



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

---

## FACULTAD DE INGENIERÍA

“SIMULACIÓN NUMÉRICA DE LA  
DISPERSIÓN TURBULENTO DE UN  
CHORRO DESCARGADO EN UNA  
ATMÓSFERA NEUTRA”

T E S I S  
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
INGENIERO MECÁNICO

P R E S E N T A:

LUIS MIGUEL ZURITA LUNA



DIRECTOR DE TESIS: DR. WILLIAM VICENTE Y RODRÍGUEZ

MÉXICO, D.F. CD. UNIVERSITARIA

Diciembre 2007

## AGRADECIMIENTOS

Este trabajo de Tesis está dedicado a mi madre, quien con su apoyo incondicional me ayudó durante todo el camino que me condujo a llegar a esta meta que me propuse en mi vida, te doy gracias mamá por todo el esfuerzo y empeño empleados durante todos estos años para que yo pudiera ser una persona mejor, una persona preparada para afrontar las diversidades de la vida con una sólida educación que tu formaste desde la base, gracias por apoyarme hasta el último momento y espero que ese apoyo materno del cual siempre he disfrutado nunca se acabe y siga siendo tan fuerte eternamente.

Gracias Ale, por tu constante apoyo, sin el cual hubiera sido muy difícil concluir, gracias también por la confianza que depositaste en mi y por alentarme siempre a dar el último paso, sabes que te amo y que siempre será así, por favor sigue apoyándome en todas las metas que me proponga y nunca me quites tu confianza.

Gracias a mis compañeros y amigos que me acompañaron en el duro camino de terminar una carrera universitaria, gracias Juan Luis, David, León, quiero expresar que fue muy importante contar con ustedes en estos años de arduo esfuerzo, nunca los olvidaré a pesar del tiempo y la distancia.

Gracias a todos mis familiares y en especial mención a Jesús Jiménez Sanabria quien me ayudó enormemente a lo largo de mis estudios, gracias por tus consejos, tus anécdotas y relatos, fueron de gran ayuda para mentalizarme a lograr esta añorada meta, sin duda alguna fuiste, eres y serás un gran ejemplo para mí.

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México y a todos los profesores y académicos que participaron en brindarme una educación y preparación de calidad, de las mejores del mundo, puesto que me formaron como

un profesionalista con conocimientos científicos, tecnológicos y éticos que son muy valiosos para cualquier ser humano.

Gracias a mi director de tesis el Dr. William Vicente y Rodríguez por su paciencia, por dirigirme en este trabajo de investigación compartiendo sus conocimientos científicos conmigo y por darme todos aquellos consejos que contribuyeron a que este proyecto fuera un éxito.

Doy gracias a Dios por poner en mi camino a tantas excelentes personas a mi alrededor, por concederme salud e inteligencia para obtener este gran logro en mi vida que prometo no será el último.

Con cariño  
Luis Miguel

# ÍNDICE GENERAL

## *CAPÍTULO 1*

### *INTRODUCCIÓN*

1.1 Objetivo de la tesis.....	1
1.2 Generalidades .....	1
1.2.1 Métodos de predicción.....	3
1.2.2 Estructura de la tesis.....	5

## *CAPÍTULO 2*

### *ECUACIONES DE TRANSPORTE*

2.1 Introducción.....	6
2.2 Ecuación de continuidad.....	7
2.3 Ecuación de la conservación de la cantidad de movimiento.....	7
2.4 Ecuación de conservación de la especie química.....	8
2.5 Promedio de las ecuaciones.....	8

## *CAPÍTULO 3*

### *MÉTODO DE SOLUCIÓN*

3.1 Introducción.....	12
3.2 Método de volúmenes finitos.....	12

## *CAPÍTULO 4*

### *MODELO ANALÍTICO DE DISPERSIÓN DE UNA DESCARGA*

4.1 Introducción .....	19
4.2 Descripción de la dispersión turbulenta de una descarga de fluido a la atmósfera.....	19
4.3 Descripción del modelo.....	22
4.4 Estimación de la elevación del penacho.....	24
4.4.1 Factores que influyen en la dispersión del penacho.....	26
4.5 Coeficiente de dispersión.....	28

## *CAPÍTULO 5*

### *DISPERSIÓN DE UNA DESCARGA DE FLUIDO EN LA ATMÓSFERA*

5.1	Introducción.....	32
5.2	Configuración a simular.....	32
5.3	Detalles numéricos.....	33
5.3.1	Condiciones de frontera.....	37
5.4	Resultados del modelo numérico.....	38
5.5	Comparaciones entre el modelo numérico y el modelo teórico de Pasquill-Gifford.....	46

## *CAPÍTULO 6*

### *CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES*

6.1	Introducción.....	51
6.2	Dispersión de gas.....	51
6.3	Recomendaciones para trabajos futuros.....	53

## *APÉNDICE I*

### *MODELOS DE TURBULENCIA*

1	Cierres de segundo orden.....	54
2	Modelos de viscosidad turbulenta.....	58
3	Modelo $k - \varepsilon$ (modelo de turbulencia utilizado en esta tesis).....	59

## *APÉNDICE II*

### *ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN*

1	Esquemas lineales.....	63
1.1	Diferencias desplazadas de primer orden.....	63
2	Diferencias centradas.....	63
3	Híbrido.....	64

## *APÉNDICE III*

	<i>ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA Q1</i> .....	65
--	---	----

	<i>BIBLIOGRAFÍA</i> .....	72
--	---------------------------	----

## NOMENCLATURA

<i>Símbolo</i>	<i>Descripción</i>	<i>Unidades</i>
$C$	Concentración de gas	[Kg/m <sup>3</sup> ]
$G$	intensidad de la emisión o gasto másico	[Kg/s]
$z$	altura de la fuente emisora sobre el suelo	[m]
$H$	altura de la fuente emisora sobre el suelo más la elevación del penacho	[m]
$\Delta h$	elevación del penacho	[m]
$\sigma_y$	coeficiente de dispersión en dirección "y"	[m]
$\sigma_z$	coeficiente de dispersión en dirección "z"	[m]
$V_s$	velocidad de salida del contaminante	[m/s]
$d$	diámetro interno de la fuente de emanación	[m]
$u$	velocidad del viento	[m/s]
$P$	presión atmosférica	[mbar]
$T_s$	temperatura del contaminante	[K]
$T_a$	temperatura ambiente atmosférica	[K]
$u_z$	velocidad del viento a la altura de la fuente de emanación	[m/s]
$u_{10}$	velocidad del viento a la altura de 10 metros	[m/s]
$p$	coeficiente exponencial	adimensional

---

# *CAPÍTULO 1*

---

## *INTRODUCCIÓN*

### **1.1 Objetivo de la tesis**

El objetivo de esta tesis es simular numéricamente la dispersión turbulenta de un gas pasivo o neutro (densidad similar a la del aire) que es descargado en una atmósfera neutra. La simulación numérica se realiza con la alternativa de las ecuaciones promediadas. El término de convección turbulenta resultante del promedio de las ecuaciones se modela mediante el modelo de turbulencia  $k - \epsilon$ . El sistema se simula en 3 dimensiones y los resultados se comparan con los de un modelo teórico gaussiano.

### **1.2 Generalidades**

En la actualidad existen diversas sustancias que son descargadas en la atmósfera, que pueden resultar nocivas tanto para el ser humano como para el medio ambiente. Estas sustancias están presentes, principalmente, en fase sólida, líquida o gaseosa, o una mezcla de ellas, y el medio ambiente en el que son emitidas puede tener múltiples condiciones atmosféricas. Las descargas pueden ser naturales o producidas por el hombre. Este trabajo se enfoca en estas últimas, por lo que, la descarga de materia se hace generalmente mediante el uso de un dispositivo construido para tal propósito, por ejemplo chimeneas. Estas descargas también se pueden originar por orificios o roturas de recipientes de proceso, por juntas de unión en bridas o por válvulas y venteos de emergencia, así como por fallas en los ductos que transportan el fluido, lo anterior debido principalmente a la corrosión.

En las grandes ciudades, un ejemplo evidente de estas descargas se tiene en las industrias, que debido a sus procesos de combustión, tienen la necesidad de emitir los gases producto de la reacción a la atmósfera mediante chimeneas diseñadas para tal fin. En la figura 1.1 se muestra esquemáticamente este proceso. Los efectos que tienen estos gases en el ser humano y el medio ambiente son función de su capacidad de dispersión, que dependen de las características del chorro y de las condiciones atmosféricas. Lo anterior se trata con más detalle en los siguientes capítulos.



