Cp_{α} es el calor específico a presión constante de la especie α , T_o es la temperatura de referencia y $\Delta h_{f,\alpha}$ es la entalpía de formación de la especie α , definida como el calor liberado cuando un kilomol de sustancia es formado a partir de sus elementos en el estado estándar.

El flujo difusivo (\bar{J}_{α}), se produce por gradiente de especies, de temperatura (efecto Soret), y de presión [4]. El flujo difusivo (\bar{J}_{α}) se expresa según la ley de Fick, que se escribe como [3]:

$$\bar{J}_\alpha = \frac{\rho W_\alpha}{W_m^2} \sum_{\beta \neq \alpha}^N D_{\alpha\beta} W_\beta \nabla X_\beta \quad (2.15)$$

donde los subíndices α y β indican las especies químicas α y β , $D_{\alpha\beta}$ es el coeficiente de difusión binario, X_α es la fracción molar y W_m es igual a $\sum_{\alpha}^N X_\alpha W_\alpha$. Generalmente esta componente de flujo difusivo se suele aproximar con la expresión:

$$\bar{J}_\alpha = -D_\alpha^M \rho \frac{Y_\alpha}{X_\alpha} \nabla X_\alpha \quad (2.16)$$

donde D_α^M es el coeficiente de difusión medio de la especie α en la mezcla de especies, aunque en este caso no se trabaja con distintas especies, se puede ver que estos términos al final de cuentas son despreciables. El coeficiente D_α^M se puede calcular a partir del coeficiente de difusión binario, $D_{\alpha\beta}$:

$$D_\alpha^M = \frac{1 - Y_\alpha}{\sum_{\beta \neq \alpha}^N x_\beta / D_{\alpha\beta}} \quad (2.17)$$

El flujo difusivo de calor, \bar{J}_h se produce por conducción de calor, por el efecto Dufour y por el flujo difusivo de la especie; por lo tanto el término (\bar{J}_h) se expresa con la ley de Fourier:

$$\bar{J}_h = -k \nabla T \quad (2.18)$$

donde k es la conductividad térmica de la mezcla y T es la temperatura.

El número de Schmidt de la especie α y Sc_α , se define como:

$$Sc_\alpha = \frac{\mu}{D_\alpha \rho} \quad (2.19)$$

El flujo difusivo de la especie J_α , en términos del número de Schmidt se puede describir como:

$$\bar{J}_\alpha = -\Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha \quad \Gamma_\alpha = \frac{\mu}{Sc_\alpha} = \rho D_\alpha \quad (2.20)$$

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:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v}) = 0 \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{v}) + \nabla \cdot (\rho\bar{v}\bar{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \bar{v})\bar{\delta} \right) \right] + \rho\bar{g} \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \nabla \cdot (\rho\bar{v}Y_\alpha) = \nabla \cdot \Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha + S_\alpha \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho\bar{v}h) = -\nabla \cdot \bar{J}_h + \bar{Q}_R + \tau'' \cdot \nabla v \quad (2.24)$$

Cuando C_p puede suponerse constante, la expresión (2.18) se puede escribir como:

$$\bar{J}_h = -\frac{k}{C_p} \nabla h \quad (2.25)$$

El número de Prandtl, Pr , Se define como:

$$Pr = \mu \frac{C_p}{k} \quad (2.26)$$

En términos del número de Prandtl, la expresión 2.18 se puede escribir como:

$$\bar{J}_h = -\Gamma_h \nabla h \quad \Gamma_h = \frac{\mu}{Pr} \quad (2.27)$$

2.7 Promediado de las ecuaciones

Para el flujo analizado en esta Tesis, como en la mayoría parte de los problemas de interés práctico, se tiene características turbulentas. Una de las características de los flujos turbulentos es la variación de las propiedades del fluido en forma aleatoria e irregular tanto en el espacio como en el tiempo.

El promedio de las ecuaciones instantáneas de conservación es una de las alternativas para la simulación de flujos turbulentos, ya que 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 reemplacen los términos no cerrados.

En flujos con densidad variable se pueden usar dos tipos de promedio. Uno es el promedio de Reynolds, no ponderado con la densidad, usado para flujos con densidad constante, y el otro es el propuesto por Favre [5], el cual se ocupa de la densidad variable, por lo que se considera como ponderado.

Como ejemplo, se representará a cualquier propiedad transportada, tales como la fracción másica de la especie Y_α , la entalpía h y las

componentes de velocidad, \bar{v} en el método de Favre, con el símbolo Φ . Los valores instantáneos de estas propiedades son escritos en términos de un promedio y una fluctuación turbulenta:

$$\Phi = \bar{\Phi} + \Phi' \quad (2.28)$$

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi'' \quad (2.29)$$

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

$$\bar{\Phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \Phi^{(i)} \quad \text{Promedio muestral de Reynolds} \quad (2.30)$$

$$\tilde{\Phi} = \frac{1}{\bar{\rho}} \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \rho^{(i)} \Phi^{(i)} \quad \text{Promedio muestral de Favre} \quad (2.31)$$

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

De las definiciones anteriores:

$$\overline{\phi'} = 0 \quad \overline{\rho\Phi''} = 0 \quad \overline{\Phi''} \neq 0 \quad \overline{\rho\phi'} \neq 0 \quad (2.32)$$

Con la definición de los dos promedios se obtiene:

$$\bar{\Phi} = \tilde{\Phi} + \overline{\Phi''} \quad (2.33)$$

$$\overline{\Phi''} = -\frac{\overline{\rho'\Phi''}}{\bar{\rho}} \quad (2.34)$$

$$\overline{\rho'\Phi''} = \overline{\rho'\Phi'} \quad (2.35)$$

$$\overline{u_i'\phi'} = \overline{u_i''\phi''} - \frac{\overline{\rho'u_i''\phi''}}{\bar{\rho}} + \overline{u_i''\phi''} \quad (2.36)$$

Uno de los motivos y ventajas para aplicar el método de Favre en las ecuaciones instantáneas de transporte, es que se obtiene como resultado una forma más sencilla en las ecuaciones, las cuales no incluyen correlaciones con fluctuaciones de la densidad en las ecuaciones resultantes.

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

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\bar{v}) = 0 \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\bar{v}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\bar{v}\bar{v}) = -\nabla \cdot \bar{p} + \nabla \cdot \left[\underbrace{\mu \left(\nabla \bar{v} + (\nabla \bar{v})^T - \frac{2}{3} (\nabla \bar{v}) \bar{\delta} \right)}_I \right] - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\bar{v}''\bar{v}'')}_{II} + \bar{\rho}\bar{g} \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\bar{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\bar{v}\bar{Y}_\alpha) = \underbrace{\nabla \cdot \bar{\Gamma}_\alpha \nabla \bar{Y}_\alpha}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\bar{v}''\bar{Y}''_\alpha)}_{II} + \bar{S}_\alpha \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{h}) + \nabla \cdot (\rho \tilde{v} \tilde{h}) = \underbrace{-\nabla \cdot \tilde{J}_h}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\rho \tilde{v}'' \tilde{h}'')}_{II} \quad (2.40)$$

Si el promedio de Favre se aplica en la ecuación homogénea se obtiene [3]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\rho \tilde{v} \tilde{\phi}_z) = \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\Gamma} \nabla \tilde{\phi}_z)}_I - \underbrace{\nabla \cdot (\rho \tilde{v}'' \tilde{\phi}_z'')}_{II} \quad (2.41)$$

Las ecuaciones anteriores son muy similares en forma a las correspondientes ecuaciones instantáneas, pero con un término adicional $\overline{u_i'' \Phi''}$, el cual involucra las fluctuaciones de la velocidad y el escalar Φ , que representa físicamente el transporte convectivo de Φ por movimientos turbulentos. En flujos turbulentos, el término (I) de las ecuaciones anteriores es generalmente despreciable frente al término (II). Por lo tanto, las ecuaciones (2.37), (2.38), (2.39), (2.40) y (2.41) se escriben como:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \tilde{v}) = 0 \quad (2.42)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{v}) + \nabla \cdot (\rho \tilde{v} \tilde{v}) = -\nabla \cdot \bar{p} + \nabla \cdot (\rho \tilde{v}'' \tilde{v}'') + \rho \bar{g} \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{Y}_\alpha) + \nabla \cdot (\rho \tilde{v} \tilde{Y}_\alpha) = \nabla \cdot (\rho \tilde{v}'' \tilde{Y}_\alpha'') + \bar{S}_\alpha \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{h}) + \nabla \cdot (\rho \tilde{v} \tilde{h}) = -\nabla \cdot (\rho \tilde{v}'' \tilde{h}'') \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \tilde{\phi}_z) + \nabla \cdot (\rho \tilde{v} \tilde{\phi}_z) = -\nabla \cdot (\rho \tilde{v}'' \tilde{\phi}_z'') \quad (2.46)$$

Si el flujo es de baja velocidad ($Ma \ll 1$) generalmente se supone que las fluctuaciones de la presión son despreciables [6]. Por lo tanto, los valores medios de la densidad y la tasa de reacción química se pueden expresar como función de una presión de referencia p_o :

$$\bar{\rho} = p_o \left(R_c T \sum_{\alpha=1}^N \frac{Y_\alpha}{W_\alpha} \right)^{-1} \quad (2.47)$$

$$\bar{S}_\alpha(p, \rho, \phi_\alpha) = S_\alpha(p, \bar{\rho}, \tilde{\phi}_\alpha) \quad (2.48)$$

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

Los flujos turbulentos $\overline{v'' \Phi''}$, de la ecuaciones (2.43), (2.44) y (2.45) son términos desconocidos que requieren modelización. El cierre del término $\rho \overline{v'' v''}$ de la ecuación media de cantidad de movimiento (2.43) se trata en el apéndice B.

El tratamiento del término $\bar{\rho} \bar{v}'' \phi''_{\alpha}$, se puede consultar en Jones *et al* [63][6] y [64][7], y Lindstedt [8]

Para hacer el cierre de las ecuaciones (2.42), (2.43), (2.44) y (2.45) hace falta, también conocer el valor medio de la densidad $\bar{\rho}$ y como no es un mezcla reactiva, la tasa de reacción de la especie química, $\bar{S}_{\alpha} = 0$, por lo que la densidad se pueden escribir como:

$$\bar{\rho} = \rho(\bar{T}, \bar{\phi}_1, \dots, \bar{\phi}_N) \quad (2.49)$$

2.8 Evaporación

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

$$Ev = K_m A_s (C_{sat} - C_g) \rho \quad (2.50)$$

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. ρ 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 esta dado por:

$$K_m = Sh \frac{D}{D_p} \quad (2.51)$$

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 conociendo la fracción volumétrica, ya sea de la fase continua (gas) o la fase dispersa (líquido) y calculando cuanta cantidad de líquido pasa por el área transversal por donde pasa el flujo mediante las expresiones siguientes:

$$G = A v \quad (2.52)$$

$$G_{liq} = X_{liq} G \quad (2.53)$$

$$A_{liq} = \frac{G_{liq}}{v} \quad (2.54)$$

$$n_p = \frac{A_{liq}}{A_p} \quad (2.55)$$

donde: G es el gasto volumétrico considerando a la fase líquida y a la gaseosa, A es el área transversal por donde pasa el fluido, v es la velocidad del fluido (2.52); G_{liq} y X_{liq} son el gasto volumétrico y la fracción volumétrica respectivamente de la parte líquida (2.53 y 2.54); A_{liq} , es el área por donde pasa la fase dispersa, A_p y n_p son el área de un partícula y el número total de partículas respectivamente (2.55).

2.9 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 esta dada por:

$$\mu_{total} = \mu + \mu_{turbulenta} \quad (2.56)$$

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 ε .

$$\text{Energía} \quad \frac{\partial k}{\partial t} + u_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = (P_k - \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial j} \left(\frac{v_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) \quad (2.57)$$

$$\text{Disipación} \quad \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial j} \left(\frac{v_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \quad (2.58)$$

donde

$$P_k = v_T \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left(k + v_T \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (2.59)$$

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 ε 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.

2.10 Propiedades de la mezcla [10]

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

$$\phi_m = (1 - \sum(P T_i)) * \phi_c + \sum(P T_i) * \phi_i \quad (2.60)$$

ϕ_m = Propiedad de la mezcla

ϕ_c = Propiedad de la fase continúa.

ϕ_i = Propiedad de la fase dispersa.

2.11 Ecuaciones para la fase dispersa.

En los subcapítulos anteriores se han tratado las ecuaciones que gobiernan al flujo viscoso incompresible. Tales ecuaciones son aplicadas en modelos eulerianos-eulerianos por su facilidad de resolver y representar flujos de una sola fase, aunque también han sido aplicados a flujos bifásicos pero con ciertas restricciones y asumiendo ciertas suposiciones y comportamientos esperados.

En la realidad la mayoría de los flujos pueden llegar a presentar más de una sola fase, y los modelos eulerianos-eulerianos no pueden llegar a representar en su totalidad el comportamiento de las propiedades de los flujos, pues las propiedades pueden variar entre las fases que componen al fluido. Por tanto se requieren de otros modelos que puedan calcular, resolver y representar estas propiedades.

Por ello existen modelos Eulerianos-Lagrangianos que son más adecuados para la solución de fluidos con distintas fases presentes. Estos modelos pueden calcular, resolver y representar las propiedades de las distintas fases tomando en cuenta las interacciones que se lleguen a dar entre estas.

Un modelo euleriano-lagrangiano utiliza las ecuaciones explicadas en los subtemas anteriores, para calcular, representar y resolver las propiedades de la fase continua (gas) mientras que para las propiedades de la fase dispersa (gotas, partículas y burbujas) ocupa ecuaciones lagrangeanas que son exclusivas para estas fases.

Para el este trabajo de tesis se ocupará un programa de simulación numérica llamado PHOENICS (Parabolic Hyperbolic Or Elliptic Numerical Code Series) el cual es una herramienta que facilita los cálculos de las ecuaciones en la mecánica de fluidos, que además tiene otros programas entre los cuales se encuentra uno llamado GENTRA (General Tracker) el cual es recomendado en el uso de fluidos de más de una sola fase, pues toma en cuenta las propiedades de la fase dispersa y continua, así como las interacciones entre ellas, con la finalidad de representar de una manera más completa el comportamiento del fluido.

Las ecuaciones lagrangeanas aplicadas en GENTRA y por ende utilizadas en esta tesis se presentan a continuación.

2.12 Ecuaciones lagrangeanas [11]

En la simulación del comportamiento de una partícula (gotas o burbujas) las ecuaciones lagrangeanas deben describir la evolución en la posición, velocidad (momento), masa y temperatura (entalpía) para cada partícula que se desea simular, por lo que en adelante se hará una breve explicación de cada de las ecuación que están involucradas en el cálculo tales propiedades.

2.12.1 Ecuación de Posición.

La evolución de la evolución de la partícula es determinada a través de la solución de la siguiente ecuación:

$$\frac{dx_p}{dt} = U_p \quad (2.61)$$

donde x_p es la posición de la partícula y U_p es la velocidad de la partícula.

2.12.2 Ecuación de cantidad de movimiento [11]

Generalmente, la velocidad de la partícula es determinada a partir de la siguiente ecuación:

$$m_p \frac{dU_p}{dt} = D_p (U - U_p) + m_p b g - V_p \nabla_p \quad (2.62)$$

donde m_p es la masa de la partícula; D_p es una función de arrastre definida más adelante; U es la velocidad instantánea de la fase continua, la cual se compone a partir de la siguiente ecuación: $U = U_c + U_c'$, donde U_c es la velocidad promedio de la fase continua y U_c' es la fluctuación turbulenta de la velocidad debida al modelo de turbulencia seleccionado; g es la aceleración de la gravedad; V_p es el volumen de la partícula y ∇_p es el gradiente de presión de la fase continua.

El término $D_p (U - U_p) + m_p b g - V_p \nabla_p$ representa la fuerza de arrastre de la fase continua sobre la partícula y los siguiente término representa la fuerza gravitacional.

La función de arrastre D_p se compone de la siguiente forma:

$$D_p = 0.5 \rho A_p C_D |U - U_p| \quad (2.63)$$

Donde A_p es el área proyectada por la partícula; C_D es el coeficiente de arrastre, el cual se obtiene a partir de la siguiente ecuación:

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}) + \frac{0.42}{1 + 4.25 E^{04} Re^{-1.16}} \quad (2.64)$$

donde Re es el número de Reynolds.

2.12.3 Ecuación de masa para la partícula

La evolución de la masa de la partícula es descrita por la siguiente ecuación:

$$\frac{dm_p}{dt} = \pi d_p \frac{k_v}{Cp_v} Nu \ln(1 + B_M) \quad (2.65)$$

donde d_p es el diámetro de la partícula; k_v es la conductividad térmica del vapor producida por la evaporación de un gota; Cp_v es la capacidad térmica específica de ese vapor; Nu es el número de Nusselt y B_M es el número de transferencia de masa, el cual

representa la fuerza impulsora en el proceso de transferencia de masa.

El número de Nusselt se calcula de la siguiente manera:

$$Nu = 2(1 + 0.3Re^{0.5} Pr^{0.33})F \quad (2.66)$$

donde Pr es el número de Prandtl para la fase continua y F es la corrección de Frossling para la transferencia de masa dada por:

$$F = \frac{1}{B_M} \ln(1 + B_M) \quad (2.67)$$

El número de transferencia de masa B_M se obtiene mediante la expresión:

$$B_M = \left[\frac{X_{VS} - X_{V\infty}}{1 - X_{VS}} \right] \quad (2.68)$$

donde X_{VS} es la fracción másica de vapor en la superficie de la gota y $X_{V\infty}$ es la fracción másica de vapor en los alrededores de la gota calculada de la siguiente forma:

$$X_{VS} = \left[1 + \left(\frac{P}{P_{VS}} - 1 \right) \frac{W_C}{W_V} \right]^{-1} \quad (2.69)$$

donde P es la presión total en los alrededores de la gota; P_{VS} es la presión parcial del vapor en la superficie de la gota a las condiciones de saturación definida por la temperatura de la gota; W_C es el peso molecular del fluido circundante y W_V es el peso molecular del vapor.

2.12.4 Ecuación de la entalpía para la partícula

La temperatura de la partícula es determinada de la solución de la entalpía de la partícula que se escribe de la siguiente manera:

$$m_p C_{p_p} \frac{dT_p}{dt} = m_p L \frac{df_s}{dt} + H_{fg} \frac{dm_p}{dt} + \alpha(T_s - T_p) \quad (2.70)$$

donde Cp_p es la capacidad térmica específica de la partícula; L es el calor latente de solidificación; H_{fg} es el calor latente de evaporación; f_s es la proporción de la fase en la partícula (fracción sólida); α es el coeficiente de transferencia de calor entre la partícula y el fluido de los alrededores; T_p es la temperatura de la partícula y T_g es la temperatura del fluido de los alrededores.

La capacidad térmica específica de la partícula puede ser función de la temperatura y la composición, así que:

$$Cp_p = f_s(Cp_{ps}(T_p)) + (1 - f_s)(Cp_{pl}(T_p)) \quad (2.71)$$

donde Cp_{ps} y Cp_{pl} son los calores específicos de las fases sólido y líquido de la partícula respectivamente y son función de la temperatura de la partícula.

El calor latente de solidificación de la partícula esta definida como la diferencia de la entalpía total de las fases sólida y líquida a una temperatura dada y se calcula con la siguiente ecuación:

$$L = h_{l0} + \int_0^T Cp_{pl} dT - (h_{s0} - \int_0^T Cp_{ps} dT) \quad (2.72)$$

donde h_{s0} es la entalpía de la fase sólida a la temperatura de 0.0 [K] y h_{l0} es la entalpía de la fase líquida a la misma temperatura de referencia.

En el caso en que las temperaturas sean iguales, el calor latente de solidificación es independiente de la temperatura e igual a $h_{l0} - h_{s0}$

La fracción sólida de la partícula es determinada de la siguiente manera:

$$f_s = \left[\frac{T_L - T_p}{T_L - T_s} \right] m \quad (2.73)$$

donde T_s es la temperatura solidus de la partícula; T_L es la temperatura líquidus de la partícula y m es el índice.

El coeficiente de transferencia de calor se obtiene por:

$$\alpha = \pi k_c N u d_p \quad (2.74)$$

donde k_c es la conductividad de la fase continua.