*Figura 1.1: Representación esquemática de una fuente (chimenea) descargando gas a la atmósfera.*

Otro ejemplo que origina una descarga al ambiente se encuentra en los rellenos sanitarios, donde se tienen pozos de venteo cilíndricos y verticales, que despiden directamente a la atmósfera una sustancia gaseosa y peligrosa llamada biogás. Este



gas es el resultado de los procesos de descomposición de los residuos orgánicos en un ambiente anaerobio (sin oxígeno).

Dichos pozos tienen la finalidad de evacuar el biogás y evitar que éste quede atrapado bajo la basura compactada y de esta forma prevenir un desastre, debido a que el biogás es un fluido que puede quemarse y despedir grandes cantidades de calor.

La dispersión del fluido en el medio ambiente en el cual se descarga puede propiciar condiciones peligrosas, por lo que es necesario contar con herramientas de predicción que nos permitan establecer su comportamiento bajo diferentes condiciones, tanto atmosféricas como las del flujo que sale de la chimenea, que la mayoría de las veces es turbulento.

En este trabajo de tesis, el sistema se analiza mediante simulación numérica, que presenta la característica de ser menos costosa y con requerimientos temporales menores, comparada con un trabajo experimental que demanda un prototipo o un modelo físico a escala, que en algunas ocasiones es difícil construir. El análisis numérico proporciona información completa y detallada de las variables relevantes del flujo. En un análisis con un modelo físico, serían necesarias técnicas de mediciones fiables y no intrusivas, que en muchas ocasiones son difíciles de implementar en el prototipo o modelo.

### **1.2.1 Métodos de predicción**

Haciendo referencia a lo anterior, el objetivo de esta tesis es el análisis de la dispersión turbulenta de la descarga de un gas pasivo o neutro, es decir, que tiene una densidad similar a la del aire atmosférico donde es emitido. Para simular el flujo se utiliza la alternativa de las ecuaciones promediadas (Reynolds Averaged Navier-Stokes Equations, RANS), la cual es extensamente utilizada en casos prácticos de interés industrial, y que consiste en promediar todas las escalas espaciales y temporales de las fluctuaciones turbulentas y resolver las ecuaciones de transporte en términos de las variables medias del sistema. El término de

convección turbulenta, que resulta del promediado de las ecuaciones se simula con el modelo de turbulencia  $k - \epsilon$ . Las ecuaciones se resuelven mediante un método de volúmenes finitos, el cual se explica más adelante. El sistema se simula en 3 dimensiones y en coordenadas cartesianas. El acoplamiento entre la presión y la velocidad se representa con el modelo SIMPLE [11].

Existen otras dos alternativas para la simulación del flujo aparte del uso de las Ecuaciones Promediadas (Reynolds, Averaged Navier-Stokes Equations, RANS): la Simulación Numérica Directa (Direct Numerical Simulations, DNS) y el uso de la Simulación de Grandes Escalas (Large Eddy Simulation, LES).

La DNS consiste en discretizar directamente las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo reactivo, válidas tanto para flujo laminar como para flujo turbulento, y resolverlas numéricamente. Las ecuaciones que se resuelven son las de conservación de masa, las de cantidad de movimiento y la de la especie química conservada. La discretización resuelve todas las escalas, espaciales y temporales de las variables de flujo y por tanto no requiere de ninguna aproximación o modelo. Para calcular todas las escalas en un flujo turbulento sin reacción, el número de puntos de la discretización espaciales y temporales son funciones del número de Reynolds elevado al cubo ([1 y 2]). Como el flujo del sistema de interés es casi siempre turbulento y con número de Reynolds alto, la aplicación de este método está limitada a la potencia de los equipos de cálculo.

La aproximación de la Simulación de las Grandes Escalas trata de resolver las ecuaciones para las fluctuaciones de mayor tamaño, modelando el efecto de las pequeñas fluctuaciones sobre ellas [4]. Aunque esta técnica puede mejorar sustancialmente la predicción de la aerodinámica del flujo, sobre todo en flujos con estructuras transitorias de vorticidad que dominan los procesos, sigue teniendo un alto costo en memoria y tiempo de cómputo, ya que los cálculos siguen siendo tridimensionales.

Por tales características de la DNS y LES, se discierne que la opción más viable para el estudio del fenómeno a tratar es la alternativa RANS. Esta alternativa es usada en el código numérico de Dinámica de Fluidos Computacional, PHOENICS

(Parabolic Hyperbolic or Elliptic Numerical Integration Code Series), que es el código utilizado para la simulación del sistema a resolver en esta tesis.

Estos resultados son comparados con los calculados por un modelo analítico. Éste es el modelo gaussiano de Pasquill-Gifford, que describe la dispersión turbulenta de un gas neutro lejos de la fuente.

### **1.2.2 Estructura de la tesis**

A continuación de este capítulo introductorio, en donde se explican algunos motivos que propiciaron la elaboración de esta tesis, se presenta el capítulo 2, en el cual se describen las ecuaciones instantáneas que gobiernan el movimiento del flujo que se dispersa en el ambiente. En este capítulo también se deducen las ecuaciones promediadas que resuelven el modelo numérico.

En el capítulo 3, se expone un método de volúmenes finitos, que es utilizado en la resolución de las ecuaciones de transporte que describen la descarga de gas a la atmósfera.

Posteriormente, se presenta en el capítulo 4, el modelo analítico que permite estimar la concentración de un gas descargado en la atmósfera tomando en cuenta factores como las condiciones meteorológicas.

En el capítulo 5 se muestran los resultados de la simulación numérica mediante la alternativa RANS y se comparan estas predicciones con las del modelo analítico del capítulo 4.

Para finalizar se exponen las conclusiones generadas de este trabajo, así como recomendaciones para trabajos futuros.

---

## *CAPÍTULO 2*

---

### *ECUACIONES DE TRANSPORTE*

#### **2.1 Introducción**

En este capítulo se presentan las ecuaciones que gobiernan la dispersión del fluido cuando es descargado en la atmósfera.

En el capítulo anterior se mencionaron las tres alternativas utilizadas para la simulación para flujos turbulentos: Simulación Numérica Directa (Direct Numerical Simulations, DNS), Simulación de Grandes Escalas (Large Eddy Simulation, LES) y el uso de las Ecuaciones Promediadas (Reynolds, Averaged Navier-Stokes Equations, RANS). Las exigencias computacionales de DNS la hacen inviable, excepto para número de Reynolds bajos, configuraciones sencillas y cinéticas químicas muy simples. La alternativa LES es menos exigente computacionalmente, pero aún así demanda medios de cómputo avanzados, puesto que se requiere siempre un cálculo en tres dimensiones.

Por el motivo anterior, la alternativa utilizada en esta tesis es el promedio de las ecuaciones de Navier-Stokes (RANS), que se presenta en la última parte de este capítulo.

Las ecuaciones que gobiernan el movimiento del flujo son: continuidad, cantidad de movimiento y especie química conservada. Estas se presentan a continuación en coordenadas cartesianas.

## 2.2. Ecuación de continuidad

La ecuación de continuidad expresa la conservación de masa. Esta ecuación es:

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

Donde  $\vec{v}$  y  $\rho$  son la velocidad y la densidad instantáneas de la mezcla respectivamente.

## 2.3 Ecuación de la conservación de la cantidad de movimiento

La ecuación de la cantidad de movimiento es:

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

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

El tensor de esfuerzos viscosos, según la ley de Navier-Poisson para fluidos newtonianos esta dado como:

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

donde  $\mu$  es la viscosidad molecular de la mezcla,  $\mu_v$  es el coeficiente de viscosidad volumétrico, y  $\vec{\delta}$  es la delta de Kronecker. Por lo general el coeficiente de viscosidad volumétrica se desprecia.

Si se sustituye la ecuación (2.3) en la (2.2), podremos obtener las ecuaciones de Navier Stokes.

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

## 2.4 Ecuación de conservación de la especie química

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

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

Donde  $m_\alpha$  es la masa de la especie y  $m_T$  es la masa total de la mezcla (contenida en el mismo volumen). De acuerdo con la ecuación 2.5, la suma de todas las fracciones másicas de las especies es  $\sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha = 1$ .

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

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

Para  $\alpha=1\dots N$

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

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

## 2.5 Promedio de las ecuaciones

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

El promedio de las ecuaciones instantáneas de conservación es una de las alternativas para la simulación de flujos turbulentos. Con este método se promedian todas las fluctuaciones de las escalas temporales y se resuelven

ecuaciones de transporte para los valores medios de las propiedades del fluido. Estas ecuaciones no son cerradas, por lo cual se requieren modelos que reemplacen los términos no cerrados.