El uso de la ecuación de la entalpía solo es aplicable dependiendo del tipo de partículas, las cuales son:

1. Partículas que intercambian calor
2. Partículas que se solidifican o se funden
3. Gotas que se vaporizan

Para el caso de esta tesis el tipo de partícula que se eligió fueron gotas que se vaporizan, en las que la ecuación de la entalpía queda:

$$m_p C p_p \frac{dT_p}{dt} = H_{fg} \frac{dm_p}{dt} + \alpha (T_g - T_p) \quad (2.75)$$

2.13 Modelo estocástico de turbulencia [11]

Como anteriormente se había mencionado, en la mayoría de los flujos reales interviene el fenómeno de la turbulencia, el cual en algunos casos trae beneficio pero por otro lado puede llegar a causar ciertos problemas.

Principalmente la turbulencia genera en cualquier punto de un fluido un cambio en las propiedades debido al movimiento aleatorio de éste. A estos cambios se les denomina cambios estocásticos. Por lo que al querer estudiar las propiedades de un fluido, es necesario aplicar al fluido un modelo que prevea todas estas variaciones. Tal modelo es el modelo estocástico de turbulencia que a continuación se describirá.

Es un modelo en el que se toma en cuenta todos los efectos que intervienen en la dispersión de partículas y que son ocasionadas por las fluctuaciones turbulentas de la velocidad de la fase continua del fluido de estudio.

Este modelo usa, como la velocidad de la fase continua en el término de la fuerza de arrastre de la ecuación, una suma del promedio de velocidad U_c y una componente de fluctuación U'_c :

$$U = U_c + U'_c \quad (2.76)$$

donde U_c es la velocidad promedio obtenida de las ecuaciones de la fase continua y U'_c es la componente de fluctuación que es calculada asumiendo que cada componente sigue una distribución normal con un valor medio de 0.0 y una desviación estándar de:

$$\sigma = \sqrt{\frac{2K}{3}} \quad (2.77)$$

donde K es la energía cinética turbulenta.

La componente de fluctuación U'_c es asumida para actuar sobre un intervalo de tiempo Δt_s el cual es el mínimo de:

- a) un Δt_e , el cual es el tiempo de vida del remolino local por el cual se asume que a traviesa la partícula.
- b) Un Δt_r , el cual es el tiempo que le toma a la partícula atravesar el remolino.

El tiempo de vida Δt_e es calculado como:

$$\Delta t_e = \frac{l_e}{|U'_c|} \quad (2.78)$$

donde l_e es el tamaño del remolino y se calcula por:

$$l_e = \frac{C_\mu 3/4 K^{3/2}}{\varepsilon} \quad (2.79)$$

donde: ε es el porcentaje de disipación de la energía cinética turbulenta y C_μ es una constante en el modelo de turbulencia.

El tiempo de transito Δt_r es dado por:

$$\Delta t_r = \frac{l_e}{|U - U_p|} \quad (2.80)$$

CAPÍTULO 3

MÉTODO DE RESOLUCIÓN

3.1 Introducción

En este capítulo se presenta el método de solución de las ecuaciones de transporte, descritas a mayor detalle en el capítulo 2. Primero se mostrará el método de solución para las ecuaciones eulerianas y posteriormente el de las ecuaciones lagrangeanas.

3.2 Método de solución para las ecuaciones eulerianas

3.2.1 Método de volúmenes finitos

Las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y del modelo de turbulencia, introducidas en el capítulo 2, se pueden representar mediante una ecuación general, donde la variable dependiente está representada por $\tilde{\phi}$, la cual representa el tipo de variable que se quiere calcular:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\phi}) + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\phi}) - \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \tilde{\phi}) = \bar{S}_\phi \quad (3.1)$$

donde Γ_ϕ es el coeficiente de difusión y \bar{S}_ϕ es el término fuente. Los términos del lado derecho de la ecuación (3.1) son el término transitorio, convectivo y de difusión respectivamente. Los términos Γ_ϕ y \bar{S}_ϕ están especificados para cada variable $\tilde{\phi}$. (Para la ecuación de continuidad, $\tilde{\phi} = 1$).

La ecuación (3.1) se puede discretizar con el método de volúmenes finitos. Con este método, el dominio se divide en pequeños volúmenes de control (figura 3.1), 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:

$$a_p \tilde{\phi}_p = \sum_{i,I=E,W,N,S,H,L} a_i \tilde{\phi}_i + a_T \tilde{\phi}_T + B \quad (3.2)$$

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 (3.2) puede consultarse en numerosos textos de fluidodinámica computacional, por ejemplo en Patankar [12], Ferziger y Peric [13].

En el caso de una malla cartesiana, decalada (“staggered”) y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), un volumen de control bidimensional (por sencillez) se muestra en la figura 3.2. (el espesor de la celda en dirección z puede considerarse la unidad.) En una malla decalada, las variables escalares como por ejemplo, la presión, entalpía o las fracciones másicas, 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 3.2 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 inglés) 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 .

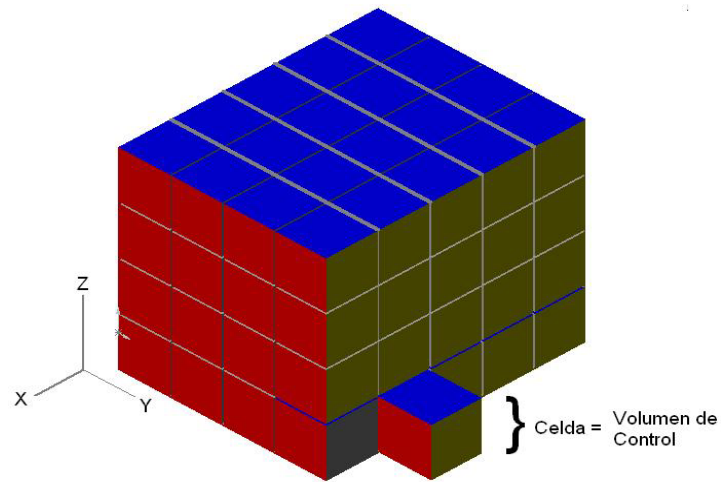


Figura 3.1 Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

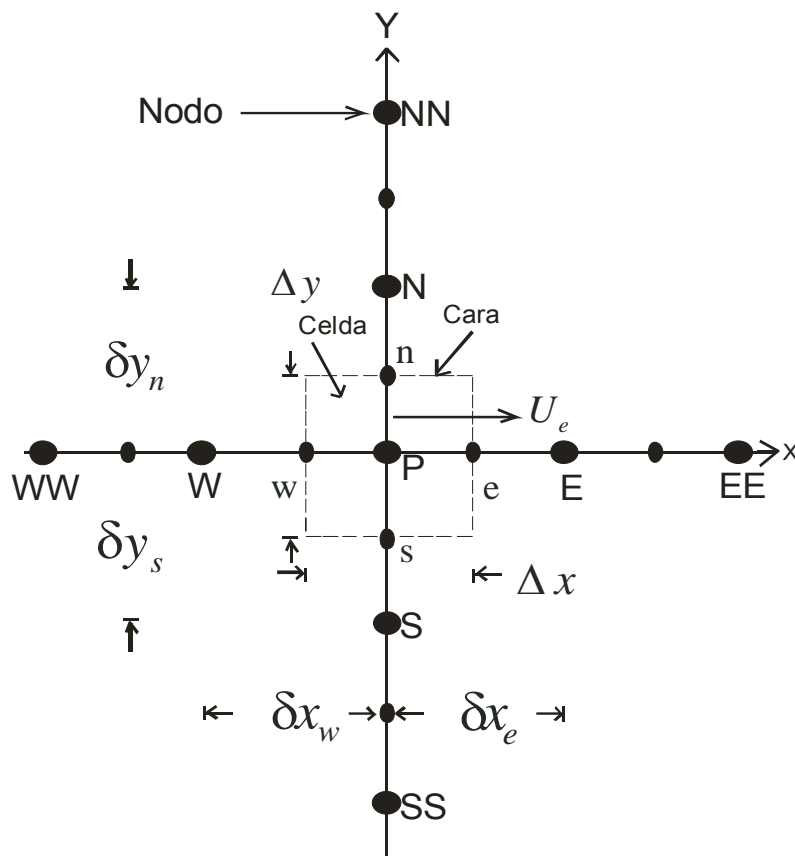


Figura 3.2 Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional

A continuación, se presentan los términos de la ecuación discretizada (3.2).

Definiendo los símbolos F , D , y Pe como:

$$F = \bar{\rho} \bar{v}_i, \quad D = \frac{\Gamma}{\delta_i}, \quad Pe = \frac{F}{D} \quad (3.3)$$

donde \bar{v}_i es la velocidad en la cara i , δ_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, \bar{v} es la velocidad en la cara i y x_i es la distancia ente el nodo y la cara i . (Las expresiones F y D representan el efecto de los términos convectivo y difusivo de la ecuación de transporte (3.1) respectivamente.)

Los coeficientes a_i de la ecuación (3.2) son:

$$a_i = D_i f(|Pe|) + \max(-F_i, 0) \quad (3.4)$$

Los valores F y D en la cara de la celda de la ecuación (3.4) son:

$$F_i = (\bar{\rho} \bar{v})_i \Delta_i, \quad D_i = \frac{\Gamma_i \Delta_i}{(\delta_i)} \quad i = n, s, e, w \quad (3.5)$$

donde Δ_i es la longitud de la cara i .

Para determinar F_i se necesita conocer $\bar{\rho}$ y \bar{v}_i en la cara de la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (3.1) requiere también el conocimiento de la variables escalar, $\bar{\phi}$, en la cara de la celda. La velocidad \bar{v}_i está calculada en la cara si la malla es decalada; pero $\bar{\rho}$ y $\bar{\phi}$ están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes a_i de la ecuación discretizada (3.2). La obtención de estas variables en la cara de la celda es importante en precisión y convergencia de la solución. El cálculo de $\bar{\rho}$ y $\bar{\phi}_i$ da lugar a los llamados esquemas de discretización. La función $f(|Pe|)$ de la ecuación (3.4) depende del esquema de interpolación. Por ejemplo, en el esquema de diferencias desplazadas, $f(|Pe|) = 1$, y para el sistema híbrido [12]:

$$f(|Pe|) = \max(0, 1 - 0.5|Pe|) \quad (3.6)$$

En el apéndice A se presentan algunos de los esquemas de discretización lineales que se utilizan en esta Tesis para la

discretización del término convectivo de las ecuaciones de cantidad de movimiento y del modelo de turbulencia.

El coeficiente para el término transitorio es:

$$a_T = \frac{\bar{\rho}_T \Delta x \Delta y}{\Delta t} \quad (3.7)$$

Para el cálculo del término D_i (3.5) se necesita obtener el coeficiente de difusión, Γ , en la cara de la celda. EL coeficiente Γ 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:

$$\Gamma_e = \frac{\Delta x (\Gamma_P + \Gamma_E)}{2 \delta x_e} \quad \Gamma_e = \frac{2 \delta x_e}{\Delta x \left(\frac{1}{\Gamma_P} + \frac{1}{\Gamma_E} \right)} \quad (3.8)$$

El término fuente de la ecuación general (3.1), \bar{S}_ϕ , se linealiza como:

$$\bar{S}_\phi = \bar{S}_{\phi,c} + \bar{S}_{\phi,v} \tilde{\phi}_P \quad (3.9)$$

donde el término $\bar{S}_{\phi,v}$ se elige de acuerdo a la relación existente entre \bar{S}_ϕ 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 (3.2) son:

$$B = \bar{S}_{\phi,c} \Delta x \Delta y + a_T \tilde{\phi}_T \quad (3.10)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_T - \bar{S}_{\phi,v} \Delta x \Delta y \quad (3.11)$$

La ecuación (3.2) se aplica en cada celda del dominio, para cada $\tilde{\phi}$ y para cada paso temporal Δt , 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) ([111][14], [110][12] y [133][15]). 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; la diferencia 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 la dominancia diagonal de la matriz de coeficientes al agregar a la ecuación de cualquier variable $\tilde{\phi}$ el término fuente:

$$\bar{S}_{\phi,r} = \frac{\bar{\rho}V_P}{\Delta t_f} (\tilde{\phi}_P^{(n-1)} - \tilde{\phi}_P^{(n)}) \quad (3.12)$$

Donde V_P es el volumen de la celda P , Δt_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:

$$\tilde{\phi}_P^{(n)} = \alpha \tilde{\phi}_P^{sol} + (1 - \alpha) \tilde{\phi}_P^{(n-1)} \quad (3.13)$$

donde α 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, α , 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 esta Tesis, se usa el código de fluido-dinámica computacional PHOENICS [86][16] para resolver las ecuaciones que describen la aerodinámica del flujo: continuidad, cantidad de movimiento y turbulencia. Al código PHOENICS se le ha acoplado el método de GENTRA (General Tracker) el cual resuelve las ecuaciones lagrangeanas que son aplicables a la fase dispersa del fluido en estudio y se tratará en la siguiente sección.

Para el este trabajo de tesis se ocupa un programa de simulación numérica llamado PHOENICS (Parabolic Hyperbolic Or Elliptic Numerical Code Series) el cual usa un código de fluido-dinámica computacional que es una herramienta que facilita los cálculos de las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y turbulencia para la fase continua. PHOENICS tiene un software que se acopla a él llamado GENTRA (General Tracker) el cual resuelve las ecuaciones lagrangeanas, presentadas en el capítulo 2, para la fase dispersa, él cual será tratado en la siguiente sección.

3.3 Gentra. [11]

GENTRA es un programa que permite el seguimiento de partículas (fase dispersa) para el estudio de fluidos bifásicos y simula el movimiento de éstas a través de un fluido (fase continua). Lo más interesante en este programa, es que toma en cuenta los cambios en las propiedades de las partículas y considera los efectos de la fase dispersa generados al interactuar con la fase continua.

Mientras PHOENICS se usa para el cálculo de las propiedades pertenecientes a la fase continua, GENTRA se ocupa de las propiedades de la fase dispersa. El acoplamiento de información entre ambas fases se hace, una vez que PHOENICS hace una iteración (barrida) para la fase continua, llama a GENTRA para que ésta calcule las propiedades de la fase dispersa tomando en cuenta las interacciones entre ambas fases; una vez que GENTRA realizó su cálculo, esa información es incorporada como términos fuente en las ecuaciones de la fase continua para la siguiente iteración de PHOENICS.

GENTRA proporciona información sobre trayectorias, propiedades como temperatura, densidad, diámetro, posición, etc. de cada una de las partículas que se requieran estudiar así como las interacciones que éstas tienen con obstáculos y objetos. Otra

posibilidad que muestra GENTRA es que se pueden elegir hasta 6 tipos de partículas a modelar tales como: trazadores, partículas rígidas, partículas isotérmicas, partículas que experimentan intercambios de calor con la fase continua, partículas que se funden o solidifican y gotas que se vaporizan. Para este trabajo de tesis se tomara a la fase dispersa como gotas que se vaporizan.

A continuación se describirá como se logra la integración de las ecuaciones lagrangeanas por parte de GENTRA.

La secuencia para la integración numérica de las ecuaciones para las partículas es:

- 1.- El paso temporal lagrangeano es calculado.
- 2.- La partícula es movida.
- 3.- Las propiedades de la partícula en la nueva posición son calculadas.
- 4.- Las fuentes de interfase son calculadas.

3.3.1 Cálculo del paso temporal lagrangeano.

El paso temporal lagrangeano es calculado por GENTRA como:

$$\Delta_{it} = \max(\tau_0, \min(\tau_1, \tau_2, \tau_3)) \quad (3.14)$$

donde τ_0 es el mínimo paso temporal cuyo valor es 1E-07 s; τ_1 es el tiempo mínimo de cruce de celda dividido por el mínimo número de paso temporal por celda, y es calculado por GENTRA tomando en cuenta la dimensión mínima de celda y la máxima componente de velocidad; τ_2 es el tiempo de relajación de la cantidad de movimiento y τ_3 es el máximo paso temporal.

3.3.2 Movimiento de la partícula

Después de calcular el paso temporal Δ_{it} , la partícula es movida por la integración de las ecuaciones de posición de la partícula. La ecuación de posición de la partícula es:

$$\frac{dx_p}{dt} = U_p \quad (3.15)$$

y es integrada como:

$$x_p^n = x_p^0 + U_p^0 \Delta t \quad (3.16)$$

donde n denota el valor al final del paso temporal; y 0 denota el valor al comienzo del paso temporal.

GENTRA tiene la capacidad de integrar las ecuaciones de posición tanto en el sistema cartesiano como en el sistema cilíndrico polar.

3.3.3 Integración de las ecuaciones de masa, cantidad de movimiento y entalpía.

Las ecuaciones para la masa, la cantidad de movimiento y la entalpía, pueden ser representadas de la siguiente forma generalizada:

$$\frac{d\xi}{dt} = A - B\xi \quad (3.17)$$

donde ξ representa la variable a ser resuelta, (por ejemplo, la entalpía, la masa o la cantidad de movimiento); A y B son constantes.

La ecuación es integrada sobre el paso temporal Δt tal que el valor al final del paso temporal, ξ^n , pueden ser expresada en términos de los valores al comienzo del paso temporal, ξ^0 , y de las constantes A y B, de la siguiente manera:

$$\xi^n = \xi^0 e^{-B\Delta t} + \frac{A}{B}(1 - e^{-B\Delta t}) \quad (3.18)$$

Si la constante en B es cero, empleando que la razón de cambio de ξ es independiente del valor de ξ , el usar la ecuación anterior resultaría una división entre cero. Por tanto en ese caso la ecuación 4.17 se integraría así:

$$\xi^n = \xi^0 + A\Delta t \quad (3.19)$$

La forma de las constantes en la ecuación 3.17, depende de la ecuación que está siendo resuelta.

3.3.3.1 Ecuación de cantidad de movimiento de la partícula.

$$\frac{dU_p}{dt} = \frac{D_p U_g}{m_p} + b_g - \frac{1}{\rho_p} \nabla p \quad (3.20)$$

de la cual, las constantes A y B de la ecuación 3.17 se definen como:

$$A = \frac{D_p}{m_p} U_g + b_g - \frac{1}{\rho_p} \nabla p \quad (3.21)$$

$$B = \frac{D_p}{m_p} \quad (3.22)$$

3.3.3.2 Ecuación de la masa de la partícula.

Para el caso de una partícula que se evapora en un ambiente y a una temperatura constante, la razón de cambio del área superficial de la partícula con el tiempo también constante. Esto es tomándolo en cuenta dentro del método empleado para la integración de la ecuación de la masa de la partícula, la cual es modelada en la forma de una ecuación para el porcentaje de cambio del área superficial de la partícula (d_{p^2}) quedando:

$$\frac{d(d_{p^2})}{dt} = \frac{-4k_v}{\rho_p C_{p_v}} Nu \ln(1 + B_M) \quad (3.23)$$

Ésta es integrada usando la ecuación 4.19 en la cual la constante A es igual al término de la derecha de la ecuación 4.23:

$$A = \frac{-4k_v}{\rho_p C_{p_v}} Nu \ln(1 + B_M) \quad (3.24)$$

La razón de cambio de la masa de la partícula es entonces deducida del cambio en el diámetro de la partícula.

3.3.3.3 Ecuación de la entalpía de la partícula.

La ecuación de la entalpía de la partícula en su forma más general es dada por la ecuación:

$$m_p C_{p_p} \frac{dT_p}{dt} = m_p L \frac{df_s}{dt} + H_{fs} \frac{dm_p}{dt} + \alpha(T_g - T_p) \quad (3.25)$$

Antes de integrar ésta, el término de fusión y solidificación es expresado en una forma más útil notando la relación entre la fracción sólida, f_s , y la temperatura de la partícula, T_p :

$$f_s = \left[\frac{T_L - T_p}{T_L - T_S} \right] m \quad (3.26)$$

La anterior ecuación puede ser diferenciada con respecto a la temperatura quedando:

$$\frac{df_s}{dT_p} = -m \left[\frac{(T_L - T_p)^{m-1}}{(T_L - T_s)^m} \right] \quad (3.27)$$

y el término original representando el porcentaje de cambio de facción sólida con el tiempo puede ser expresado como:

$$\frac{df_s}{dt_p} = -m \left[\frac{(T_L - T_p)^{m-1}}{(T_L - T_s)^m} \right] \frac{dT_p}{dt} \quad (3.28)$$

Esto puede ser sustituido dentro de la ecuación general para la entalpía de la partícula, la cual puede ser escrita en la forma de la ecuación general para la partícula (3.17):

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{\alpha T_g + H_{fg} \frac{dm_p}{dt}}{m_p [Cp + Lm + Q]} - \frac{\alpha T_p}{m_p [Cp + Lm + Q]} \quad (3.29)$$

donde:

$$Q = \frac{(T_L - T_p)^{m-1}}{(T_L - T_s)^m} \quad (3.30)$$

Que puede ser resuelta por la ecuación (3.18)

Para los tres tipos de partícula que involucran intercambio de calor, que están disponibles por GENTRA, algunos términos de la ecuación general de la entalpía no aparecen. Para cada tipo de éstas partícula, las ecuaciones de la entalpía quedan:

a) *Partículas que intercambian calor*

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{\alpha T_g}{m_p Cp} - \frac{\alpha T_p}{m_p Cp} \quad (3.31)$$

b) *Partículas que se solidifican y se funden*

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{\alpha T_g}{m_p [Cp + Lm + Q]} - \frac{\alpha T_p}{m_p [Cp + Lm + Q]} \quad (3.32)$$

c) *Gotas que se vaporizan*

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{\alpha T_g + H_{fg} \frac{dm_p}{dt}}{m_p C_p} - \frac{\alpha T_p}{m_p C_p} \quad (3.33)$$

3.3.3.4 Cálculo de los términos fuentes.

Como las partículas atraviesan cada celda, ocurre intercambio de masa, de cantidad de movimiento y entalpía. Por ejemplo, una partícula que viaja más rápido que el fluido que la rodea será desacelerada y transferirá cantidad de movimiento al fluido. Los términos fuentes deben ser adheridos a las ecuaciones de transporte para la fase continua para representar estas transferencias a partir de las siguientes ecuaciones:

1.- Transferencia de masa

$$S_m = \frac{\pi}{6} \sum \eta [\rho_p^0 (d_p^0)^3 - \rho_p^n (d_p^n)^3] \quad (3.34)$$

donde n denota los valores al final del paso temporal lagrangeano; 0 denota los valores al comienzo del paso temporal lagrangeano; η es el número del porcentaje de flujo de partículas por porción y Σ es la sumatoria sobre todo el paso temporal lagrangeano requerido por la partícula al atravesar la celda, y para todas las partículas.

La masa sumada a la ecuación de continuidad de la fase continua representa al fluido evaporado desde la superficie de las gotas. Una ecuación de transporte de PHOENICS es resuelta para la fracción másica de vapor y los términos fuente deben ser también adheridos a esta ecuación para tomar en cuenta el vapor sumado de las partículas. El término fuente en la fracción másica de vapor es idéntico al que es adherido a la ecuación de continuidad.

2.- Transferencia de cantidad de movimiento.

El término fuente de la cantidad de movimiento S_{mom} el cual aparece en las ecuaciones de cantidad de movimiento de la fase continua es igual al porcentaje de cambio del momentum de la partícula así como para cada partícula que a traviesa una celda y se denota por:

$$S_{mom} = \frac{\pi}{6} \sum \eta [\rho_p^0 V_p^0 (d_p^0)^3 - \rho_p^n V_p^n (d_p^n)^3] \quad (3.35)$$

donde V_p es la velocidad de la partícula integrada de la ecuación de momentum sin fuerzas.

3.- Transferencia de entalpía.

El término fuente de la entalpía, s_h , el cual aparece en la ecuación de temperatura o entalpía de la fase continua se define como:

$$S_h = \frac{\pi}{6} \sum \eta [\rho_p^0 h_p^0 (d_p^0)^3 - \rho_p^n h_p^n (d_p^n)^3] \quad (3.36)$$

donde h_p es la entalpía de la partícula relativa a un valor de cero a 0 [K].

3.3.3.5 Criterio de estancamiento

GENTRA automáticamente detecta si una partícula ha caído en una región de estancamiento, y parará el seguimiento de la partícula si no hay efectos de calor y transferencia de masa que sean considerados. El criterio de estancamiento es basado en la velocidad de la fase ($|U_c|$), la velocidad de la partícula ($|U_p|$) y una velocidad característica (U_{char}). El seguimiento de la partícula es abandonado si:

$$\frac{|U_c| + |U_p|}{U_{char}} \leq r \quad (3.37)$$

donde r es una constante.

La velocidad característica (U_{char}) es computada para cada paso temporal como el máximo de ($|U_c|$), ($|U_p|$) y el valor existente de (U_{char}).

3.3.3.6 Rebote de partícula

Cuando una partícula trata de cruzar dentro de un muro u obstáculo durante un paso temporal, GENTRA reducirá el paso temporal así que la partícula es localizada sobre el muro o superficie del obstáculo. Si el usuario ha especificado que la partícula está rebotando con un coeficiente de restitución dado, la velocidad de la partícula es modificada si:

- a) La componente de velocidad paralela al muro después del rebote es igual a la misma componente antes del rebote.

La componente de velocidad perpendicular al muro después del rebote es fijada hacia el negativo de la misma componente antes del rebote multiplicada por el coeficiente de restitución.

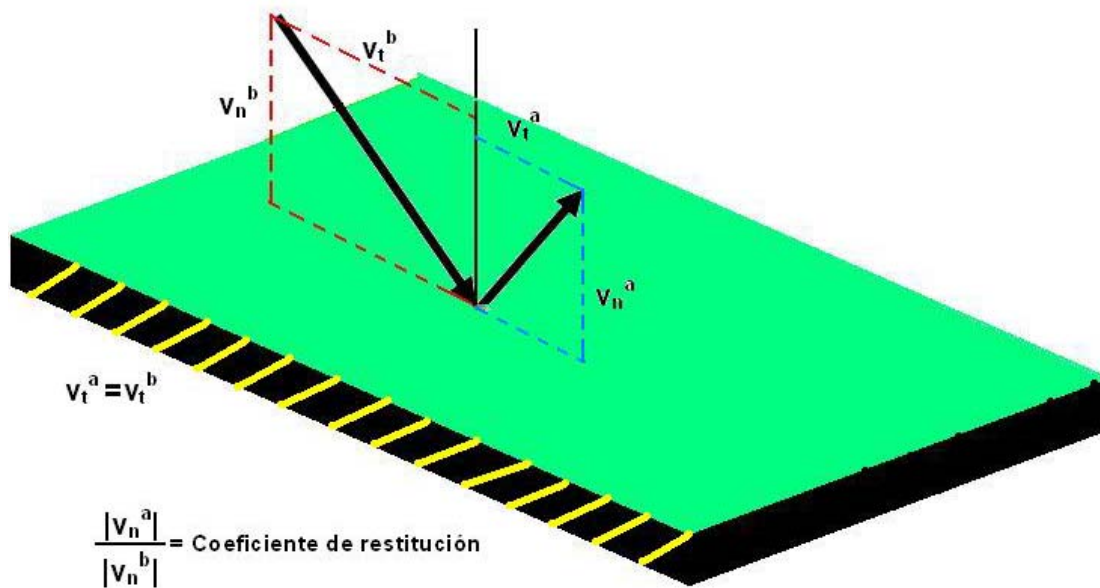


Figura 3.3 Rebote de partícula

3.3.3.7 Propiedades del fluido en la posición de la partícula

Las propiedades del fluido en la posición de la partícula son computadas por GENTRA como sigue:

- Para las componentes de velocidad en mallado cartesiano o cilíndrico polar, el valor es interpolado en la posición de la partícula usando los valores en los dos nodos vecinos.
- Para todas las demás variables, y para la velocidad resuelta en casos de BFC, las propiedades del fluido experimentada por la partícula son esas que prevalecen en el centro de la celda.

3.3.3.8 Fracción volumétrica de la partícula.

Para flujos estacionarios, la fracción volumétrica de la partícula ε_p es calculada para cada celda por la siguiente ecuación:

$$\varepsilon_p = \sum_{k=1}^N \frac{V_k \eta_k \Delta t_k}{V_{cell}} \quad (3.38)$$

donde k representa una porción de partículas; V_k es el volumen de cada partícula; η_k es el numero de porcentaje de fluido para la porción; Δt_k es el tiempo de estancia de la porción en la celda y V_{cell} es el volumen de la celda.

Para flujos no estacionarios, la fracción volumétrica de la partícula es calculada para cada celda por:

$$\varepsilon_p = \sum_{k=1}^N \frac{V_k}{V_{cell}} \quad (3.39)$$

3.3.3.9 Concentración másica de la partícula

La concentración másica de la partícula C_p es computada para cada celda. Para flujo estacionario, ésta concentración se calcula como:

$$C_p = \sum_{k=1}^M \frac{\rho_k V_k \eta_k \Delta t_k}{V_{cell}} \quad (3.40)$$

donde ρ_k es la densidad de cada partícula.

Para flujos no estacionarios, es computada en cada celda por:

$$C_p = \sum_{k=1}^M \frac{\rho_k V_k}{V_{cell}} \quad (3.41)$$

3.3.3.10 Densidad de mezcla

La densidad de mezcla es calculada en cada celda por la siguiente ecuación:

$$\rho_m = \rho_c (1 - \varepsilon_p) + C_p \quad (3.42)$$

donde ρ_c es la densidad de la fase continua.

3.3.3.11 Fracción másica de la partícula

La fracción másica de la partícula X_p es obtenida en cada celda por:

$$X_p = \frac{C_p}{\rho_m} \quad (3.43)$$

CAPÍTULO 4

DESCRIPCIÓN DEL EXPERIMENTO

4.1 Introducción

En este trabajo se presenta la instalación experimental que se pretende simular. Estos experimentos fueron realizados en Francia por el INERIS (Institut National de l'environnement Industriel et des Risques), que fueron 15 y de los cuales se toma el 4, para hacer la comparación entre los resultados experimentales y las predicciones del modelo numérico.

4.2 Ensayo de la dispersión.

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 de amoníaco en un parque industrial. La dispersión atmosférica de un gas, se ve afectada por las condiciones de salida y metereológicas, así como de la naturaleza del mismo.

Existen al menos cuatro distintas formas de fuga de amoniaco las cuales son:

1. Fuga de amoníaco gaseoso a partir de un recipiente que se encuentra presurizado (fuga a partir de la fase gaseosa).
2. Fuga de amoníaco bifásico de un recipiente que se encuentre presurizado (fuga a partir de la fase líquida).

3. Evaporación de amoníaco en su fase líquida donde la temperatura es inferior o igual a la temperatura de ebullición.

4. 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 bifásica de un contenedor bajo presión, pues es el método de almacenamiento más común.

Los estudios realizados en fugas bifásicas, muestran que estas pueden ser divididas en tres zonas como se muestra en la figura 4.1.

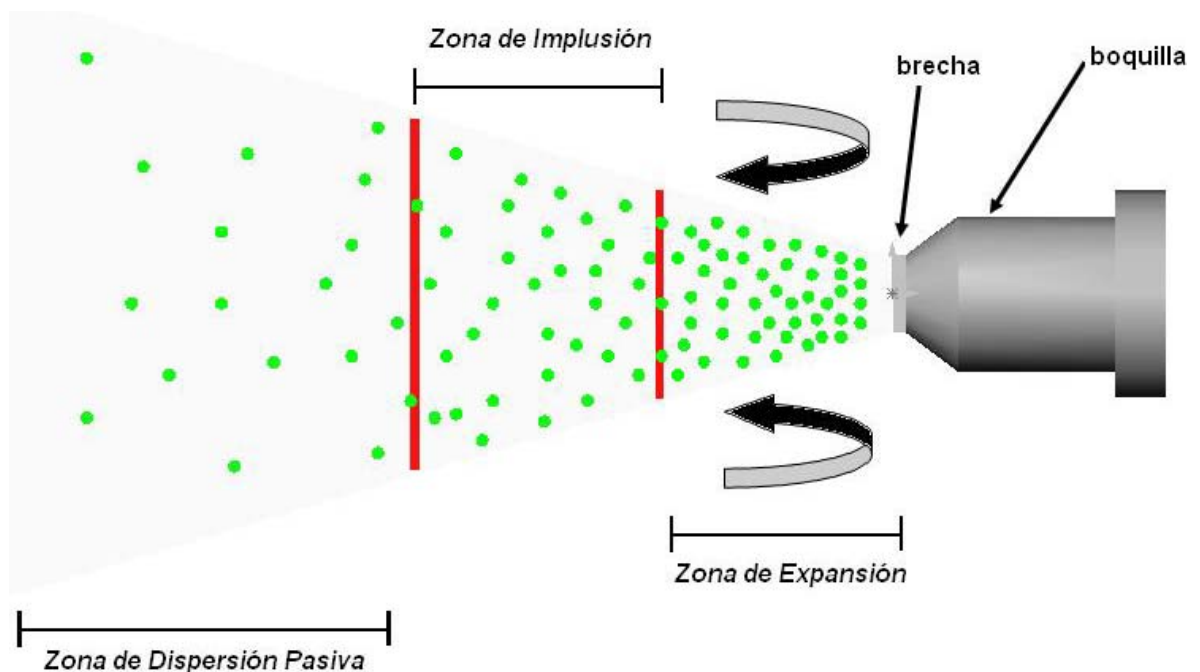


Figura 4.1 Zonas de disipación de un chorro.

Estas tres zonas son las que a continuación se describen:

a) Zona de expansión. Esta zona es muy pequeña ya que se encuentra entre 0.5 y 4 veces el diámetro de la abertura, aquí 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 provoca que la fase gaseosa impulse a la fase líquida dividiéndola en pequeñas gotitas, por lo que al final de esta zona, existe un flujo bifásico que se compone de amoníaco gaseoso y gotas de amoníaco.

b) Zona de impulsión. Esta zona permite que la turbulencia deje entrar aire atmosférico en el chorro, el cual contiene energía que da lugar a una diferencia de temperaturas entre el aire y las gotas de amoníaco, provocando un incremento en la temperatura de éstas, que da como resultado que las pequeñas gotas de amoníaco sufran una evaporación, ocasionando 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, la energía calienta el chorro y lo convierte completamente en un gas.

c) Zona de dispersión pasiva. En esta zona 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.

En el caso de que existieran obstáculos lo suficientemente cerca de la fuga, esto modificará de manera importante la fase inicial de la dispersión así como la dispersión en la atmósfera; pero, si el obstáculo se encuentra lejos de la fuga, no modificará el estado de la expulsión sino únicamente se verá afectado el flujo de las masas del gas.

4.3 Descripción de las pruebas.

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 cuarto experimento, ya que en éste, el flujo fue bifásico y se tiene la mayoría de los datos para realizar la comparación de concentración. Este experimento consistió en una fuga de amoníaco bifásico horizontal a un metro de altura a través de un orificio de 50.8 [mm] y con el fin de mantener la presión constante durante todo el experimento se inyectó nitrógeno.

El ensayo duró 600 segundos en los cuales se liberaron 2520 [kg] de amoníaco teniendo así un gasto másico de 4.2 [kg/s].

El experimento fue realizado 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 [m³] cada uno, el amoníaco se almacena bajo condiciones de saturación como lo muestra la figura 4.2.

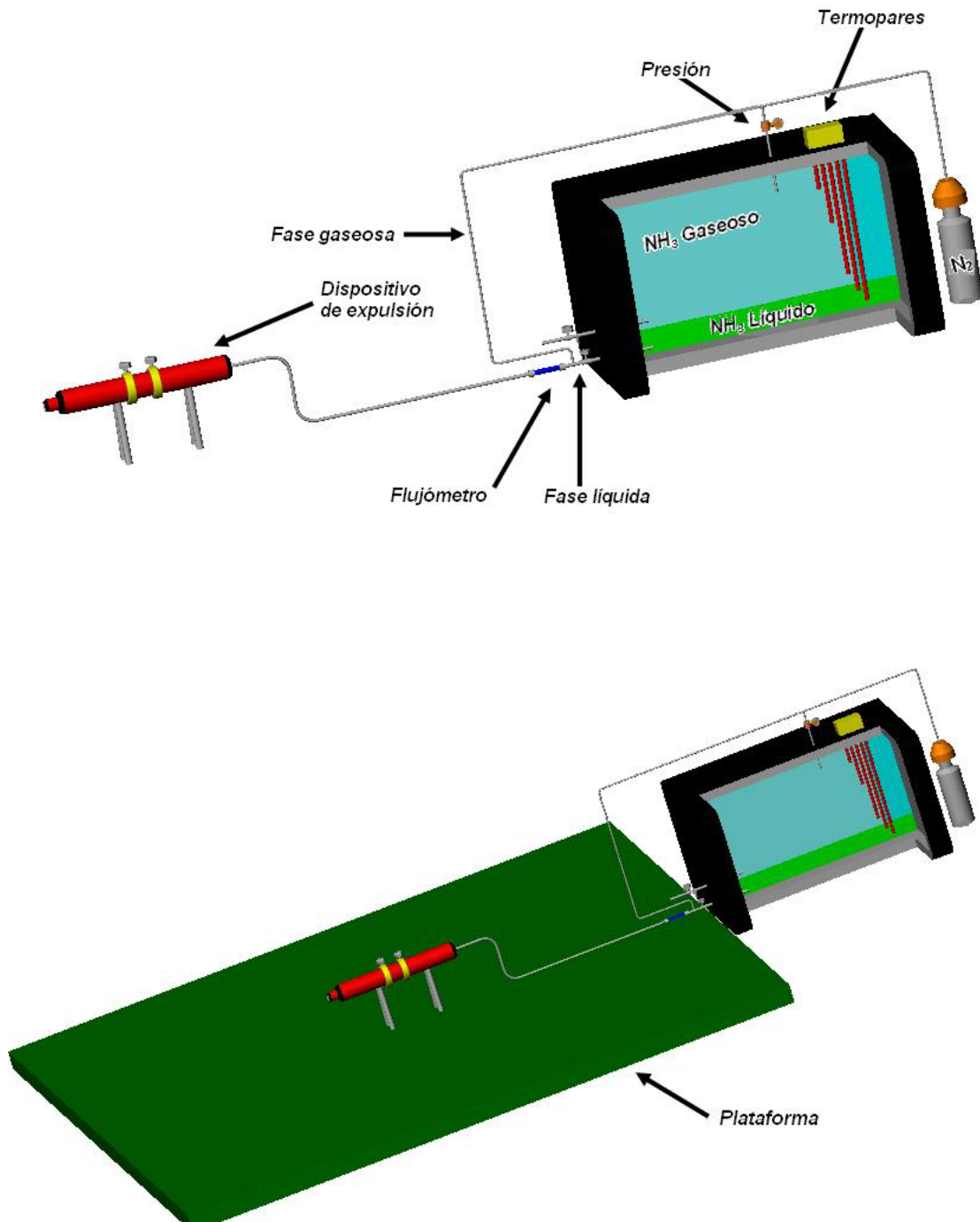


Figura 4.2 Representación de las instalaciones del INERIS.

Las condiciones meteorológicas influyen de manera importante y en gran medida en la dispersión y distribución de concentraciones del amoniaco, por lo que el registro de dichas condiciones fue considerado. Para conocer las condiciones meteorológicas fue colocado un mástil de 10 [m] a 350 [m] del punto de expulsión; se colocaron en él tres anemómetros de copa a 1.5, 4 y 7 metros de altura y un anemómetro ultrasónico situado a 10 [m] de altura (Figura 4.3). Además se colocó una estación meteorológica, en la cual se registraron las medidas de temperatura, humedad relativa y la radiación solar.

La temperatura ambiental durante el ensayo fue de 27 [°C], una humedad relativa de 82% y una velocidad del viento de 3 [m/s] a una dirección de 290°.

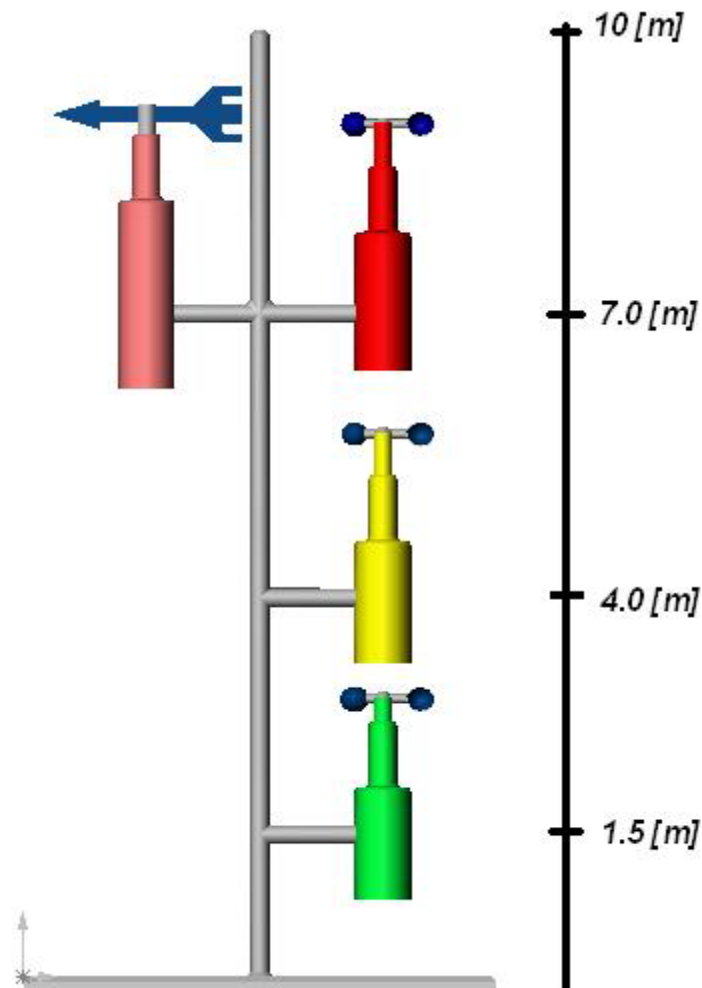


Figura 4.3 Distribución de los anemómetros para medir las condiciones meteorológicas

Los resultados de distancia y niveles de concentración de amoniaco obtenidos en el ensayo son los que se presenta en la siguiente tabla:

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

Tabla 4.1 Resultados del ensayo [2].