Hay dos tipos de promedio. Uno es el promedio de Reynolds, el cual toma a la densidad como constante, y el otro es el promedio de Favre (2.10), que es ponderado con la densidad.

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

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (2.7)$$

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (2.8)$$

Donde  $(\bar{\phi} \text{ y } \tilde{\phi})$  son los promediados, los cuales están definidos como:

$$\bar{\phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \phi^{(i)} \quad \text{Promedio muestral de Reynolds} \quad (2.9)$$

$$\tilde{\phi} = \lim_{n_e \rightarrow \infty} \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} \rho^{(i)} \phi^{(i)} \quad \text{Promedio muestral de Favre} \quad (2.10)$$

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

De las definiciones anteriores:

$$\bar{\rho} \bar{\phi}'' = 0 \quad \bar{\phi}'' = 0 \quad (2.11)$$

Con la definición de los promedios se obtiene:

$$\phi = \tilde{\phi} + \bar{\phi}'' \quad (2.12)$$

$$\phi = \frac{\rho' \bar{\phi}''}{\rho'} \quad (2.13)$$

$$\overline{\rho' \phi''} = \overline{\rho'} \overline{\phi''} \quad (2.14)$$

$$\overline{u_i \phi'} = u_i \phi'' + \frac{\overline{\rho' \phi''}}{\overline{\rho}} + \overline{u_i \phi''} \quad (2.15)$$

Si se aplica el valor promediado de Reynolds a las ecuaciones instantáneas de continuidad, cantidad de movimiento, y especie química, se obtiene:

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{v}}) = 0 \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \mathbf{v}}) + \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{v} \mathbf{v}}) = -\nabla \overline{p} + \nabla \left[ \mu \left( \nabla \tilde{\mathbf{v}} + (\nabla \tilde{\mathbf{v}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{v}}) \tilde{\mathbf{I}} \right) \right] + \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{v}'' \mathbf{v}''}) + \overline{p \mathbf{g}} \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho Y_\alpha}) + \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{v} Y_\alpha}) = \nabla \cdot \Gamma_\alpha \nabla Y_\alpha - \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{v}'' Y_\alpha}) + S_\alpha \quad (2.18)$$

Las ecuaciones anteriores tienen una forma idéntica a las correspondientes ecuaciones instantáneas, con un término adicional ( $u_i \phi''$ ), que involucra las fluctuaciones de velocidad y el escalar  $\phi$ , y que representa físicamente el transporte convectivo de  $\phi$  por movimientos turbulentos. En flujos turbulentos el término (//) de las ecuaciones anteriores es generalmente despreciable ante (//). Por lo tanto, las ecuaciones (2.16), (2.17) y (2.18), se escriben como:

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{v}}) = 0 \quad (2.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho \mathbf{v}}) + \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{v} \mathbf{v}}) = -\nabla \overline{p} + \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{v}'' \mathbf{v}''}) + \overline{p \mathbf{g}} \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\overline{\rho Y_\alpha}) + \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{v} Y_\alpha}) = -\nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{v}'' Y_\alpha}) \quad (2.21)$$



Los flujos turbulentos  $v''\Phi''$  de las ecuaciones (2.19), (2.20), y (2.21) son términos desconocidos que requieren modelización. El cierre del término  $\bar{\rho}v''v''$  de la ecuación media de cantidad de movimiento (2.20) se trata en el apéndice I.

El tratamiento del término  $\bar{\rho}v''\tilde{\phi}_z''$ , (ecuación 2.21) se puede consultar en Jones et al [8], (donde  $\tilde{\phi}_z$  representa la fracción másica, en este caso de la especie conservadas).

En las ecuaciones anteriores la densidad se supone constante.

## *CAPÍTULO 3*

---

### *MÉTODO DE SOLUCIÓN*

#### **3.1 Introducción**

En este capítulo se presenta el método de solución de las ecuaciones que gobiernan el flujo turbulento de una dispersión, las cuales tratamos en el capítulo anterior de esta tesis.

Para resolver las ecuaciones que caracterizan la aerodinámica del flujo medio se utiliza el método de volúmenes finitos, que se describe a continuación.

#### **3.2 Método de volúmenes finitos**

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

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

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

La ecuación (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 fluido-dinámica computacional, por ejemplo en Patankar, Ferziger y Peric.

En el caso de una malla cartesiana, secuenciada (“staggered”) y uniforme (celdas de iguales dimensiones espaciales), un volumen de control bidimensional (por sencillez) es como el que se muestra en la figura 3.2. (el espesor de la celda en dirección z puede considerarse la unidad.) En una malla secuenciada, las variaciones se encuentran definidas en el centro de la celda, mientras que los componentes de velocidad correspondientes a la celda se encuentran desplazados 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 las direcciones x e y y como Low y High (en inglés) en la dirección z. Las caras de la celda se denotan 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.

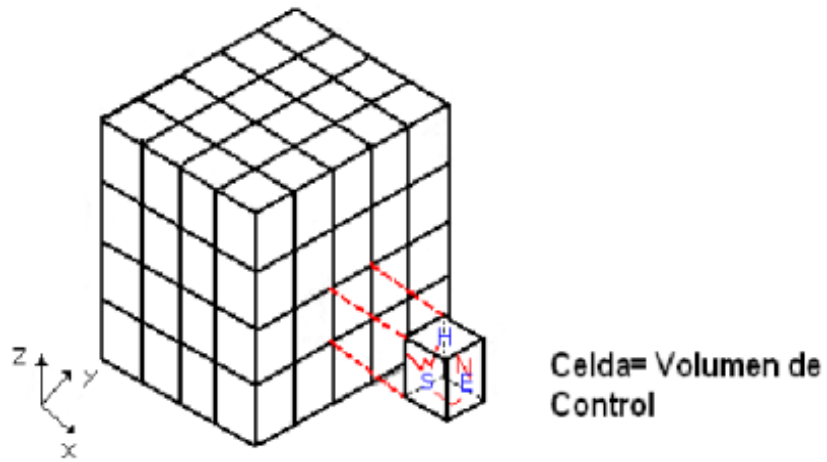


Figura 3.1: Representación del sistema discretizado en volúmenes finitos.

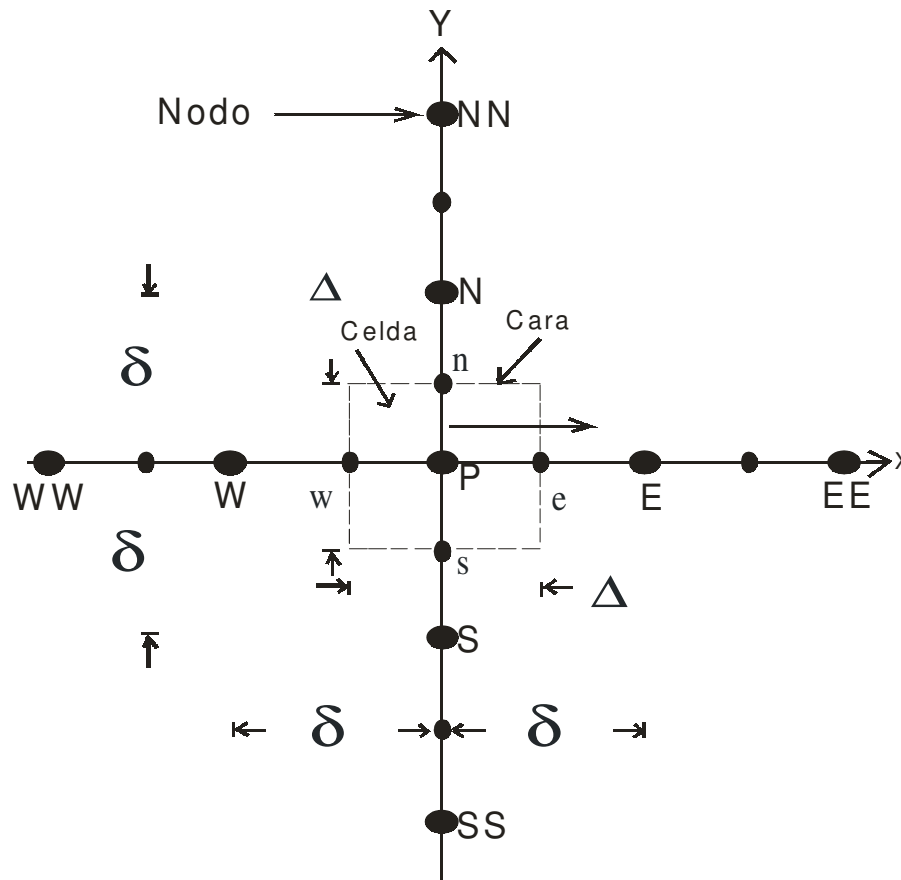


Figura 3.2: Diagrama esquemático de un volumen de control bidimensional.

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

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

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

donde  $\tilde{v}_i$  es la velocidad en la cara  $i$ ,  $\delta i$  es la distancia entre los nodos que incluyen la cara  $i$  y  $Pe$  es de número de Peclet, que es la fracción entre la convección y la difusión,  $\bar{v}$  es la velocidad en la cara  $i$  y  $x_i$ . (Las expresiones  $F$  y  $D$  representan el efecto de los términos convectivo y difusivo de la ecuación de transporte (3.1) respectivamente)

Los coeficientes  $a_i$  de la ecuación (3.2) son:

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

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

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

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

Para determinar  $F_i$  se necesita conocer  $\bar{\rho}$  y  $\tilde{u}_i$  en la cara de la celda. El cálculo del término convectivo de la ecuación de transporte (3.1) requiere también el conocimiento de la variable escalar,  $\tilde{\phi}$ , en la cara de la celda. La velocidad  $\tilde{v}_i$  está calculada en la cara de la malla secuenciada; pero  $\bar{\rho}$  y  $\tilde{\phi}$  están calculados en el nodo y necesitan ser interpolados a la cara para calcular los coeficientes  $a_i$  de la ecuación discretizada (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  $\tilde{\phi}_i$  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:

$$f(|Pe|) = \max(0.1 - 0.5|Pe|) \quad (3.6)$$

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

El coeficiente para el término transitorio es:

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

Para el cálculo del término  $D_i$  (3.5) se necesita obtener el coeficiente de difusión,  $\Gamma$ , en la cara de la celda. El coeficiente  $\Gamma$  no es necesariamente una constante, sino probablemente función de valores variables que se conocen en los nodos (por ejemplo, la temperatura), y por lo 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)  $\bar{\delta}_\phi$ , se linealiza como:

$$\bar{\delta}_\phi = \bar{\delta}_{\phi,c} + \bar{\delta}_{\phi,v} \bar{\phi} P \quad (3.9)$$

Donde el término  $\bar{\delta}_{\phi,v}$  se elige de acuerdo con la relación existente entre  $\bar{\delta}_\phi$  y  $\bar{\phi}$ , en el 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  $\bar{\phi}$  y para cada paso temporal  $\Delta t$ , por lo que se tiene un sistema de ecuaciones lineales (los coeficientes  $a$  pueden depender, directa o indirectamente de  $\tilde{\phi}$ , por lo que el sistema es realmente pseudo-lineal).

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

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

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

El proceso de solución de este sistema de ecuaciones es iterativo y durante éste, las ecuaciones del sistema, en general, no se cumplen; el imbalance 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:

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

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

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

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

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

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

En esta Tesis, se usa el código de fluido dinámica computacional PHOENICS para resolver las ecuaciones que describen aerodinámica del flujo: continuidad, cantidad de movimiento y conservación de la especie química.



---

## ***CAPÍTULO 4***

---

### ***MODELO ANALÍTICO DE DISPERSIÓN DE UNA DESCARGA***

#### **4.1 Introducción**

En este capítulo se presenta el modelo analítico que permite describir de manera sencilla la dispersión de un flujo que se emite a la atmósfera. Este modelo permite estimar la concentración del flujo descargado al ambiente mediante factores como por ejemplo, el diámetro y la altura de la fuente, la temperatura y la velocidad de salida a la cual se suscita la descarga de fluido, además de condiciones meteorológicas como la presión atmosférica, temperatura del ambiente, las categorías de estabilidad atmosférica y la velocidad del viento. Las categorías de estabilidad atmosférica juegan un papel muy importante para estimar la concentración de gas, puesto que dependiendo de qué categoría haya cuando la descarga tenga lugar, tendremos factores de corrección y coeficientes que determinan óptimamente la estimación de la concentración. Un ejemplo de coeficientes son los de dispersión, los cuales dependen de la distancia que recorre el gas al dispersarse. Más adelante se presentan las correspondientes tablas y ecuaciones en donde se ilustra la forma de utilizar los mencionados factores y coeficientes.

#### **4.2 Descripción de la dispersión turbulenta de una descarga de fluido a la atmósfera**

El fenómeno que se simula se denomina “penacho”, en inglés conocido como “plume”, el cual consiste en la dispersión de un gas como el amoníaco hacia la atmósfera proveniente de una fuente al escaparse de ella. Estos escapes son considerados continuos para simular la dispersión sin depender del tiempo.

Una de las características principales que condiciona la evolución de un gas/vapor en la atmósfera es su densidad, distinguiéndose tres posibilidades:

- Gases ligeros. Densidad inferior a la del aire.
- Gases pasivos o neutros. Densidad similar a la del aire.
- Gases pesados. Densidad mayor que la del aire.

A efectos prácticos no se puede hablar, en la mayoría de los casos, de un comportamiento puro de gas ligero, neutro o pesado, ya que los factores que influyen en él son múltiples y variables en el tiempo, y una mezcla gas/aire puede evolucionar como un gas pesado sin serlo debido a:

- Peso molecular del gas.
- Temperatura del gas.
- Temperatura y humedad del aire ambiente.
- Presencia de gotas líquidas arrastradas en la emisión.
- Reacciones químicas en la nube, etc.

Otra característica es la duración del escape, que puede dar lugar a:

- Escapes instantáneos formando una bocanada ("puf").
- Escapes continuos sin depender del tiempo, formando un penacho ("plume").
- Escapes continuos dependiendo del tiempo.

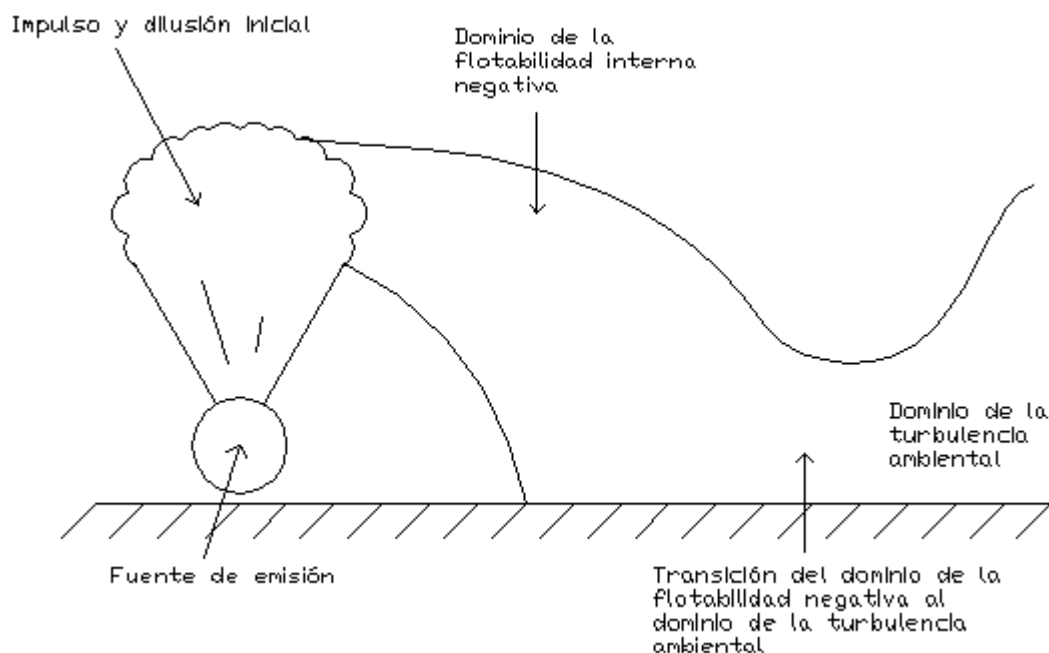
En la presente tesis, se estudia el segundo tipo de escape.

En la mayoría de las ocasiones en que se presentan escapes de fluido, empiezan con una descarga de un producto peligroso desde su depósito original. Los escapes pueden ser en forma de gas, de líquido o en fase mixta líquido-gas; en el presente trabajo de investigación se trata únicamente el primer tipo, si bien debe señalarse que en fase líquida y mixta la aportación másica del escape es muy superior y la velocidad de evaporación determina la cantidad aportada para la

formación de la nube. De ahí la peligrosidad de escapes de gases licuados del petróleo o de cloro licuado, por citar unos ejemplos típicos.