Como se puede observar la zona con mayor concentración comprende desde los 0 [m] hasta los 200 [m]; se ve un baja importante en la magnitud de las concentraciones a partir de los 500 [m] en adelante. En la siguiente gráfica se puede observar el comportamiento de la curva de concentraciones respecto a la magnitud de la distancia.

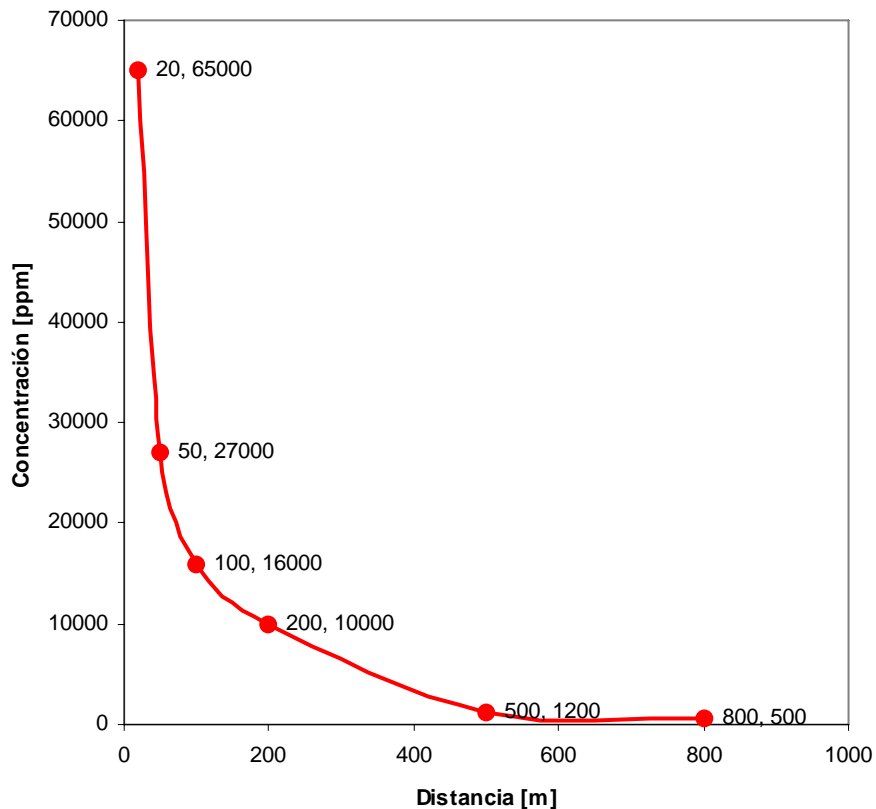


Figura 4.4 Gráfica de los resultados experimentales (Proporcionada por el INERIS).

CAPÍTULO 5

SIMULACIÓN DE LA DESCARGA DE AMONÍACO BIFÁSICO

5.1 Introducción

En este capítulo se presenta las condiciones iniciales y de frontera que se utilizaron para simular la dispersión turbulenta del flujo de flujo de amoniaco experimental que se presento en el capítulo anterior.

5.2 Mallado

Para el estudio numérico de la descarga se empieza por definir el dominio de la simulación. Como se muestra en la figura 5.1, el dominio consta de dimensiones diferentes en un plano tridimensional; en la dirección X se tiene un longitud de 25.571 [m] dividida en 5 regiones; en la dirección Y la longitud del dominio es de 4.07 [m] dividida igualmente en 5 regiones con distintas longitudes; y por último en la dirección Z la longitud es de 50 [m] que se ve también dividida en regiones debido a la afectación de las regiones de las direcciones X e Y.

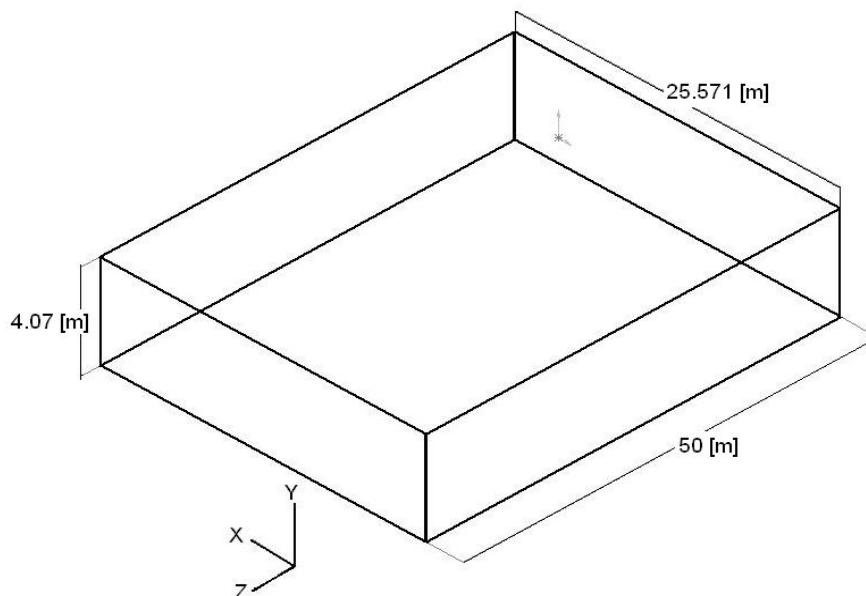


Figura 5.1 Dimensiones del dominio

A cada cara que se genera al definir el dominio, le corresponde un nombre, el cual es proporcionado, tomando en cuenta el criterio usando en el método de volúmenes finitos, es decir, como se muestra en la figura 5.2, al lado A le corresponde la cara Norte (N), al lado B le corresponde la cara Sur (S), al lado C le corresponde el lado Este (E), al lado D el lado Oeste (W), al lado F le corresponde la cara superior (H) y al lado G le corresponde la cara inferior (L)

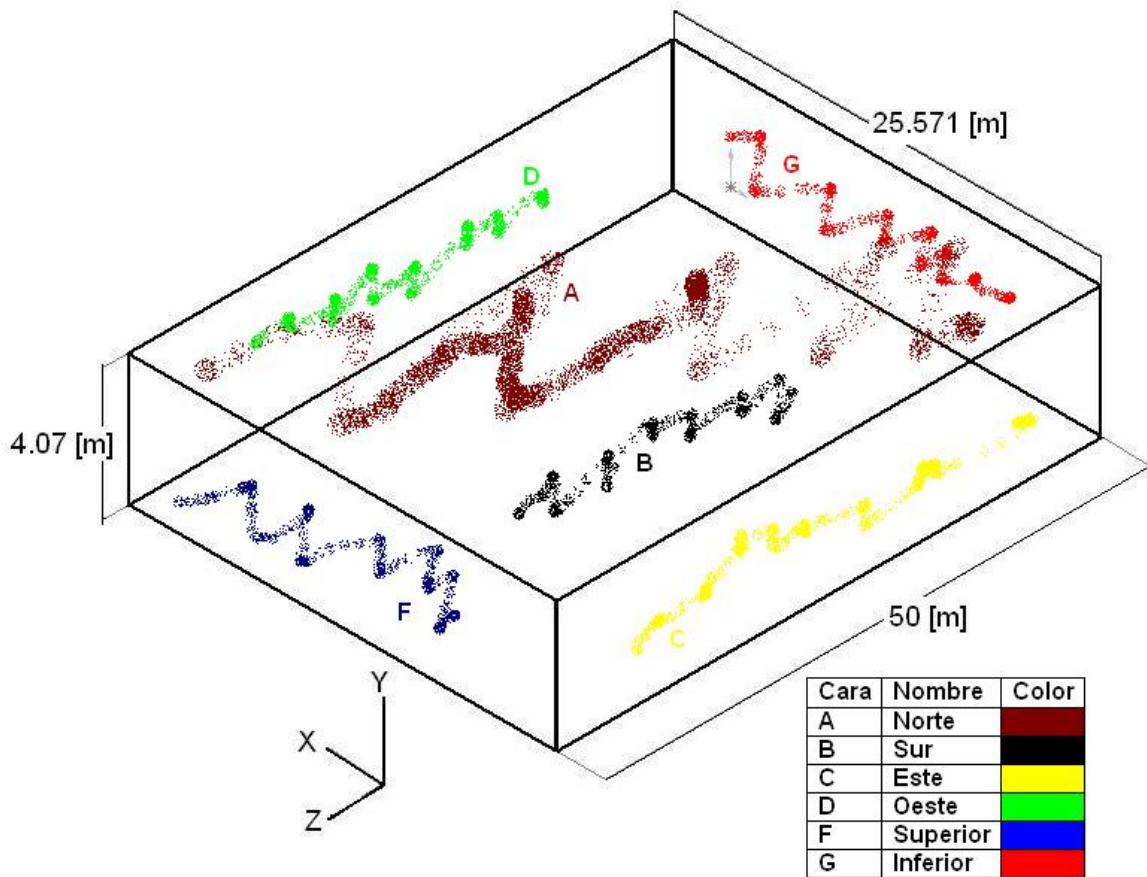


Figura 5.2 Caras del dominio

Como se mencionó anteriormente, existen 5 regiones en las direcciones X e Y como se muestra en la figura, mientras que la dirección Z también se encuentra dividida pero en menos regiones y esto es debido a que al formar las regiones en el plano XY, por causa del mallado, en el eje Z se siguen las proyecciones de tales divisiones

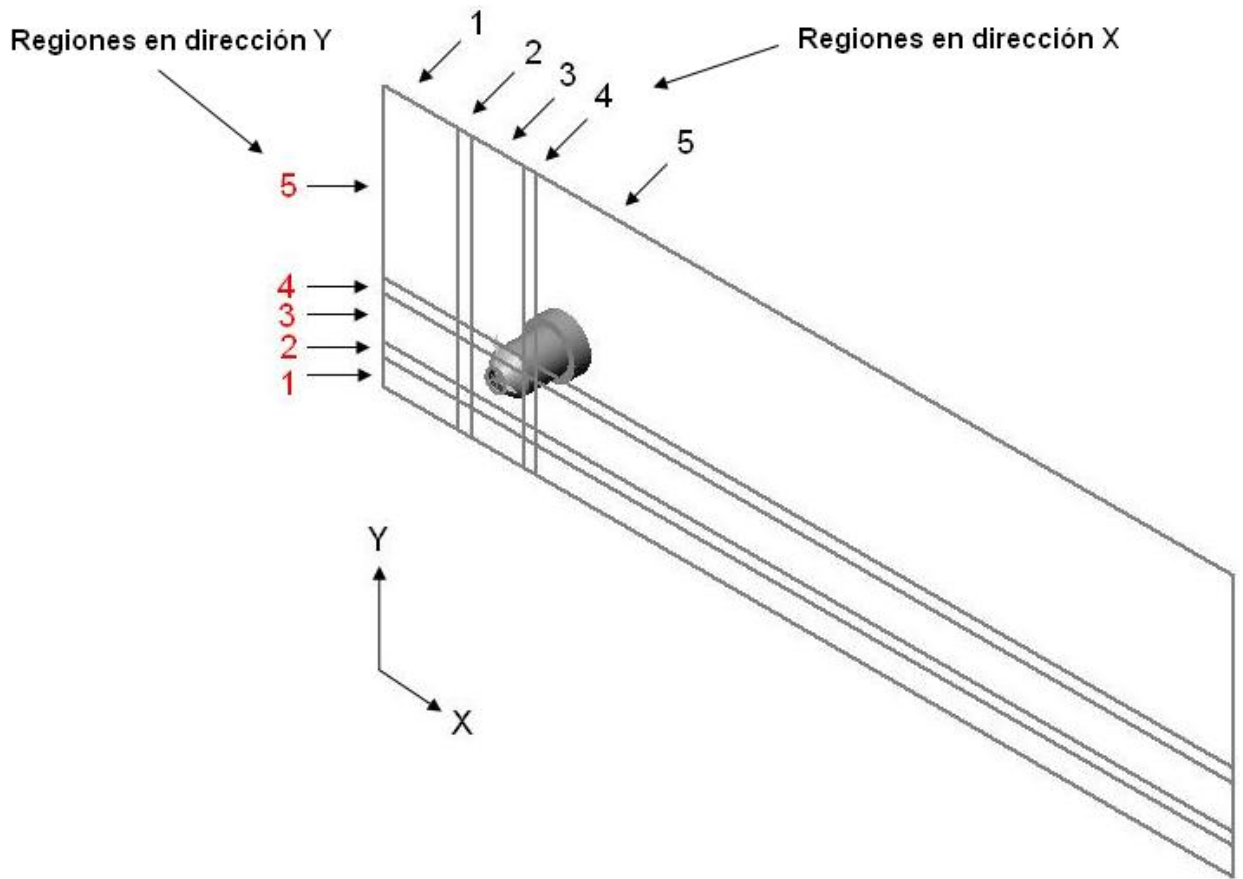


Figura 5.3 Regiones en las direcciones X y Y

Las longitudes de las regiones de cada dirección se muestran en la siguiente figura

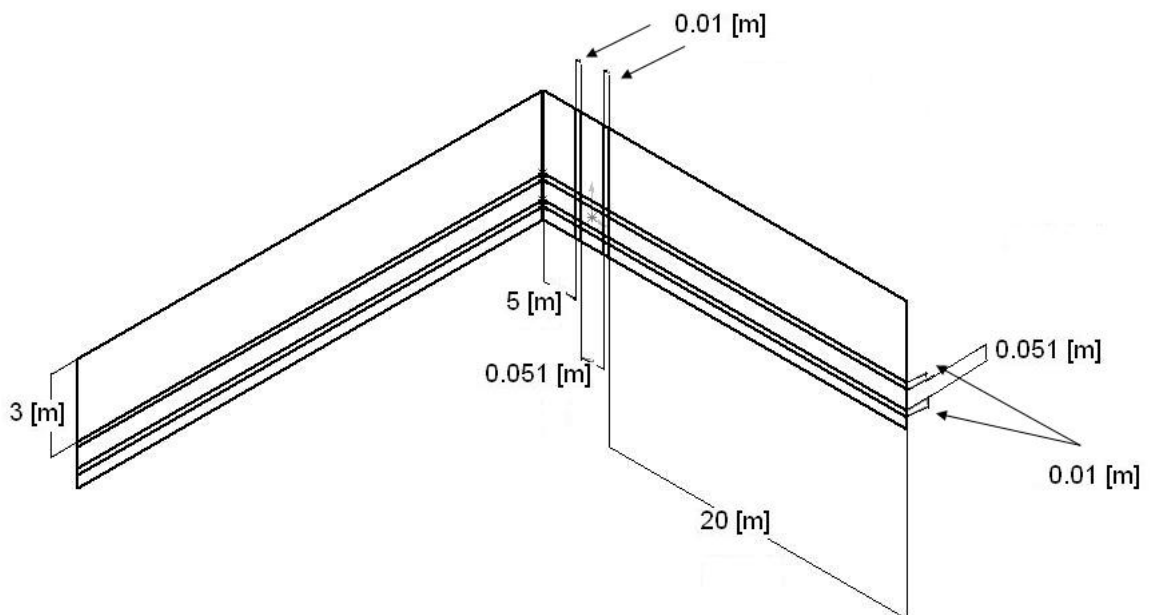


Figura 5.4 Longitudes de cada región

En la figura 5.5 se muestra con mayor detalle cómo queda el dominio del experimento así como el mallado que ayudó para la realización de la simulación numérica de la fuga de amoniaco.

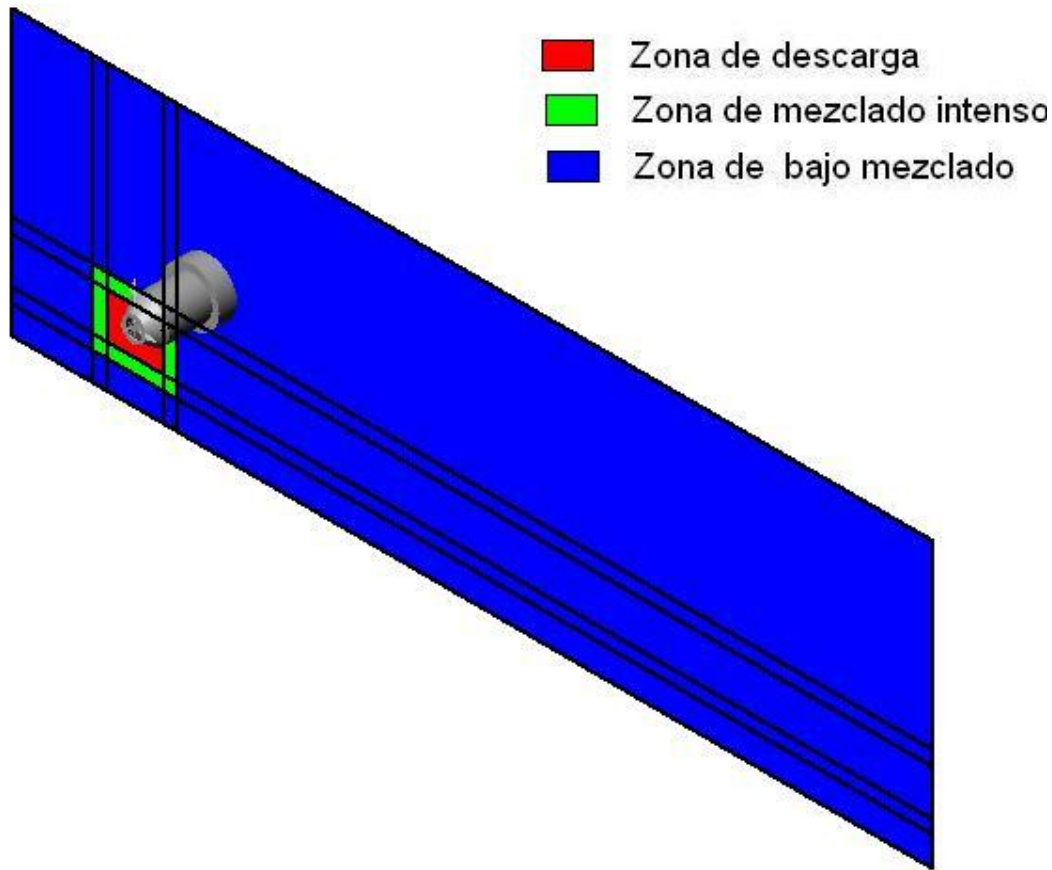


Figura 5.5 Dominio de la descarga

Principalmente, existen 3 diferentes zonas, las cuales son importantes en el análisis numérico de la descarga, pues la zona de color rojo es donde se lleva a cabo la fuga de amoniaco, la zona amarilla es la zona borde a la descarga que es una zona que tiene un mallado más fino y cargado a hacia la zona de color rojo, con la finalidad de analizar y estudiar cómo se comporta el fluido y las variaciones de sus propiedades en las proximidades de la descarga, ya que es aquí donde se lleva a cabo el proceso de la mezcla entre el amoniaco y el aire; y la última zona es la de color azul, la cual tiene un mallado menos fino que la de los bordes de la descarga debido a que las variaciones en las propiedades del fluido en esta zona no son tan grandes.

El mallado se conforma por celdas que se distribuyen a lo largo de las tres direcciones cartesianas. En la dirección X el número de

celdas es de $NX= 50$; en la dirección Y el número de celdas es de $NY= 26$ y en la dirección Z la cantidad de celdas es de $NZ= 115$.