El modelo gaussiano de fuente puntual continua que se usa en esta tesis supone como hipótesis de partida que las concentraciones de contaminante en cualquier punto considerado corriente abajo están estabilizadas y no dependen del tiempo. Este modelo describe el comportamiento de los gases/vapores de fuerza ascensional neutra, dispersados en la dirección del viento y arrastrados a la misma velocidad.

Respecto a los gases pesados, en la figura 4.1 se muestra una configuración típica de un escape a nivel del suelo.



*Fig. 4.1: Desarrollo y dispersión de una nube de gas pesado.*

Los gases pesados muestran una elevación inicial del penacho debido al impulso de salida, como sucede en todo escape, seguida de una cierta caída en curva por influencia de su densidad. Comparándolos con los gases neutros se ve que los gases

pesados presentan en los momentos iniciales un comportamiento distinto, por lo cual se han desarrollado modelos sofisticados que no se consideran en esta tesis. Sin embargo, al cabo de un cierto tiempo y a medida que se diluyen en el aire, las características y el comportamiento se pueden asimilar a los de un gas neutro. Si el escape de un gas pesado es de una proporción o intensidad de descarga moderadas, se puede tratar aceptablemente con el modelo gaussiano de gas neutro que es de aplicación mucho más sencilla, especialmente si lo que queremos es estudiar lo que sucede en puntos que no sean excesivamente próximos al punto de emisión.

### 4.3 Descripción del modelo

A continuación se presenta la ecuación (4.1), que es referida con el nombre de modelo analítico y cuyos resultados son comparados con las predicciones del modelo presentado en el capítulo 2. Este modelo de Pasquill-Gifford representa una dispersión gaussiana de un gas neutro (densidad similar a la del aire) en los ejes horizontal y vertical favorable especialmente para medir la concentración de dicho gas en puntos alejados de la fuente o recipiente normal del gas (figuras 4.2 y 4.3). El modelo matemático normalizado para la dispersión de una fuente puntual elevada es [3]:

$$C = \frac{G}{2 \cdot \pi \cdot \sigma_y \cdot \sigma_z \cdot u} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] \cdot \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-H}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z+H}{\sigma_z}\right)^2\right] \right\} \quad (4.1)$$

donde  $C$  es la concentración en el punto  $x, y, z$  con unidades de masa sobre distancia elevadas al cubo [ $\text{Kg}/\text{m}^3$ ],  $G$  representa la intensidad de la emisión en [ $\text{Kg}/\text{s}$ ],  $z$  es referida como la altura de la fuente emisora medida en metros,  $H$  es la altura de la fuente emisora sobre el nivel del suelo más la elevación del penacho en [ $\text{m}$ ],  $\sigma_y$ , y  $\sigma_z$  son coeficientes de dispersión medidos en metros y  $u$  representa a la velocidad del viento medida en [ $\text{m}/\text{s}$ ]. La estimación de la elevación del penacho se explica más adelante.

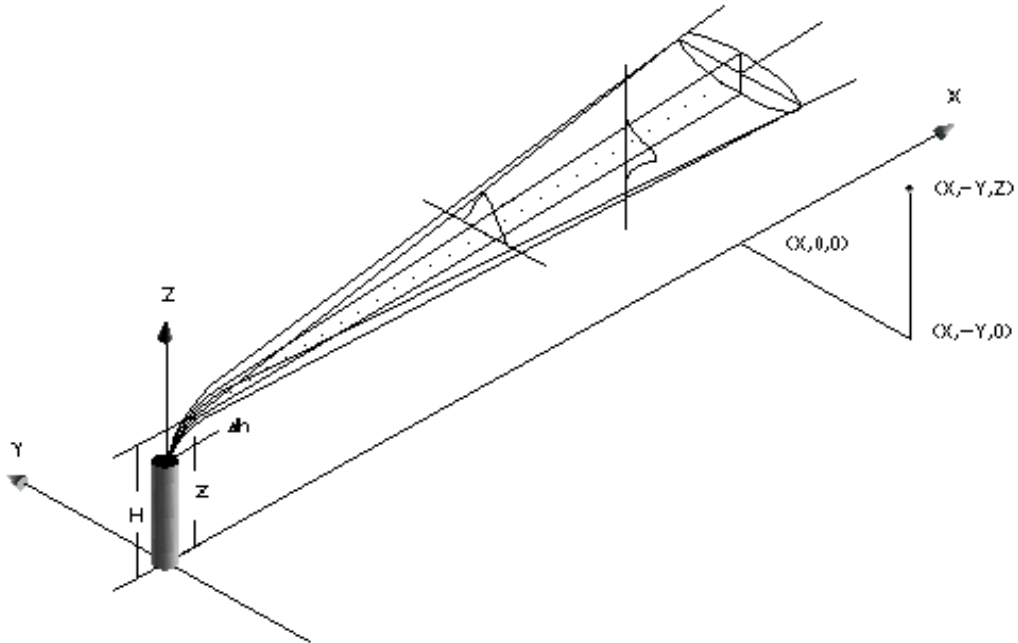


Fig. 4.2: Sistema de coordenadas y geometría básica de la ecuación gaussiana del penacho.

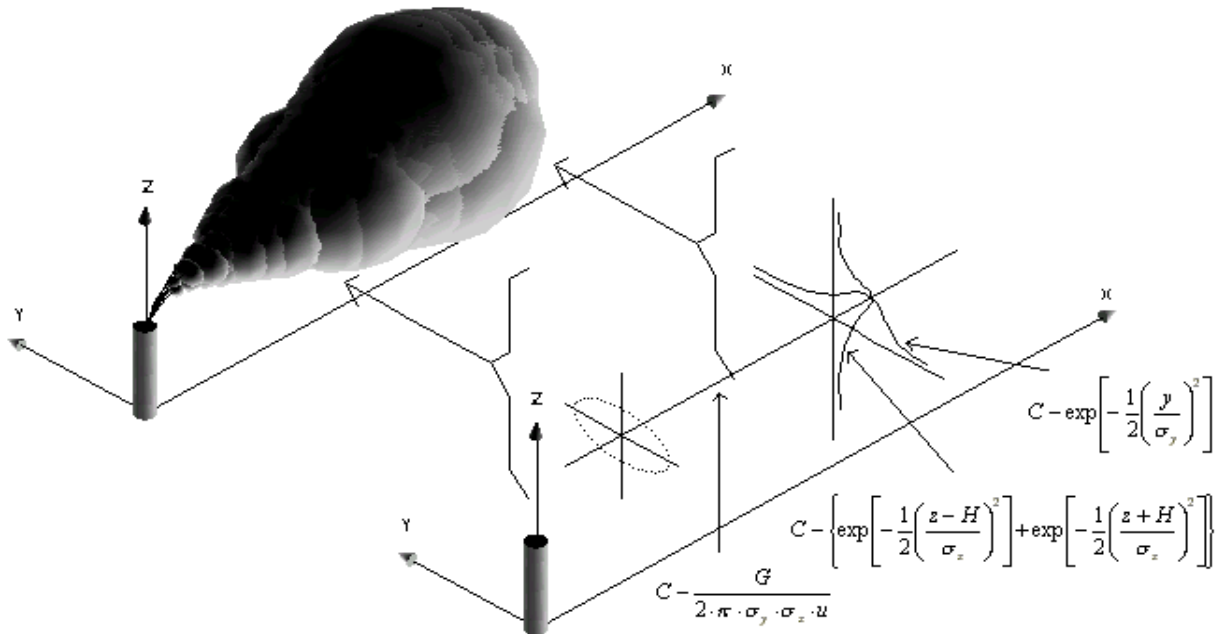


Fig. 4.3: Los tres términos de la ecuación gaussiana del penacho: concentración en el eje central y términos vertical y lateral.

La utilización de este modelo está limitada a distancias entre 100[m] y 10[Km] y es aplicable para cortos periodos de tiempo, hasta unos diez minutos, que es el tiempo promediado o tiempo de muestreo normalizado. Para periodos de tiempo superiores a diez minutos, la concentración corriente abajo de la fuente de emisión es en cierta manera inferior, debido a la alteración de la dirección del viento.

#### 4.4 Estimación de la elevación del penacho

La elevación del penacho  $\Delta h$  se define como la diferencia entre la altura de la línea central final del penacho y la altura de la fuente emisora. Esta elevación está originada por la fuerza ascensional y el impulso vertical del efluente, como se muestra en la figura 4.4.

La temperatura de salida del efluente en el caso de que supere en más de 50 [°C] la temperatura ambiental, tiene mayor influencia que el impulso vertical en la determinación de la altura que alcanzará el penacho.

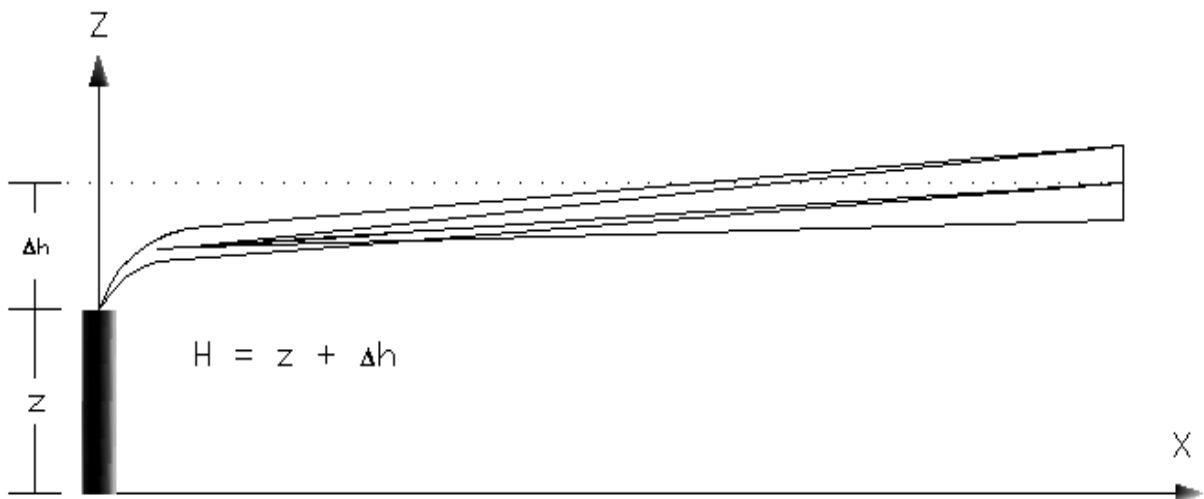


Fig. 4.4: Elevación del penacho  $\Delta h$  y altura de la fuente emisora  $z$ .

Como regla general, la elevación del penacho es directamente proporcional al contenido calorífico del efluente y a la velocidad de salida del mismo, e inversamente proporcional a la velocidad local del viento.

Un modelo matemático empleado para el cálculo de esta elevación es el de Holland [3]:

$$\Delta h = \frac{V_s \cdot d}{u} \left( 1.5 + 2.68 \cdot 10^{-3} \cdot P \cdot \frac{T_s - T_a}{T_s} \cdot d \right) \quad (4.2)$$

donde  $\Delta h$  es la elevación del penacho por encima de la fuente emisora medida en metros [m],  $V_s$  es la velocidad de salida del contaminante medida en metros sobre segundo [m/s],  $d$  es el diámetro interior del conducto de emisión medida en [m],  $u$  se refiere a la velocidad del viento con unidades de [m/s],  $P$  es la presión atmosférica medida en [mbar],  $T_s$  y  $T_a$  son la temperatura del contaminante y la temperatura ambiente atmosférica respectivamente medidas en Kelvin [K] y la cantidad  $2.68 \cdot 10^{-3}$  es una constante expresada en [mbar<sup>-1</sup> m<sup>-1</sup>].

Los valores de  $\Delta h$  obtenidos con esta fórmula deben corregirse (tabla 4.1 [3]) multiplicando por un factor, establecido por Pasquill-Gifford-Turner, que es función de las condiciones meteorológicas, que se describen más adelante.

Tabla 4.1 Factores de corrección Pasquill-Gifford-Turner	
Categorías de estabilidad (Clases)	Factor de corrección aplicado al $\Delta h$ , calculado por el modelo de Holland
A, B	1.15
C	1.10
D	1.00
E, F	0.85

#### 4.4.1 Factores que influyen en la dispersión del penacho

Las condiciones meteorológicas y la duración del escape tienen una gran importancia en el alcance de la dispersión del penacho. Los factores principales son la velocidad del viento y la estabilidad atmosférica.

La estabilidad atmosférica viene definida en función del gradiente vertical de temperatura de las capas del aire.

Los datos de velocidad del viento y estabilidad atmosférica, siempre que sea posible, deben obtenerse de estaciones meteorológicas locales. Dado que no siempre es posible disponer de esta información, la categoría de estabilidad atmosférica estimada según las condiciones de insolación y velocidad del viento puede obtenerse a través de una tabla establecida por Pasquill (Tabla 4.2 [3]).

Velocidad del viento [m/s] a 10 [m] de altura	Insolación diurna			Condiciones nocturnas	
	Fuerte	Moderada	Ligera	Fínamente cubierto ó más de la mitad cubierto	Nubosidad $\leq$ 3/8
< 2	A	A – B	B		
2 – 3	A – B	B	C	E	F
3 – 4	B	B – C	C	D	E
4 – 6	C	C – D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D



La velocidad del viento se acostumbra a medir a 10 metros de altura. Esta velocidad, a niveles más bajos de 10 metros, se ve reducida notablemente debido a los efectos de rozamiento. Para niveles distintos de este valor, la velocidad del viento debe corregirse según la relación 4.3 [3]:

$$u_z = u_{10} \left( \frac{z}{10} \right)^p \quad (4.3)$$

donde  $u_z$  es la velocidad del viento a la altura de la fuente emisora con unidades de distancia sobre tiempo [m/s],  $u_{10}$  es la velocidad del viento a la altura de 10 metros con unidades idénticas a la descrita anteriormente,  $z$  se refiere a la altura de la fuente emisora con unidades de metros [m] y por último  $p$ , que es un coeficiente exponencial, cuyos valores son una función de la estabilidad atmosférica y la rugosidad del suelo.

En la tabla 4.3 [3] se presentan tales valores.

Tabla 4.3: Coeficientes de corrección de la velocidad del viento		
Estabilidad	Coeficiente exponencial atmosférico ( $p$ )	
	Urbano	Rural
A	0.15	0.07
B	0.15	0.07
C	0.20	0.10
D	0.25	0.15
E	0.40	0.35
F	0.60	0.55

## 4.5 Coeficiente de dispersión

En la ecuación (4.1) del apartado 4.3, los parámetros  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  son las desviaciones en las direcciones lateral y vertical respectivamente, que representan una medida de la dispersión del penacho en dichas direcciones. Tales parámetros son función de la distancia a la fuente emisora viento abajo y de la clase (categoría) de estabilidad atmosférica definida en el punto 4.4 del presente capítulo.

Estos coeficientes se suelen presentar en forma gráfica o pueden calcularse según modelos matemáticos empíricos como los siguientes [3]:

$$\sigma_y = 0.128 \cdot x^{0.90} \quad (4.4)$$

$$\sigma_z = 0.093 \cdot x^{0.85} \quad (4.5)$$

donde  $x$  es la distancia en metros que recorre la dispersión.

Diferentes autores llegan a expresiones que difieren ligeramente. En las figuras 4.5 y 4.6 [3] se muestran los gráficos utilizados para obtener las  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$ , obtenidos a partir de los modelos matemáticos de Turner. Estos gráficos indican que para una determinada distancia corriente abajo de la fuente de emisión, la amplitud del penacho es máxima cuando la inestabilidad atmosférica es también máxima y es mínima cuando la atmósfera es muy estable.