5.3 Condiciones de frontera

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

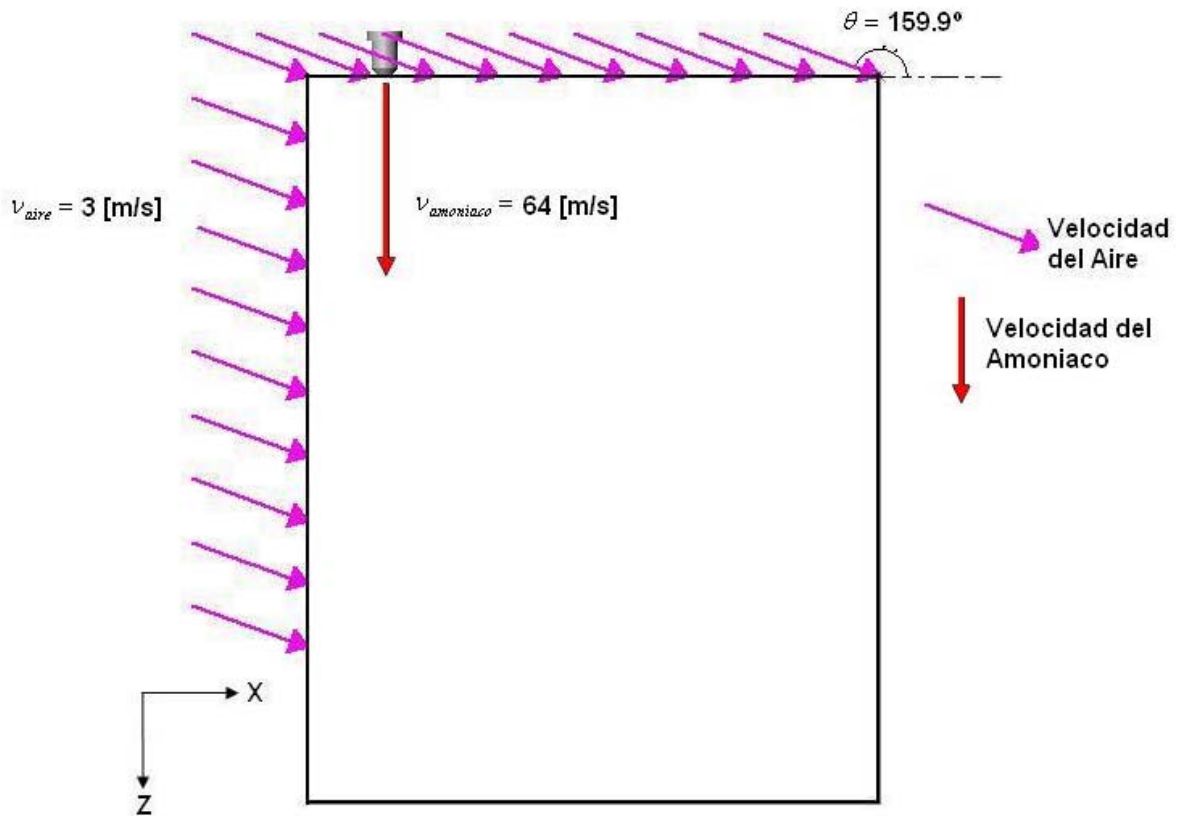


Figura 5.6 Condiciones de frontera, con entrada de aire lateral.

Las condiciones de frontera para el amoníaco son las siguientes: velocidad 64 [m/s] y flujo másico de 4.2 [kg/s] en la dirección Z y entra al dominio por la frontera inferior (L)

Como se puede observar en la Figura 5.1, la descarga de amoníaco está interactuando con una corriente de aire, la cual lleva una velocidad de 3 [m/s] y entra al dominio por las fronteras Inferior (L) y Oeste (W) con un ángulo respecto al eje X igual a $\theta = 159.9^\circ$

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%.

5.4 PROPIEDADES EN LA DESCARGA DE AMONÍACO [2]

Las propiedades en la descarga de amoníaco 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:

a) Ecuación de Euler:

$$\frac{U_d^2}{2} = \alpha_F^2 \left(\int_{P_d}^{P_{int}} v dP \right) \quad (5.1)$$

donde U_d^2 es la velocidad del flujo de amoníaco a la salida del contenedor, α_F^2 es un factor de corrección empírico que permite tomar en cuenta los efectos de la fricción, P_d es la presión a la salida del contenedor y P_{int} es la presión en el interior del contenedor.

b) Ecuación de la presión interna en función de la temperatura.

$$P_{int} = P_{sat} = \exp\left(B - \frac{A}{T}\right) \quad (5.2)$$

donde P_{int} es la presión en el interior del contenedor, P_{sat} es la presión de saturación, A y B son constantes

c) ecuación de volumen específico (v)

$$v = (1 - x)v_{liq} + xv_{gas} \quad (5.3)$$

donde v_{liq} es el volumen específico del líquido, v_{gas} es el volumen específico del gas y x es la calidad de la mezcla.

Después de integrar la ecuación 5.1, la expresión que queda es la siguiente

$$\frac{U_d^2}{2} = \alpha_F^2 \left(\frac{P_{int} - P_d}{\rho_{liq}} + Cp_{liq}(T_{int} - T_d) - Cp_{liq}T_d \ln\left(\frac{T_{int}}{T_d}\right) \right) \quad (5.4)$$

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

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 con calidad x_d . la expresión para calcular la velocidad del sonido U_{son} es la siguiente:

$$U_{son} = \frac{P_d A}{\rho_d T_d \sqrt{Cp_{liq} T_d \left(1 + \left(\frac{A}{T_d} - 1 \right) \ln\left(\frac{T_{int}}{T_d}\right) \right)}} \quad (5.5)$$

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

$$\frac{1}{\rho_d} = \frac{1}{\rho_{liq}} + \frac{\ln\left(\frac{T_{int}}{T_d}\right) Cp_{liq} T_d^2}{A \cdot P_d} \quad (5.6)$$

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

$$x_d = \frac{\frac{1}{\rho_d} - \frac{1}{\rho_{líq}}}{\frac{1}{\rho_{gas}} - \frac{1}{\rho_{líq}}} \quad (5.7)$$

Finalmente la determinación del gasto másico esta dada por:

$$\dot{m}_d = \rho_d A_d U_d \quad (5.8)$$

donde A_d es el área de la abertura en la descarga.

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:

$$Y_{aire} + Y_{amoniaco} = Y_{total} \quad (5.9)$$

de donde:

$$Y_{amoniaco} = \frac{c}{M_{amoniaco}} \quad Y_{aire} = \frac{c}{M_{aire}} \quad (5.10)$$

donde $Y_{amoniaco}$ es la fracción volumétrica de amoniaco, Y_{aire} es la fracción volumétrica del aire, Y_{total} es la suma de las fracciones másicas del amoniaco y del aire, $m_{amoniaco}$ y m_{aire} son las fracciones másicas del amoniaco y del aire respectivamente,

$Y_{amoniaco}$ = 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 1×10^6 queda:

$$ppm_{Amoniaco} = \left(\frac{\frac{c}{M_{Amoniaco}}}{\frac{(1-c)}{M_{Aire}} + \frac{c}{M_{Amoniaco}}} \right) \times 1 \times 10^6 \quad (5.11)$$

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

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

5.5 Constitución del código de la simulación numérica.

Como anteriormente se indicó, el Programa PHOENICS y su aplicación GENTRA utilizan un código basado en el lenguaje FORTRAN el cual permite la simulación del comportamiento de fluido así como el comportamiento de sus propiedades.

Para hacer uso de estos programas se tiene un archivo cuyo nombre es Q1. En este archivo Q1 se codifican las condiciones iniciales y de frontera, así como las ecuaciones y formas de resolución de las mismas. Dentro de esos apartados existe uno en el cual se dan las propiedades iniciales en el fluido, para el problema en estudio. En la simulación se tomaron en cuenta las siguientes propiedades iniciales para la fase continua (NH_3 (gaseoso)):

Propiedad	Variable	Valor
Entalpía	H1	568708.0 [J/kg]
Velocidad en X	U1	0 [m/s]
Velocidad en Y	V1	0 [m/s]
Velocidad en Z	W1	64 [m/s]
C_p (fase continua)	GCPVAP	2138 [J/kg-K]
Conductividad térmica(fase continua)	GKONC	0.02045[W/m-K]
Peso molecular (fase continua)	GMWCON	17.04[kg/kg _{mol}]

Tabla 5.1 Valores para la fase continua

En la tabla 5.1, U1, V1 y W1 son las velocidades en las direcciones X, Y y Z respectivamente; H1, entalpía; GPCON, C_p de la fase

continua, en este caso amoniaco gaseoso; GMWCON, masa molecular del amoniaco gaseoso

Al igual para la fase dispersa (NH₃ (líquido)) también se tomaron en cuenta las siguientes propiedades con sus respectivos valores mostrados en la tabla 5.2

Propiedad	Variable	Valor
C _p (fase dispersa)	GCPLIQ	4540 [J/kg-K]
Peso molecular (fase dispersa)	GMWCON	17.04[kg/kg _{mol}]
Diámetro mínimo de partícula	GDTRCT	1x10 ⁻⁰⁵ [m]
Temperatura	TEM	266 [K]
Densidad	LDEN	680[kg/m ³]
Velocidad	WP	64 [m/s]

Tabla 5.2 Valores para la fase dispersa

Cabe hacer notar que en el programa GENTRA se requiere de un tamaño mínimo de partícula para la cual ya se asume como completamente evaporada, este valor se muestra en la tabla anterior y fue calculado a partir de las ecuaciones del capítulo 2.

Para el cálculo de algunas propiedades, se dieron algunos valores iniciales de estos, tales propiedades y valores se muestran en la tabla 5.3.

Propiedad	Valor	Fluido	Variable
Velocidad en X	0.1 [m/s]	Aire	U1
Velocidad en Y	0.1 [m/s]	Aire	V1
Velocidad en Z	0.1 [m/s]	Aire	W1
Temperatura	300 [K]	Aire	TMP1
C1	0	Amoníaco	C1

Tabla 5.3 Valores iniciales para la simulación

Como parte del estudio, es necesario indicar las concentraciones (C1) iniciales para las entradas. La tabla 5.4 muestra el valor de C1 que es aplicado a la concentración de amoníaco; nótese que para las entradas de aire el valor inicial de concentración de amoníaco es cero mientras que para la descarga tiene el valor de 1.

Entrada	Propiedad	Valo	Fluido
Aire1	C1	0	Aire
Aire2	C1	0	Aire
Amon	C1	1	Amoníaco

Tabla 5.4 Valores iniciales de concentración

Como la descarga de amoníaco al salir de la fisura, entra en contacto con aire, también es necesario dar propiedades al aire y éstas se presentan en la tabla 5.5.

Propiedad	Valor
Velocidad	3 [m/s]
C_p	1007[J/kg-K]
Humedad	82%
Temperatura	300 K [°C]
Entalpía	302100 [J/kg]
Densidad	1[kg/m ³]

Tabla 5.5 Propiedades para el aire

El programa GENTRA, para calcular las trayectorias, propiedades y sus variaciones en las partículas, en este caso gotas que se evaporan, necesita que se le proporcione ciertas propiedades de las partículas como la posición, velocidad, diámetro, densidad, flujo másico y temperatura. Estos valores se deben de agregar en el Q1 en el apartado de GENTRA. A continuación se muestra los valores:

Propiedad	Variable	Valor
Posición x (*)	XP	5.52 [m]
Posición y (*)	YP	1.02 [m]
Posición z (*)	ZP	0.00 [m]
Velocidad x	UP	0.00 [m/s]
Velocidad y	VP	0.00 [m/s]
Velocidad z	WP	64 [m/s]
Diámetro	DI	0.4E-04 [m]
Densidad (líq.)	LDEN	680 [kg/m ³]
Flujo másico	MDOT	0.121E-03[kg/s]
Temperatura	TEM	266 [K]

Tabla 5.6 Valores para las partículas.

En el caso de la fase líquida el cálculo de las partículas que deben ser simuladas nos dio de 95211 partículas. Para la posición de cada una de éstas se elaboró un programa en FORTRAN con la finalidad de determinar su posición inicial, ajustando el número de partículas en el área de la descarga que es de $2.601E-03 \text{ m}^2$, la separación entre partícula y partícula fue de $1.007E-04 \text{ m}$ por lado, logrando colocar 308 partículas tanto en dirección x como en dirección y.

En lo que respecta a la velocidad, se sabe que la velocidad de las partículas es la misma que la de la descarga de gas pues viajan en la misma dirección por lo que en las direcciones X y Y los valores de velocidad para las partículas son de 0 [m/s] , mientras que en la dirección Z tiene un valor de 64 [m/s] . La fase dispersa es amoniaco líquido, por lo que la densidad para todas las partículas es de $680 \text{ [kg/m}^3\text{]}$

Con los datos de velocidad, densidad y área de la fuga se calculó el flujo másico de la descarga el cual fue de 113.195 [kg/s] . Tal flujo másico se compone de gas y líquido en la siguiente proporción. El gas representa el 95.4% del flujo másico, mientras que la parte líquida representa el 4.6%. El diámetro de las partículas es considerado de $4 \times 10^{-05} \text{ [m]}$.

CAPÍTULO 6

RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

6.1 Introducción

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en la simulación numérica, así como una discusión de los mismos para dar las conclusiones respectivas sobre este trabajo de tesis. Para validar los modelos utilizados se hace una con datos experimentales en términos de concentraciones de especie química, que es presentado en la última parte.

6.1 Campos de velocidad

La velocidad en general, juega un papel importante en la simulación, ya que en el estudio de la fuga de amoniaco se tienen tres fluidos, los cuales tienen distintas velocidades e interactúan entre si para poder mostrar los perfiles de velocidad que se muestra en la Figura 6.1

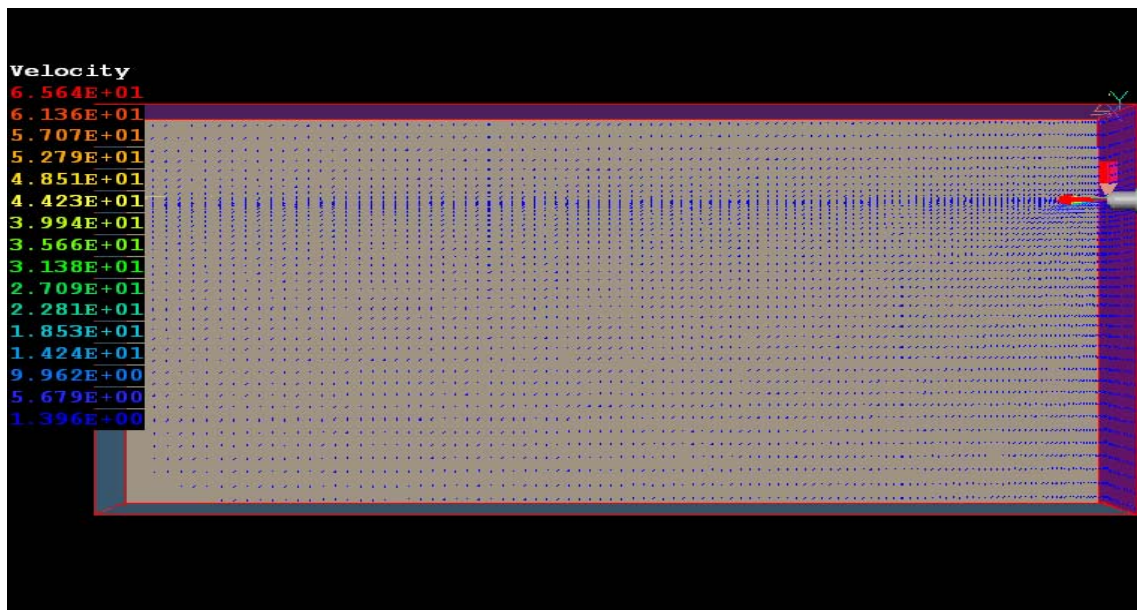


Figura 6.1 Perfiles de velocidad en el dominio.

Como se puede ver en la figura 6.1, destaca la magnitud de la velocidad en la salida de amoniaco que va a ser influenciada por la cantidad de movimiento que tiene el aire que se localiza en la parte lateral, debido a que parte del este aire tiene una velocidad perpendicular a la del chorro.

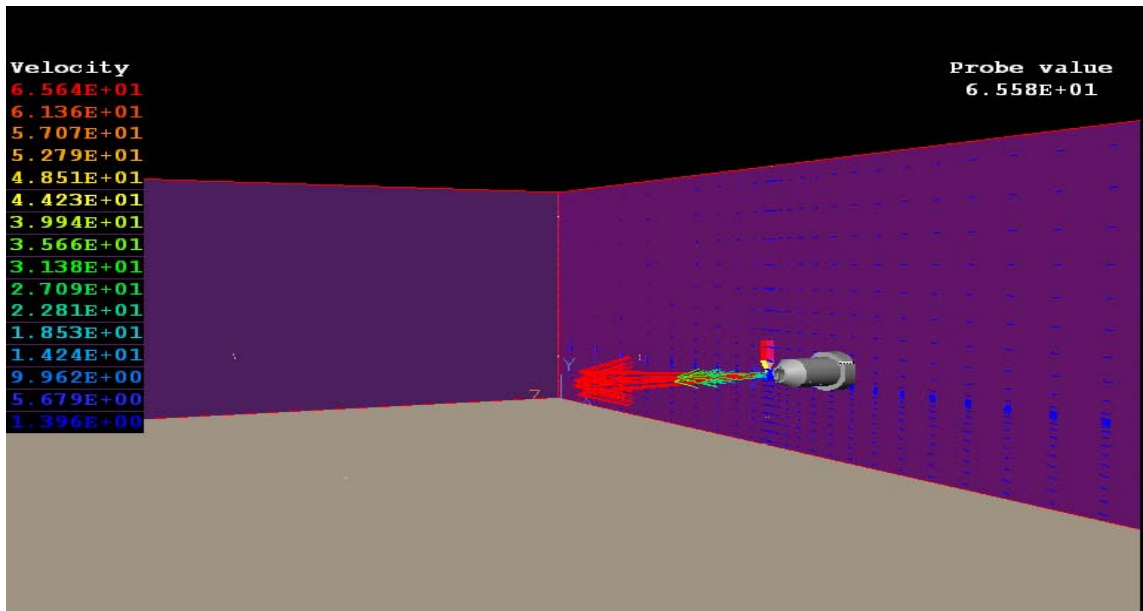


Figura 6.2 Perfiles de velocidad en un plano xy.

En un acercamiento a la zona donde se encuentra la descarga (Figura 6.2), que es simulada a partir de la boquilla del dispositivo utilizado en la realización del experimento, se puede observar que los perfiles de velocidad más altos se dan en la dirección donde ocurre la descarga de amoníaco, aunque existen pequeñas variaciones de la velocidad en ésta debido a la interacción del aire sobre la zona de fuga.

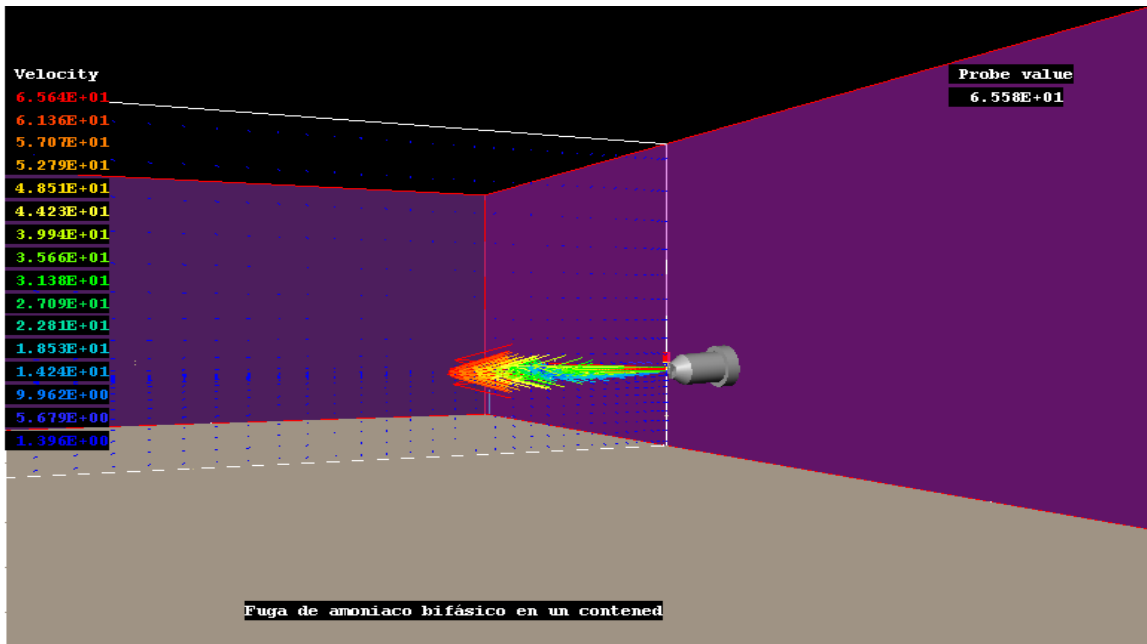


Figura 6.3 Perfiles de velocidad en un plano yz.