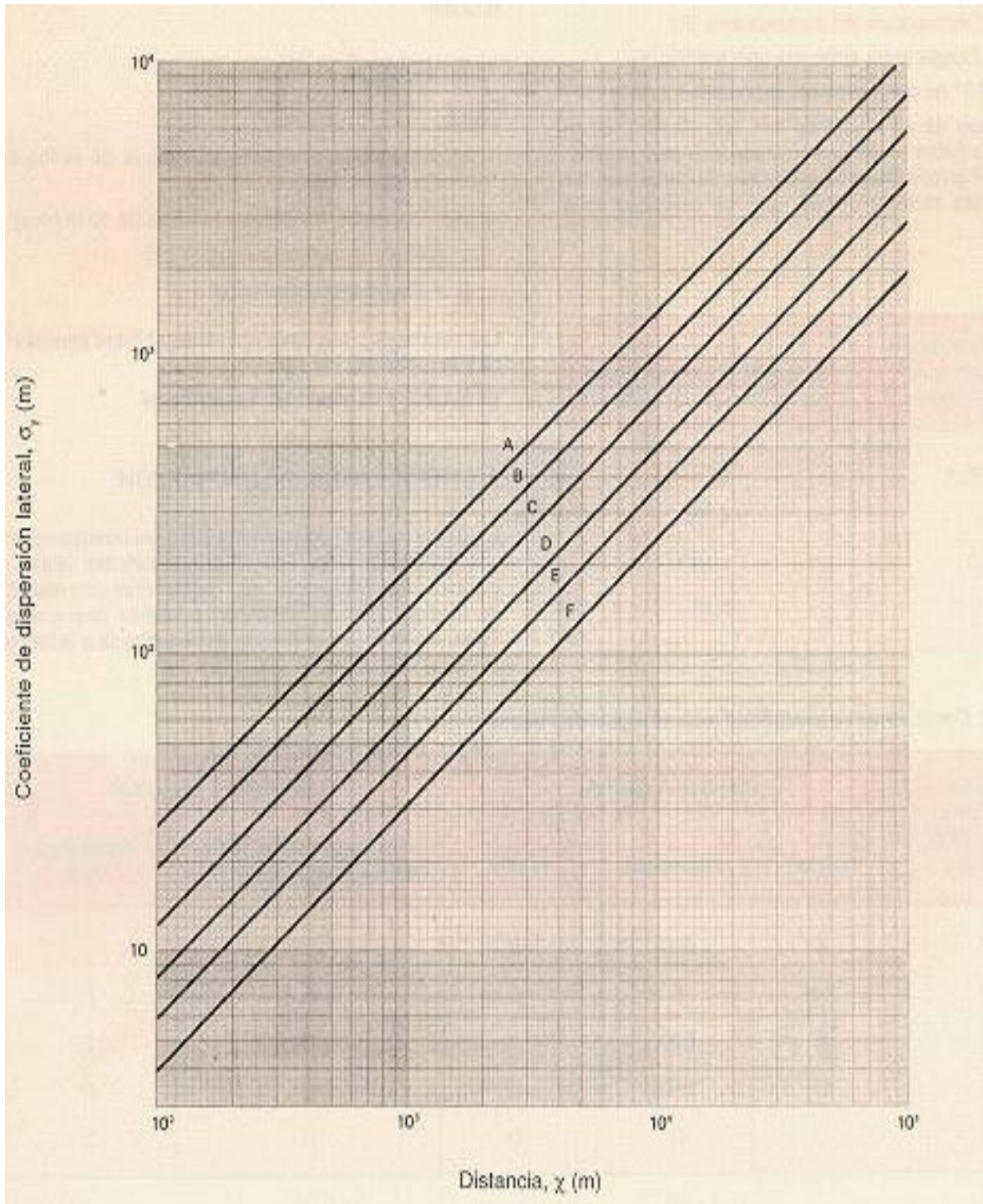


Fig. 4.5: Coeficiente de dispersión lateral  $\sigma_y$  según distancia y categoría de estabilidad atmosférica.

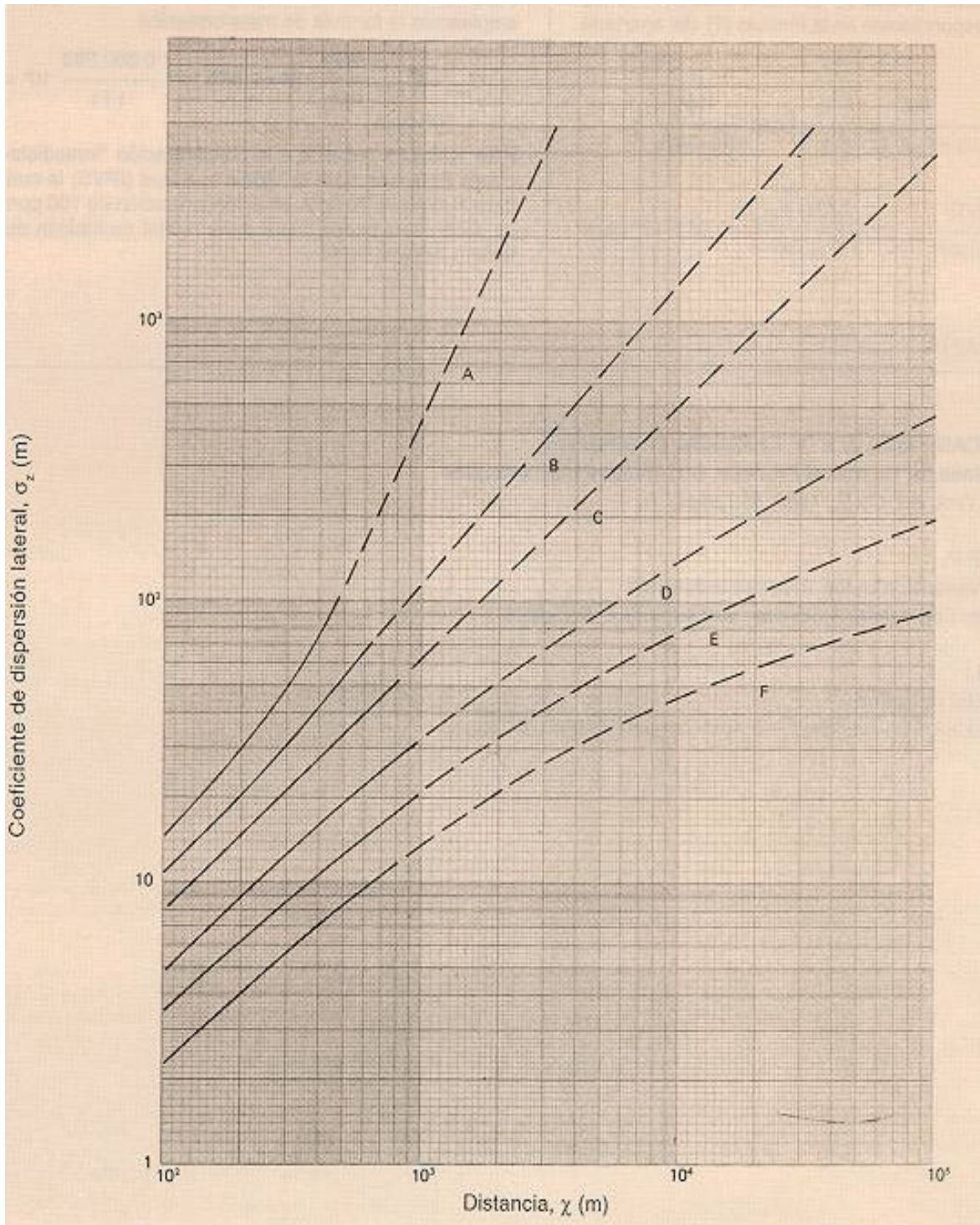


Fig. 4.6: Coeficiente de dispersión vertical  $\sigma_z$  según distancia y categoría de estabilidad atmosférica.

Los valores obtenidos por estos gráficos o por los modelos matemáticos que han dado lugar a ellos, solamente son aplicables en campo abierto y debe tenerse en

cuenta que en condiciones inestables (A) y estables (F) se pueden cometer errores de varias veces en la estimación de  $\sigma_z$ .

Para condiciones de estabilidad intermedias entre las anteriores, la estimación de  $\sigma_z$  se puede esperar que como máximo, se desvíe al doble del valor estimado por los gráficos.

---

## ***CAPÍTULO 5***

---

### *DISPERSIÓN DE UNA DESCARGA DE FLUIDO EN LA ATMÓSFERA*

#### **5.1 Introducción**

En este capítulo se presentan los resultados de la simulación de una descarga de fluido en una atmósfera neutra.

La configuración a simular es una configuración propuesta y de ningún modo representa alguna descarga real o de laboratorio, de la cual se tengan datos experimentales. Estos resultados son predichos por el modelo presentado en el capítulo 2 y cuyas ecuaciones son resueltas por el método presentado en el capítulo 3.

Inicialmente se presenta un análisis cualitativo de los resultados del modelo numérico. A continuación se describen las comparaciones del comportamiento del fenómeno entre los dos modelos considerados: el numérico y el analítico de Pasquill-Gifford.