En un acercamiento en dirección a un plano paralelo a la descarga (Figura 6.3) se muestra de manera más nítida el efecto y la gama de las velocidades que los fluidos adquieren, en particular esa gama de distintas velocidades es solo aplicable al amoniaco, pues es el que tiene la velocidad más alta en la simulación. Como se puede observar la variación en la distribución de velocidades para el amoniaco en ese plano son más notorias ya que principalmente la componente de velocidad de mayor magnitud del aire, apunta en dirección casi perpendicular a la fuga.

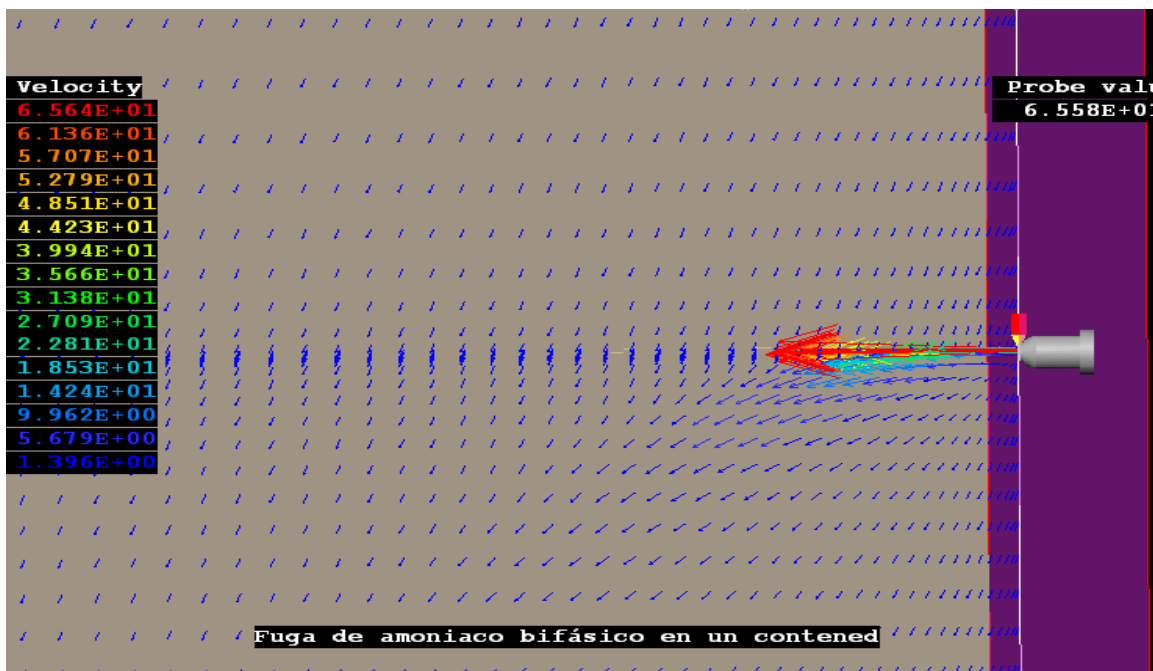


Figura 6.4 Perfiles de velocidad en un plano xz.

En la figura 6.4 se puede ver con más detalle el efecto que tiene las diferencias en las velocidades del viento y del amoníaco; se observa una zona de intercambio de cantidad de movimiento principalmente debido a que parte del aire tiene una velocidad perpendicular a la del chorro de amoníaco, adicionalmente que el aire tiene una menor velocidad axial.

6.2 Concentración de amoniaco

La parte medular de este estudio es la forma en la cual el amoníaco se dispersa cuando sale de la descarga. Cabe destacar, como se mencionó en el capítulo 5, parte del amoníaco está en forma líquida y parte en forma gaseosa. En este caso la concentración C1 indica la parte gaseosa; C1 tiene un valor de 0 para el aire.

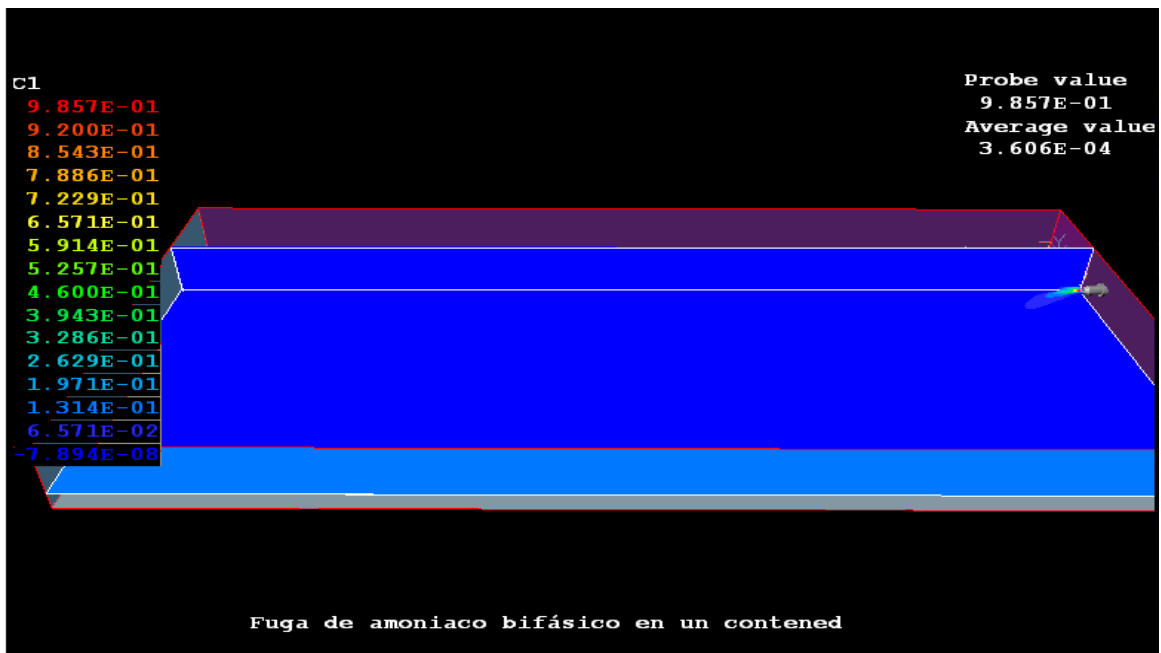


Figura 6.5 Perfiles de concentración de amoníaco gaseoso.

La figura 6.5 muestra cómo se dispersa el amoníaco gaseoso en el dominio. Mayoritariamente la concentración de esta especie química se disipa en las proximidades de la boquilla, que es cuando interactúa con el aire del medio ambiente.

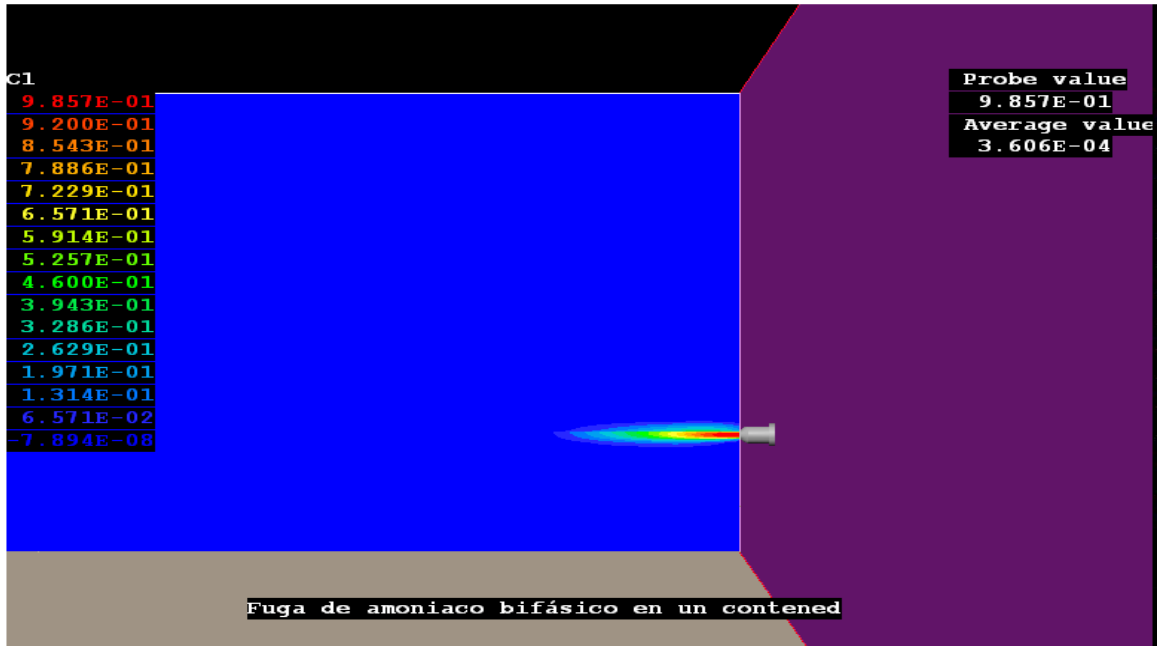


Figura 6.6 Perfiles de C1 en un plano yz.

En un acercamiento en un plano paralelo a la descarga (Figura 6.6) se puede notar que la concentración más alta ocurren en el centro de la fuga y se encuentra indicada por una tonalidad de color rojo, que al alejarse de la ésta zona, va obteniendo un color cada vez más tenue, lo que indica que las variaciones en las concentraciones ocurren cada vez que se alejan de la zona de fuga.

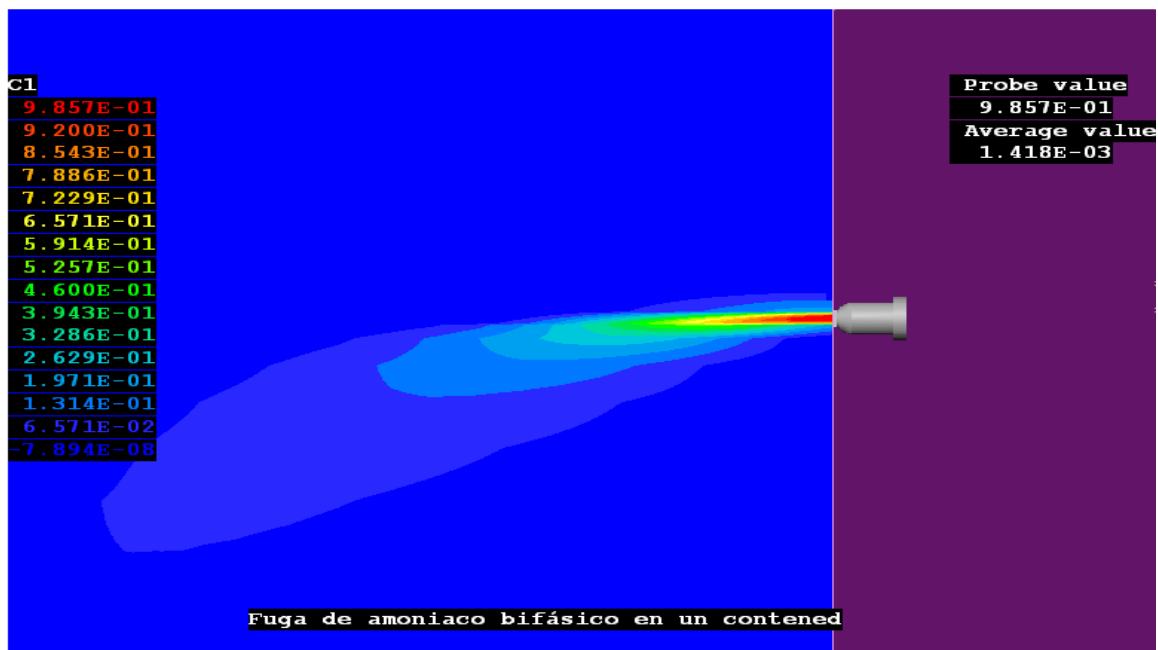


Figura 6.7 Perfiles de C1 en un plano xz.

En la figura 6.7 se muestra un acercamiento en un plano paralelo al suelo. Se puede hacer notar que la concentración en la fuga de amoníaco tiene un cambio de dirección debido al intercambio de cantidad de movimiento con el aire lateral, que produce que la pluma formada por la descarga se curve un poco hacia el sentido de la velocidad del aire.

6.3 Entalpía

La entalpía es un indicador de cómo se dan los mecanismos de transferencia de energía entre los fluidos y sus efectos, así como influencia de las partículas tanto gaseosas y líquidas en ese cambio de energía en todo el dominio. Cabe recordar que las partículas de amoníaco líquido tienen una menor temperatura que el aire circundante por lo que se presentará una transferencia de calor entre ambos.

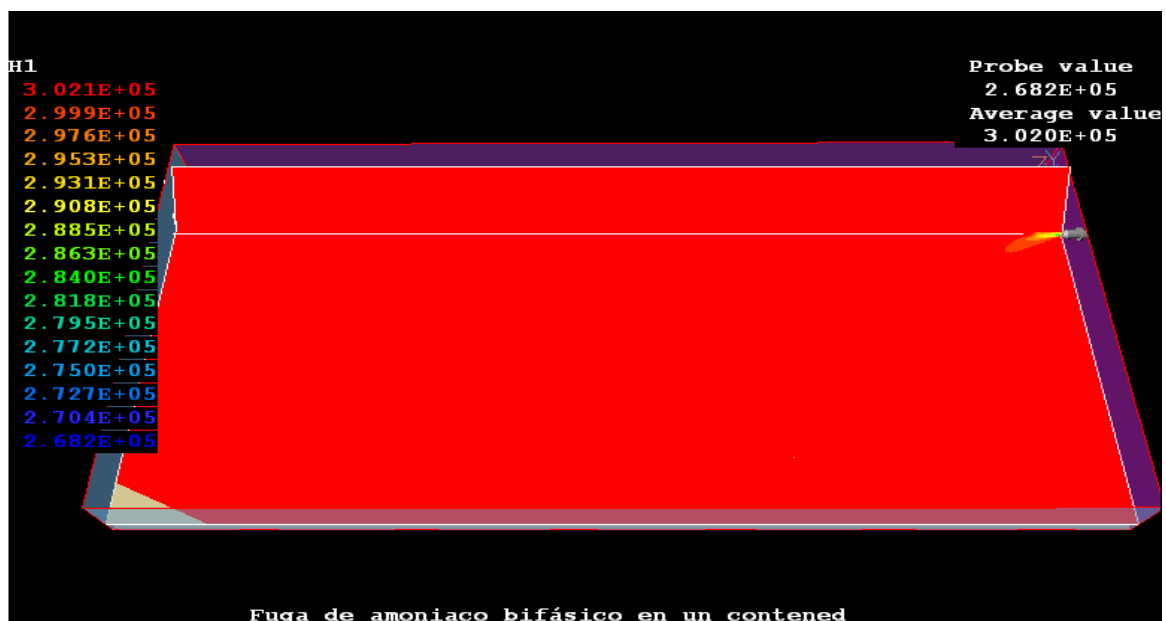


Figura 6.8 Perfiles de H1 en el dominio.

La figura 6.8 muestra el comportamiento de la entalpía a lo largo del dominio; se observa que en una zona cercana a la descarga, la interacción de energía es demasiado alta pues es el lugar donde se mezclan los fluidos con sus distintas energías y velocidades.

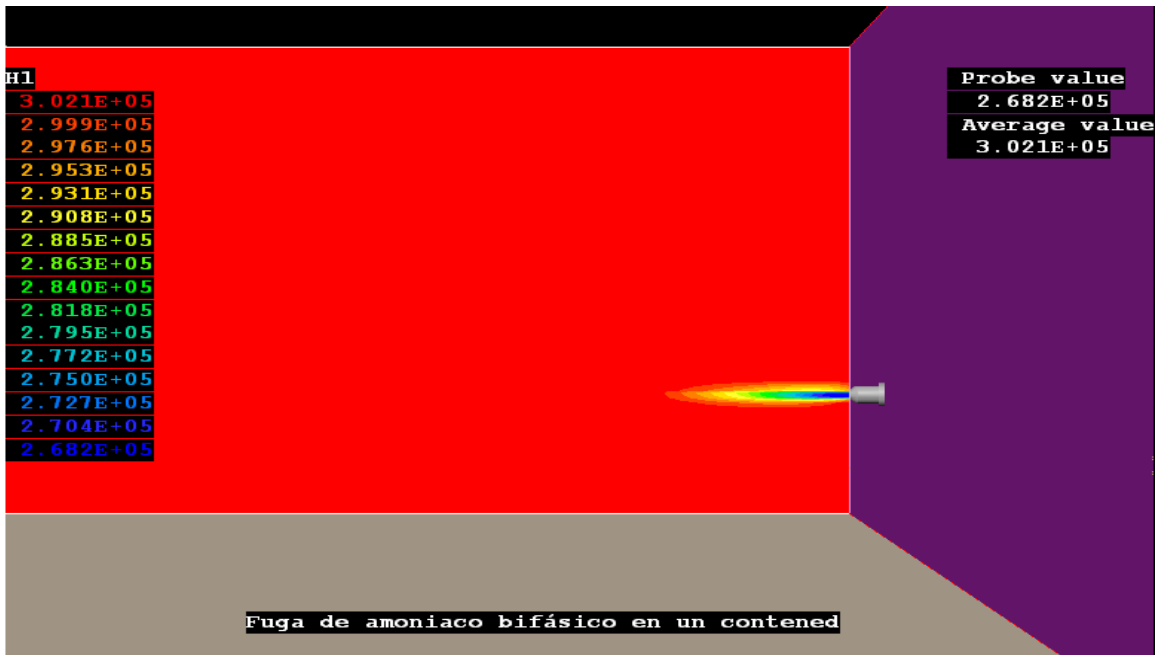


Figura 6.9 Perfiles de H1 en un plano yz.

La figura 6.9 nos indica más claramente las distintas variaciones de energía en el dominio. En el centro de la descarga se ve que es la zona con más baja entalpía de todo el dominio, ya que la tonalidad azul nos indica el valor de la entalpía para el amoníaco que es el más bajo; alejándonos del centro, la mezcla va adquiriendo mayor energía debido a la interacción del aire con el amoníaco.

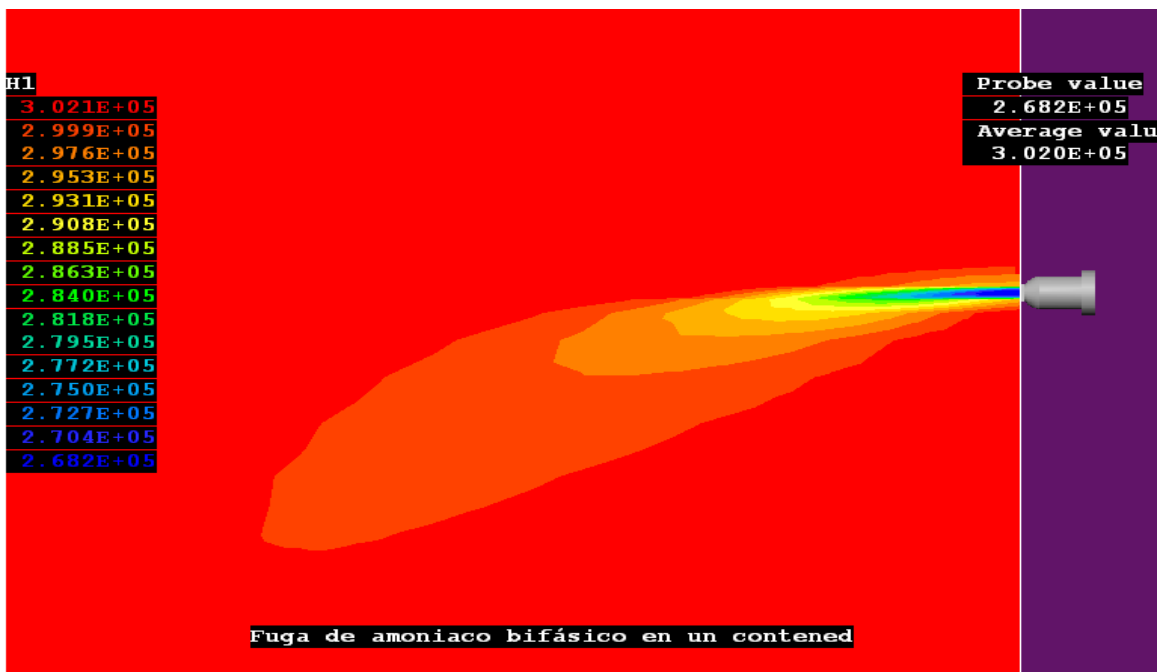
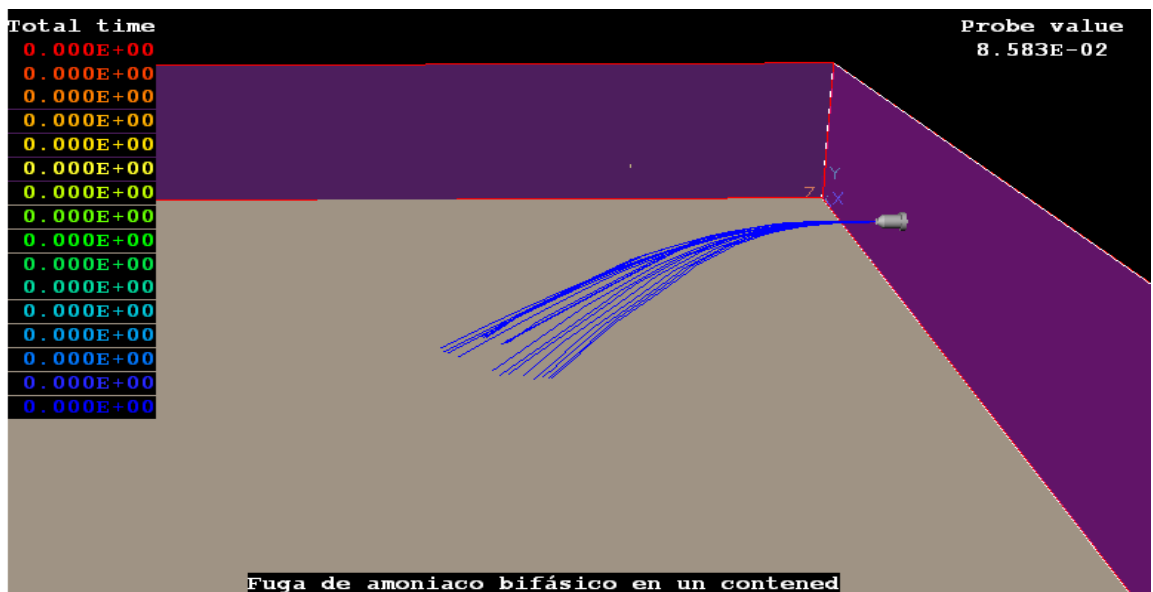


Figura 6.10 Perfiles de entalpía en un plano xz.



Figuras 6.11 y 6.12 Trayectorias de las partículas en el dominio.

Las trayectorias descritas por las partículas se muestran en la figuras 6.11 y 6.12. El punto donde terminan tales trayectorias indican hasta que distancia éstas se evaporan y por ende terminan su interacción sobre la mezcla. Se puede observar que el aire también modifica las trayectorias de las gotas, pues muestran una curvatura muy pronunciada lo cual hace que se dieran los efectos mencionados en la concentración y entalpía de la fase continua mostradas anteriormente.



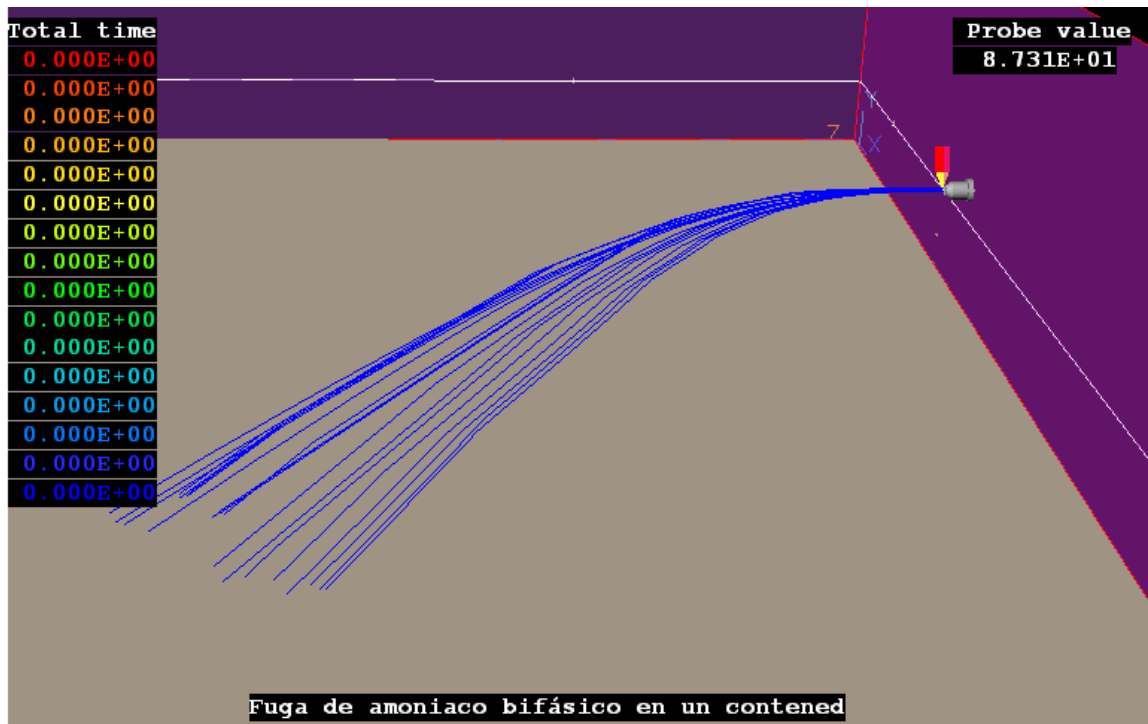


Figura 6.13 y 6.14 Acercamiento a las trayectorias de las partículas en el dominio.

Como se puede observar en las figuras 6.13 y 6.14, cada trayectoria marcada indica el camino recorrido por una gota de amoníaco, así que cada una de éstas tiene sus propias características, las cuales son irrepetibles entre si, pues para las primeras 20 partículas se genera un archivo independiente que contiene información de posición espacial, velocidad, diámetro y temperatura; para las restantes partículas se genera lo mismo pero en un solo archivo. Nos enfocaremos en los archivos de las partículas para analizar los resultados obtenidos en las propiedades de éstas.

En la figura 6.15, se puede notar la diferencia de temperaturas existente entre la fase dispersa y la fase continua, pues para ambas el comportamiento es distinto. Como se recuerda el amoníaco se encuentra a una temperatura de 266K (-7°C) mientras que el medio ambiente está a 300K (27°C). En el momento en que se inicia la descarga y ocurre el flasheo, que provoca que parte del amoníaco líquido se convierta en gas, el cual, como se ve en la gráfica, empieza a elevar de manera rápida su temperatura debido a la transferencia de energía en forma de calor por los alrededores, mientras que el amoníaco líquido debido a su estado, la transferencia de calor es más lenta por lo que la temperatura de la partícula siempre es menor que la de la fase continua.

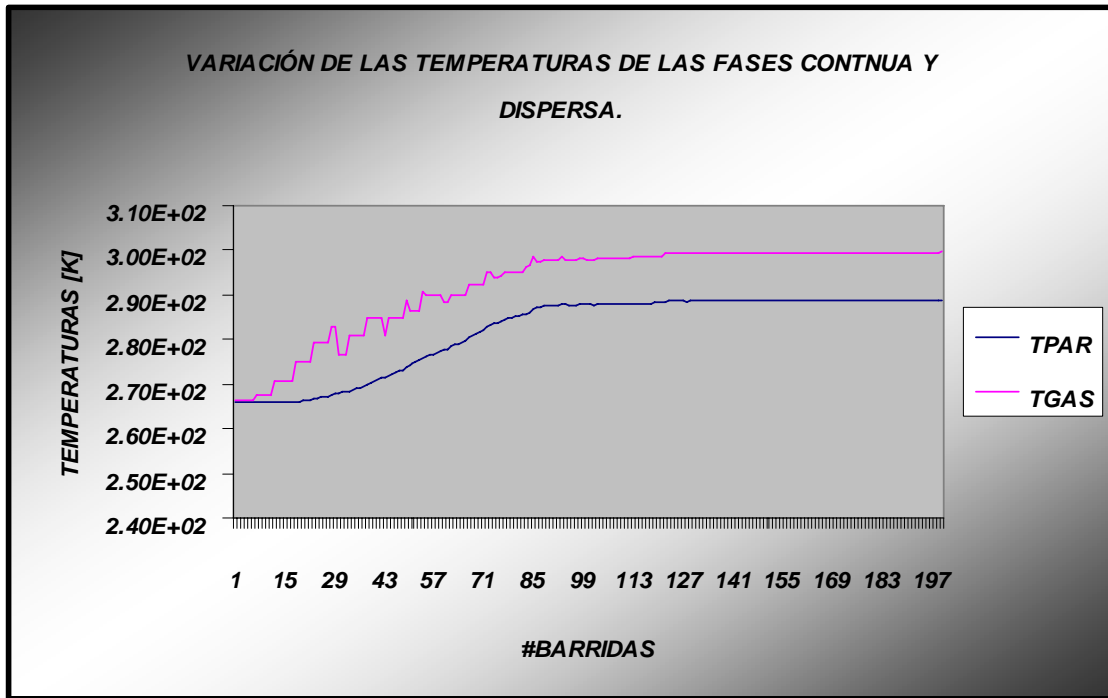


Figura 6.15 Gráfica de la variación de temperaturas de la fase continua y dispersa.

Este proceso va a producir que el diámetro de la partícula disminuya (figura 6.16).

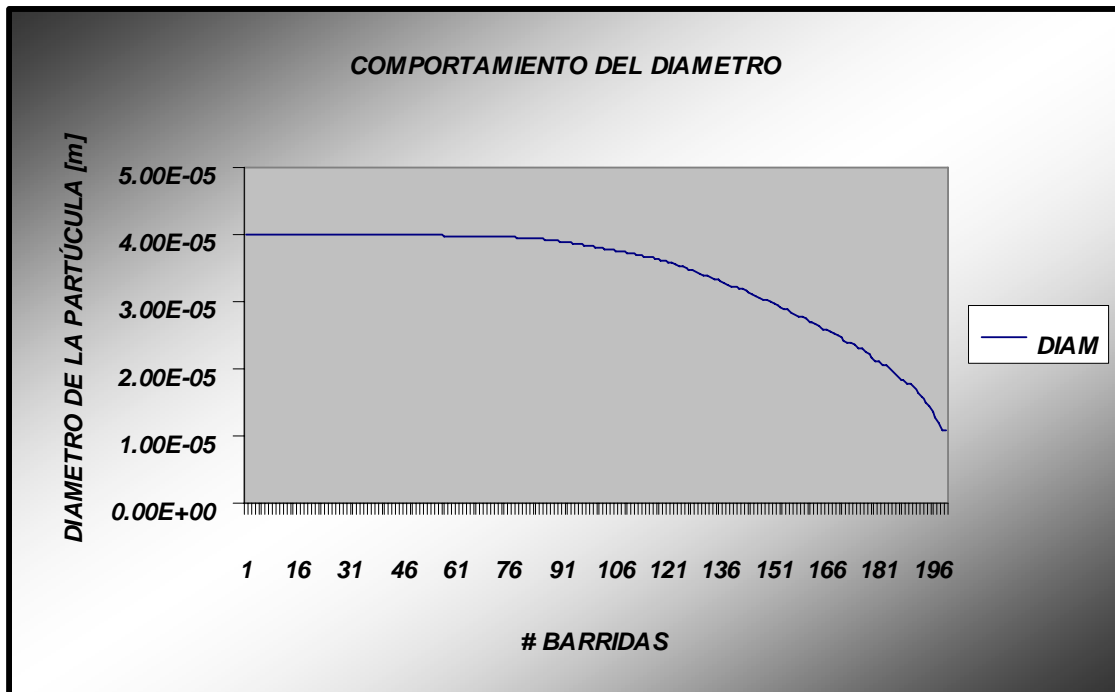


Figura 6.16 Comportamiento del diámetro de la partícula.

Con respecto a las partículas, en la figura 6.16 muestra el comportamiento del diámetro durante sus recorridos; se observa que conforme va avanzando la partícula en el dominio, se va reduciendo su diámetro debido a la transferencia de masa que existe entre ésta y la fase continua debido al intercambio de energía entre las fases.

Se puede observar que esta disminución de diámetro no ocurre en una zona cercana a la descarga debido a que la transferencia de calor no es todavía muy intensa entre las fases, pero conforme pasa el tiempo y sea aleja, la partícula va ganando energía para cambiar de fase y convertirse en amoníaco gaseoso.

Este intercambio de energía hace que exista una relación estrecha entre la temperatura y el diámetro de la partícula.

En la figura 6.17 se puede ver cómo disminuye el diámetro conforme aumenta la temperatura, debida a la transferencia de calor entre las fases que hace que la parte líquida vaya aumentando su temperatura hasta que cambia de fase y transfiera su masa a la fase gaseosa, por lo que su diámetro disminuye hasta desaparecer.

Se puede notar que cerca de la zona de descarga la diferencia entre las temperaturas de la fase continua y dispersa no varía por lo que todavía no existe una transferencia de calor significativa entre ambas y por eso el diámetro de la partícula casi no varía. Pero conforme la fase continua alcanza una temperatura cercana a la de los alrededores (300K), provoca se incremente el intercambio de energía entre ésta y la fase dispersa, aumentando la temperatura de la gota hasta llegar a una temperatura cercana a los 287 [K] y se dé un cambio repentino en su diámetro hasta desaparecer.

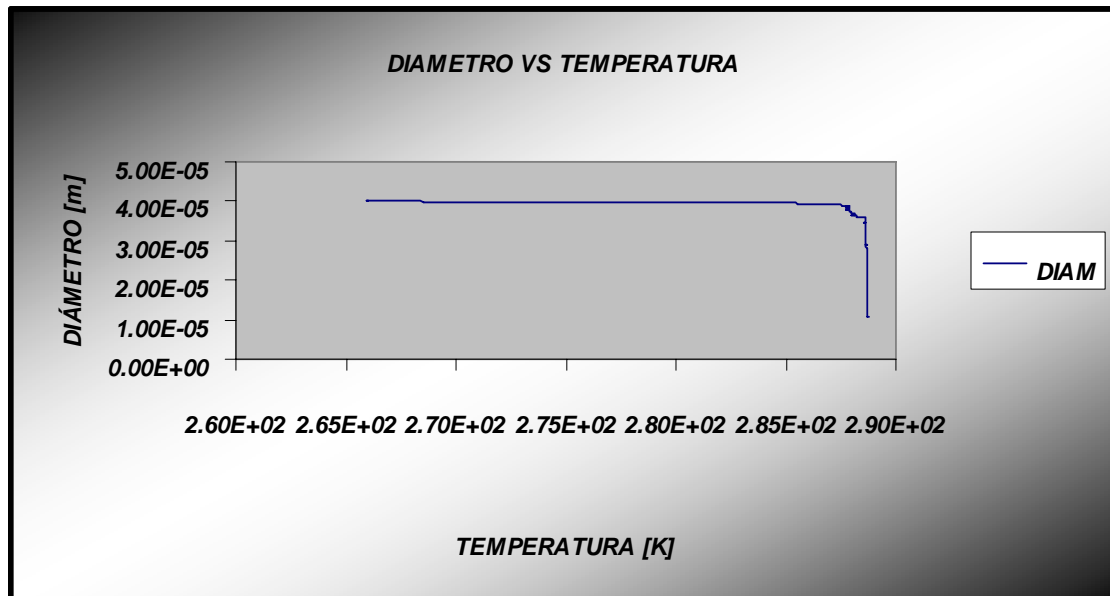
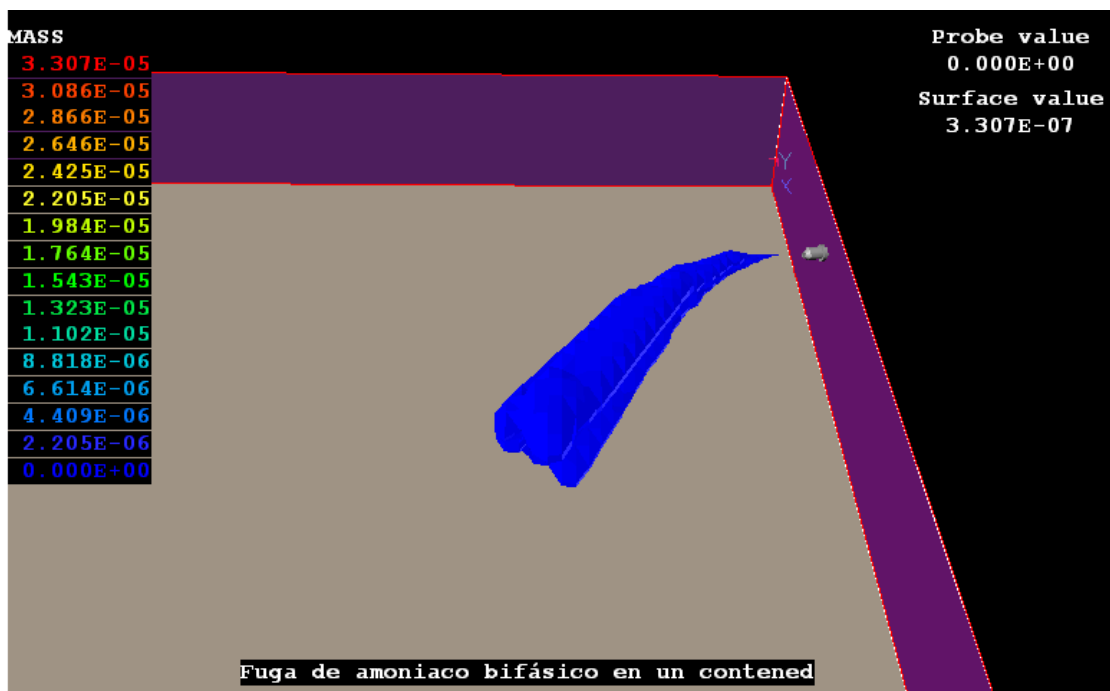
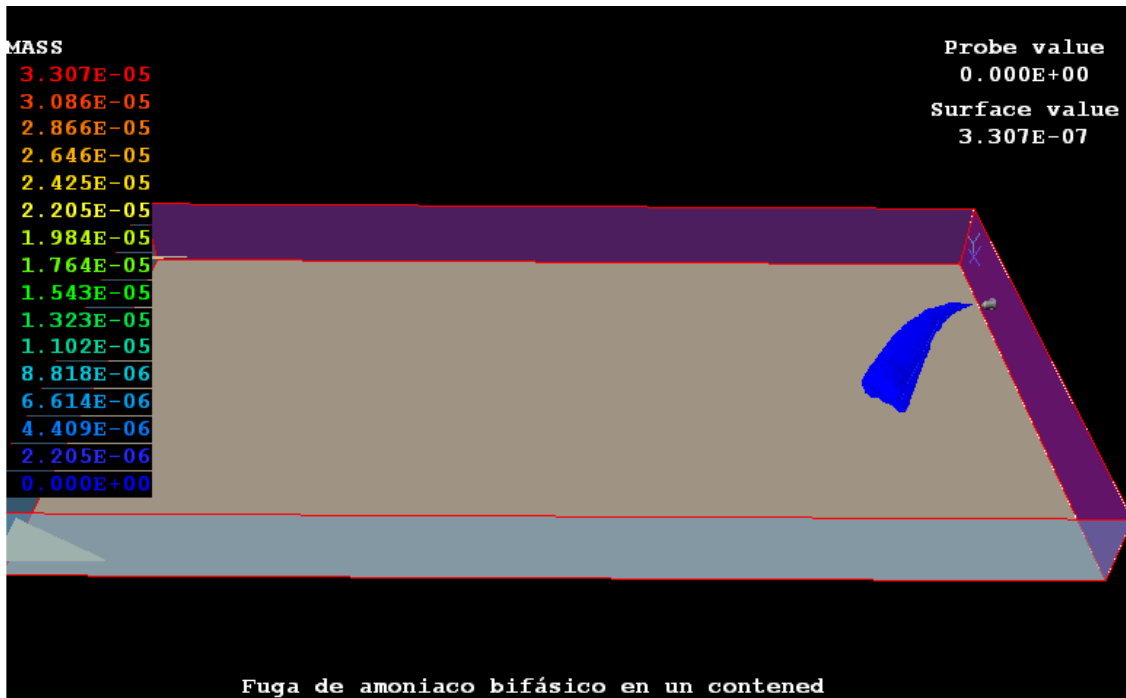


Figura 6.17 Comportamiento del diámetro con respecto a la temperatura.

Cabe mencionar que los comportamientos de temperatura, energía y disminución del diámetro descritos para la fase dispersa en este estudio son aplicables a cada partícula, ya que, aunque cada gota es distinta, los fenómenos físicos que se dan son los mismos. También es necesario hacer la observación de que todos esos fenómenos físicos dependen de la transferencia de energía y masa.

6.5 Transferencia de masa.

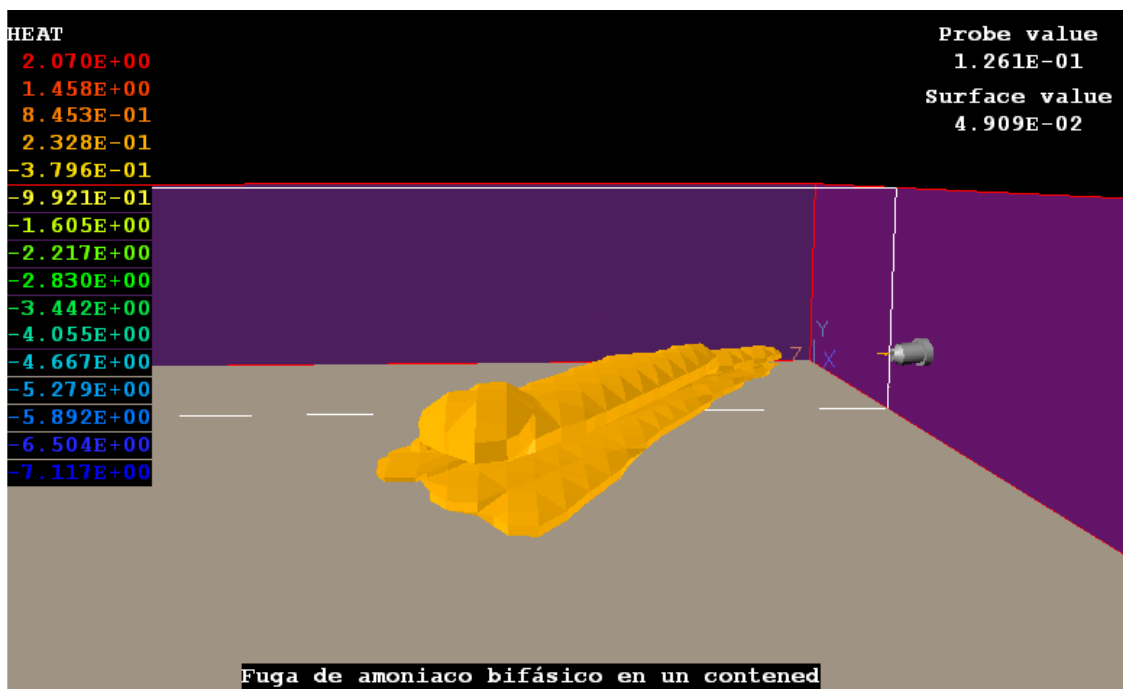
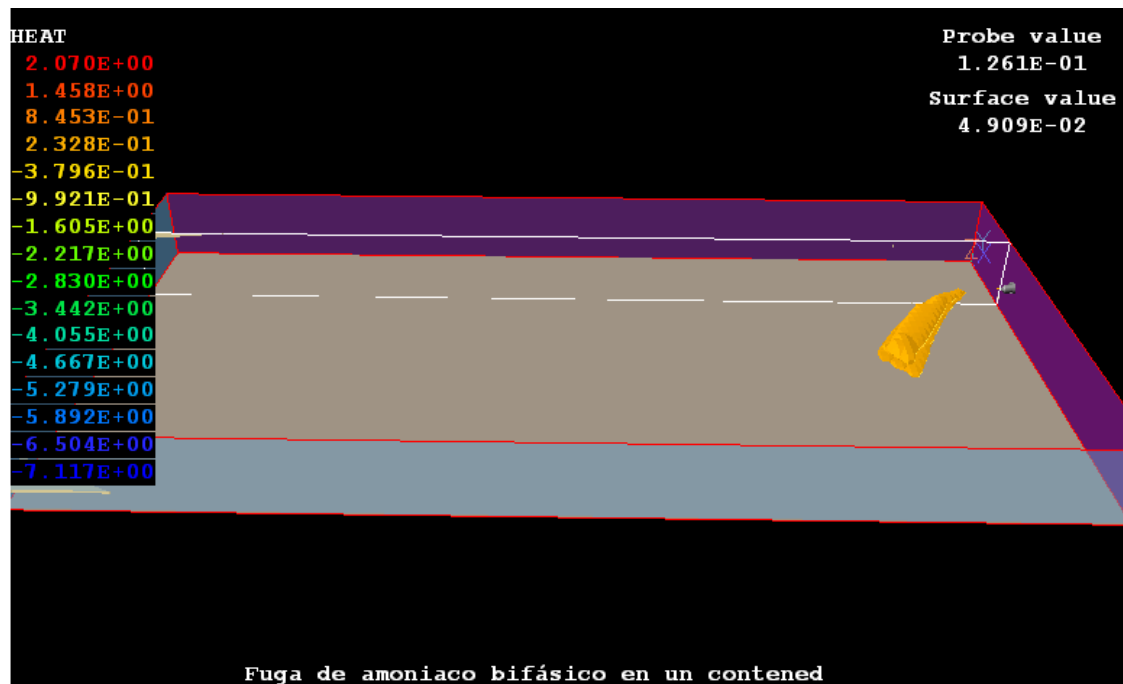
Como se menciona en el apartado anterior, un fenómeno que se da en este estudio es la transferencia de masa entre las fases dispersa y continua.



Figuras 6.18 y 6.19 Superficie de transferencia de masa.

En las figuras 6.18 y 6.19 se puede observar que la transferencia de masa durante la dispersión del chorro se da a lo largo del recorrido de las partículas en el dominio. Se puede notar que cerca de la descarga casi no se percibe la transferencia de masa, debido a que en esa área la diferencia de temperatura no es muy alta, pero conforme se aleja de la fuga, la transferencia de masa se va incrementando y tiene su máximo en el punto en el que las partículas se han evaporado completamente.

6.6 Transferencia de calor



Figuras 6.20 y 6.21 Superficie de transferencia de calor

La superficie de transferencia de calor predicho por los modelos para la dispersión del chorro de amoníaco simulado se muestra en las Figuras 6.20 y 6.21. Como se puede observar cerca de la zona de descarga existe un imperceptible intercambio de energía debido a la diferencia de temperatura entre los alrededores (300 [K]) y la mezcla de amoníaco (266 [K]), pero pasado esa etapa, la

transferencia de calor es casi nula debido a que la fase continua está comenzando a intercambiar energía con los alrededores, y una vez que ésta alcanza una temperatura cercana a los 300 [K] comienza intercambiar calor con la fase dispersa; y ese intercambio se va incrementando conforme las partículas van disminuyendo su diámetro y alcanza un punto máximo cuando éstas tienden a desaparecer.

6.7 Comparación de resultados

En el estudio realizado por el INERIS, solo muestra como resultados de su experimentación los relacionados con las concentraciones de amoníaco en los alrededores de la fuga ente una distancia de 20 a 800 metros en dirección del flujo de amoníaco que es mostrada en la figura 6.22 y en la tabla 6.1

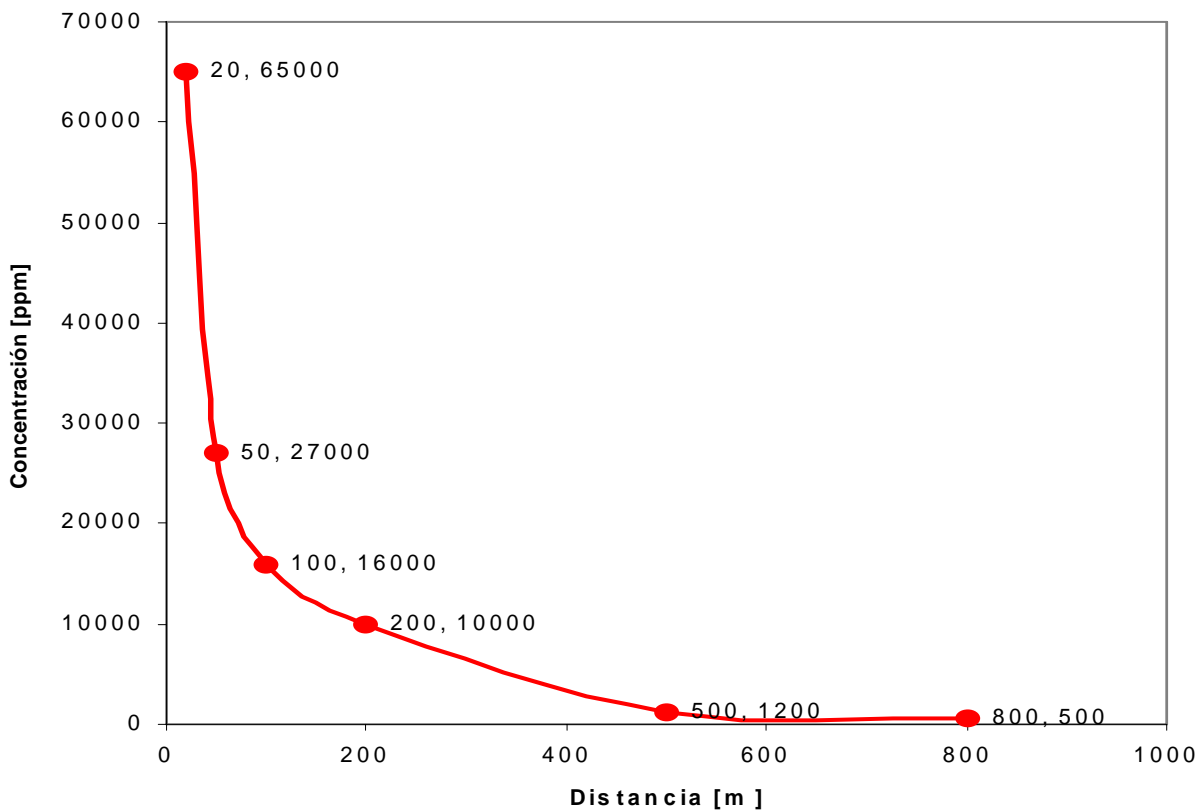


Figura 6.22 Resultados experimentales de concentraciones de amoníaco (Proporcionada por el INERIS).

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

Tabla 6.1 Resultados de concentración en el experimento

La figura 6.23 y tabla 6.2 muestran la comparación entre predicciones y datos experimentales para concentraciones de amoníaco en [ppm]. Esta comparación se presenta en dirección axial a la descarga de amoníaco.

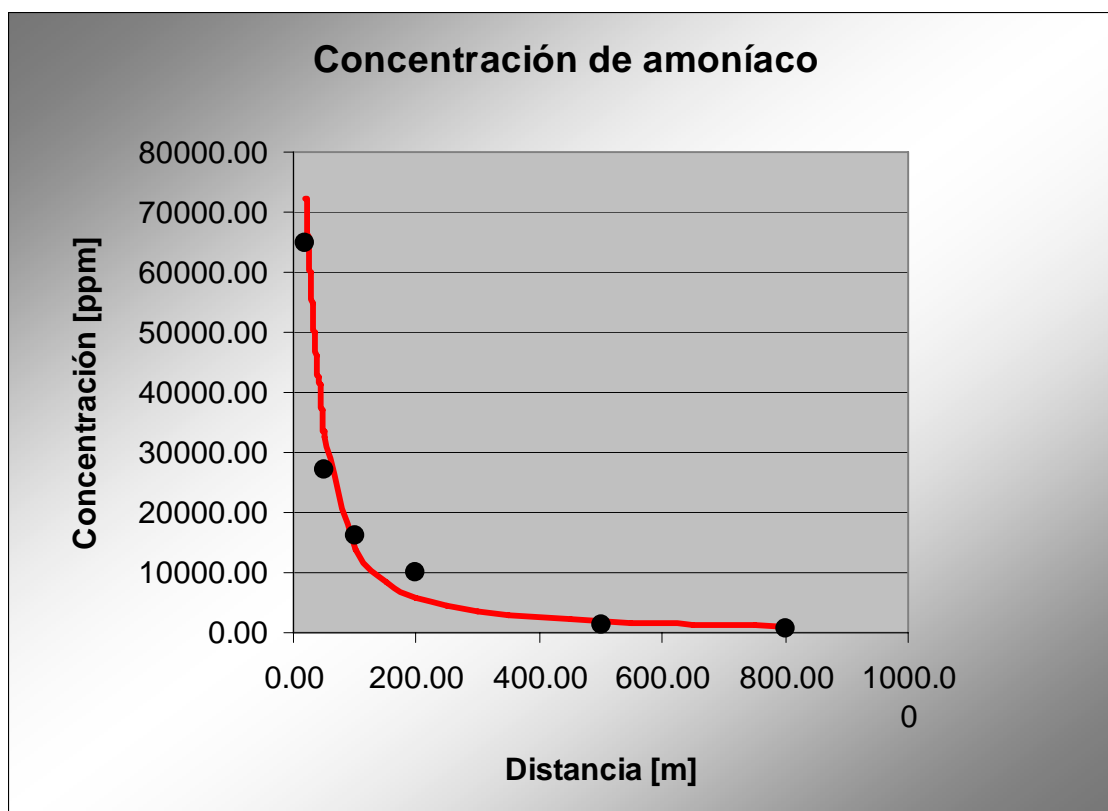


Tabla 6.23 Comparaciones de concentración de amoníaco entre predicciones numéricas — y datos experimentales ●

Distancia [m]	Concentración [ppm]
20	72000
50	32000
100	14000
200	7000
500	1900
800	900

Tabla 6.2 Resultados de concentración en la simulación

Como se observa de las figuras 6.23 y las tablas 6.1 y 6.2, los valores de concentración de ambas son cercanos entre ellos. Las diferencias se deben a las condiciones aleatorias en la experimentación, por ejemplo la dirección del viento que fluctuaba en el caso real. Por otro lado, estas diferencias se pueden deber a los modelos numéricos implementados en la simulación. Las diferencias en el caso de los 800 metros son del 80%. Sin embargo, cabe mencionar que estas cantidades son muy pequeñas (ppm) las cuales son difíciles de simular.

CAPITULO 7

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES PARA TRABAJOS FUTUROS

En este trabajo de tesis se simula numéricamente la dispersión de un chorro de amoníaco de gran escala descargado en una atmosfera con aire cruzado. El flujo presenta características bifásicas debidas a que el amoníaco está en fase líquida (gotas) y gaseosas. De este flujo se tienen datos experimentales que permitirán validar los modelos utilizados en la simulación. Para simular la dispersión turbulenta del chorro de amoníaco es usado un modelo Euleriano-lagrangiano. Para la interacción entre las fases gaseosa (fase continua) y líquida representada por las gotas de amoníaco (fase dispersa) se modelan los procesos de arrastre, transferencia de calor, intercambio de cantidad de movimiento y de masa, concentración y evaporación.

Las ecuaciones de transporte que gobiernan el movimiento del flujo son resueltas en términos de variables medias del flujo (alternativa de ecuaciones promediadas) mediante el método de volúmenes finitos, que es el utilizado por PHOENICS, el código de Dinámica de Fluidos Computacional utilizado en esta tesis.

Por lo que en este trabajo de tesis se obtuvieron las siguientes conclusiones:

- Las ecuaciones y fundamentos matemáticos aplicados en la simulación realizada fueron los más adecuados para la obtención de datos aproximados a los obtenidos en la experimentación.
- Las predicciones de concentraciones de amoniaco tienen una buena aproximación cuando son comparados con datos experimentales.

-
- La definición y estructura del mallado del dominio y la aplicación del método de volúmenes finitos para discretizar las ecuaciones de la conservación de la energía, de la cantidad de movimiento, de continuidad y de la conservación de especies ayudaron a la convergencia del programa para dar resultados próximos a los reales.
 - La implementación del programa GENTRA para la solución de las ecuaciones eulerianas-lagrangeanas nos permitió la obtención de datos importantes para la fase dispersa tales como velocidades, trayectorias, temperaturas y diámetros de cada partícula simulada.
 - El aire representa un papel muy importante en el cambio de velocidades de las fases, en la dispersión de la concentración de amoníaco y en los cambios que sufrieron las partículas en su trayectoria durante su recorrido por el dominio.
 - En lo que respecta al intercambio de calor entre las fases se comprende que fue debido a la diferencia de temperaturas, primero, entre los alrededores y la mezcla de amoníaco, y después entre el amoníaco gaseoso y el amoníaco líquido.
 - En el recorrido de las partículas dentro del dominio se va disminuyendo su diámetro como efecto de la diferencia de temperaturas entre las fases hasta formar parte de la fase continua, fenómeno que se esperaba que sucediese.
 - También se observó, mediante las imágenes, como se lleva a cabo la transferencia de masa y como ésta alcanza su máximo cuando las partículas ya están evaporadas por completo.
 - A partir del estudio e interpretación de resultados obtenidos, se hace destacar que la transferencia de masa y de calor dependen absolutamente del comportamiento de la temperatura de las fases a lo largo del dominio.
 - Este estudio se puede extender a otras sustancias que son utilizadas en las actividades industriales, para estudiar su comportamiento e identificar zonas de riesgo menor que ayuden a evitar pérdidas humanas en situaciones de siniestro.

-
- En cuestiones ambientales se puede decir que la realización de una simulación puede ayudar a estudiar los impactos ambientales y sociales producidos por un accidente industrial.
 - Este estudio puede ser ampliado al análisis del impacto en el costo energético y por ende un costo económico al darse una fuga de una sustancia en un proceso industrial.
 - La simulación numérica es un proceso y una herramienta factible y confiable que permite la realización de diversos estudios sin la necesidad de implementarlos en tiempo y forma, evitando los riesgos humanos y ambientales que conlleva realizar una experimentación.

BIBLIOGRAFIA

- [1] 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.
- [2] R. Aris. *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences. 1962.
- [3] J. Warnatz, U. Mass, and R. W. Dibble. *Combustion*. Springer. 1996.
- [4] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Second edition, the Benjamin/Cummings Publishing Company. 1985.
- [5] A. Favre. *Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics*. SIAM, , 1969.
- [6] W. P. Jones. Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion. In W. Kollmann, editor, *Prediction Methods for Turbulent Flows*, Lecture Series 1979-2. Von Karman Institute for Fluid Dynamics. Rhode Saint Genese Belgium, January 1979.
- [7] W. P. Jones. *Turbulence Modeling and Numerical Solutions Methods for Variable Density and Combustion Flows*, pages 306-374. Academic Press.1994.
- [8] R. P. Lindstedt and E. M. Váos. Modeling of Premixed Flames with Second Moment Methods. *Combustion and Flame*, 116:461-485, 1999.
- [9] J. A. Blasco, N. Fueyo, C. Dopazo, and J. Ballester. Modeling the Temporal Evolution of a Reduced Combustion Chemical System with an Artificial Neuronal Network. *Combustion and Flame*, 113:38-52, 1998.
- [10] J. Blint. The Relationship of Laminar Flame Width to Flame Speed. *Combustion Science and Technology*, 49:79-92, 1986.

[11] J.C. Ludwig, N.Fueyo, M.R. Malin The GENTRA User Guide, CHAM/TR211, CHAM, PHOENICS 2006

[12] S. V. Patankar. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. Hemisphere Publishing Corporation, January 1980.

[13] H. H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag. 1996.

[14] S. V. Patankar and D. B. Spalding. A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three Dimensional Parabolic Flows. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 15:1787-1806, 1972.

[15] D. B. Spalding. Mathematical Modeling of Fluid Dynamics, Heat Transfer and Mass Transfer Processes, Technical Report HTS/8011, Imperial College of Science Technology and Medicine, 1980.

[16] J. C. Ludwig, H. Q. Qin, and D. B. Spalding. The PHOENICS Reference Manual. Technical Report CHAM TR/200, CHAM Ltd, London, 1989.

[17] Bouet Rémy, *Ammoniac Essais de Dispersion atmosphérique à grande échelle*, INERIS Francia 1999.