#### **5.2 Configuración a simular**

El sistema a simular, como se muestra en la figura 5.1, consta de un cilindro vertical (fuente de la cual será emanado el gas) con 0.26 metros de diámetro y 5 metros de altura, distancia a la cual la descarga tiene lugar hacia la atmósfera. El ambiente se encuentra con condiciones meteorológicas templadas correspondientes a una estabilidad D con rugosidad del suelo urbana y con una velocidad del viento de 3[m/s]. El aire y el fluido están a una temperatura de

20[°C] y la presión atmosférica es de 77.144[kPa]. El fluido emanado es un gas neutro que tiene una densidad similar a la del aire atmosférico. El gas tiene un gasto de 0.5[Kg/s] y sale de la fuente emanadora a una velocidad de 10[m/s]. Todas estas condiciones propician que se presenten diferentes valores de concentración como varíe la distancia que recorra la dispersión. La distancia que se estudia en esta tesis está limitada entre 100 y 10,000 metros; siendo más específicos, el análisis se hace para una distancia mínima de 100 metros y una máxima de 150 metros a partir de la fuente de descarga de fluido.

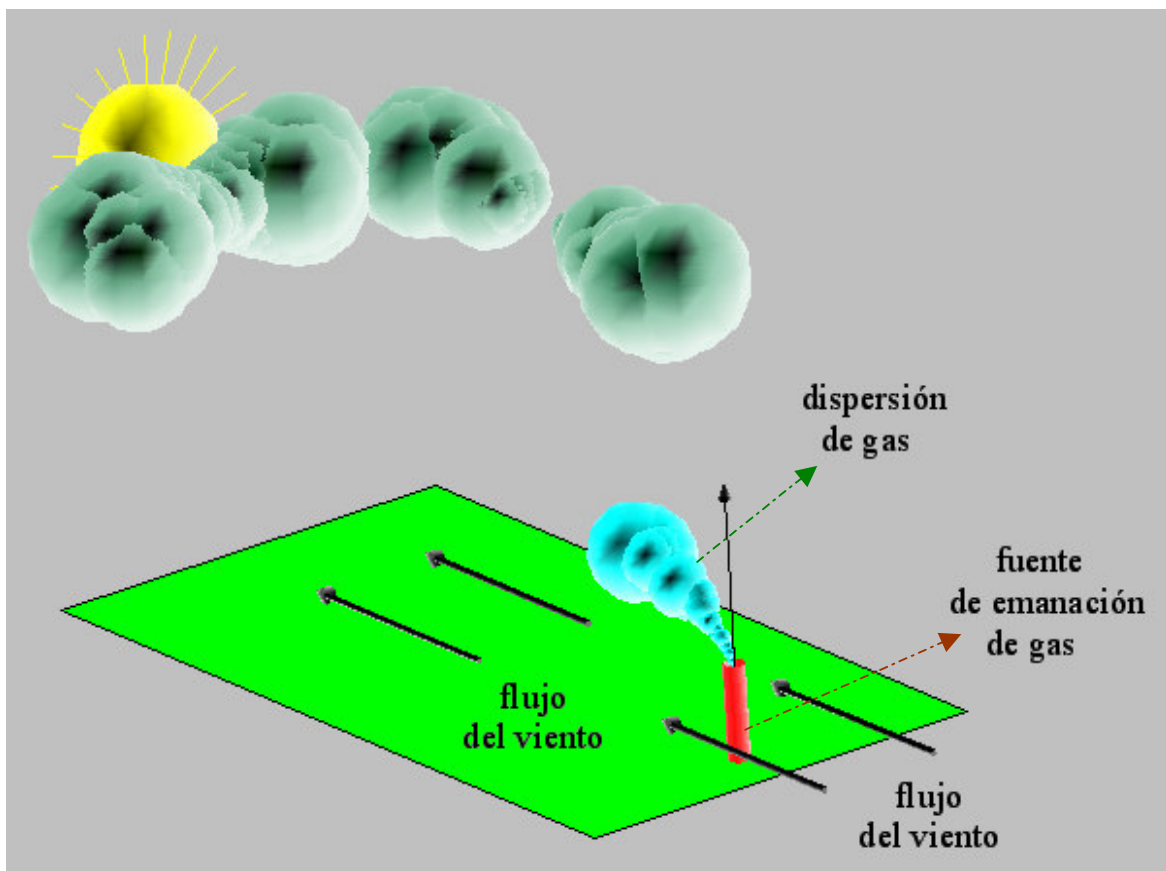


Figura 5.1: Descarga y dispersión de gas a la atmósfera.

### 5.3 Detalles numéricos

Como se señaló anteriormente, la simulación de la dispersión de la descarga de gas se realizó en el código numérico PHOENICS, en el cual fue necesario establecer un mallado adecuado para tener una mejor descripción del fenómeno.

La malla es de aproximadamente 354,000 celdas distribuidas en el espacio formando un prisma rectangular estructurado a lo largo de los ejes “x”, “y” y “z” como se aprecia en la figura 5.2(A). En la misma figura, pero en la parte B se muestra una representación de cómo está dispuesta la fuente por donde se descarga el gas. La forma de la fuente se colocó mediante un bloqueo de celdas.

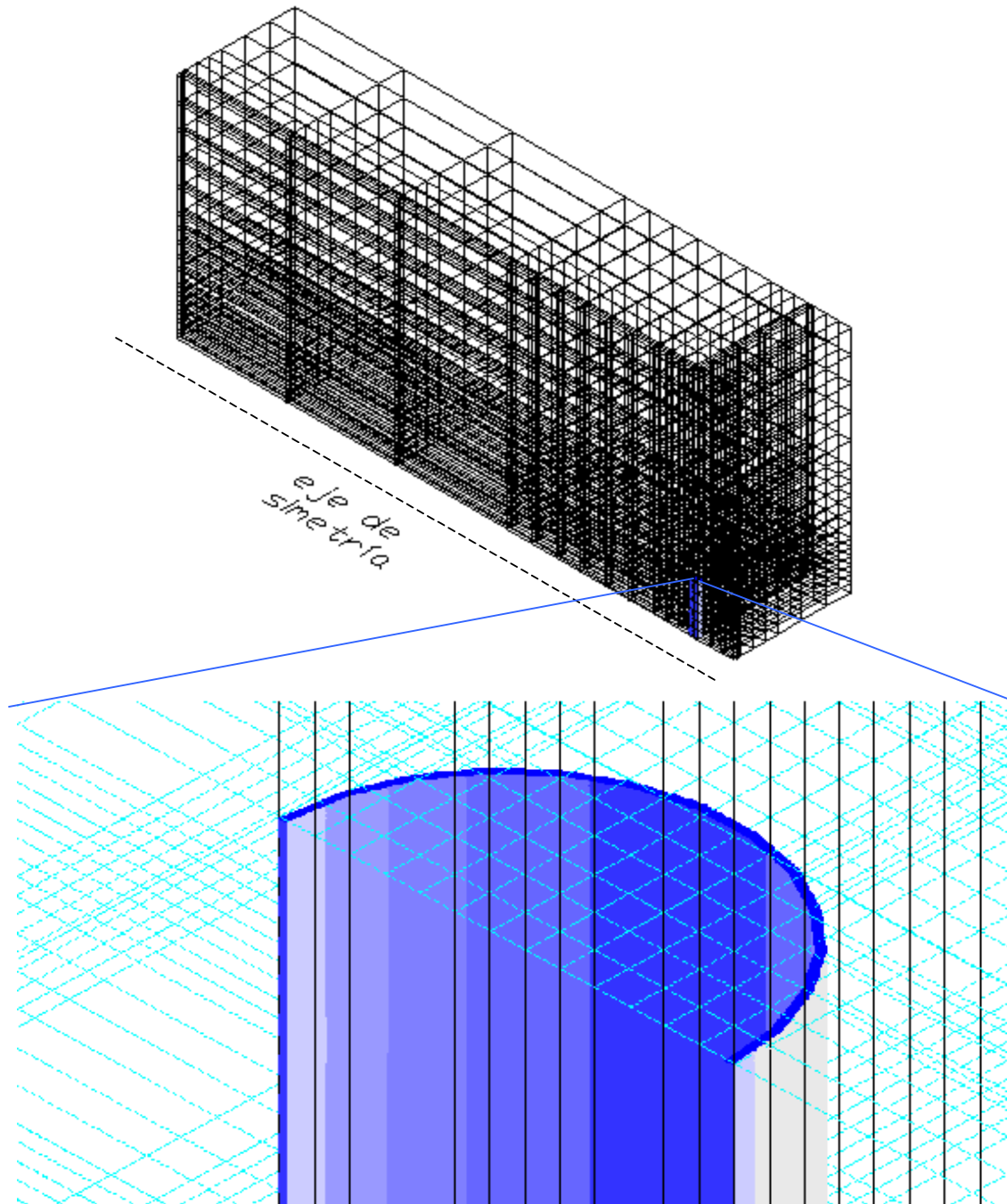
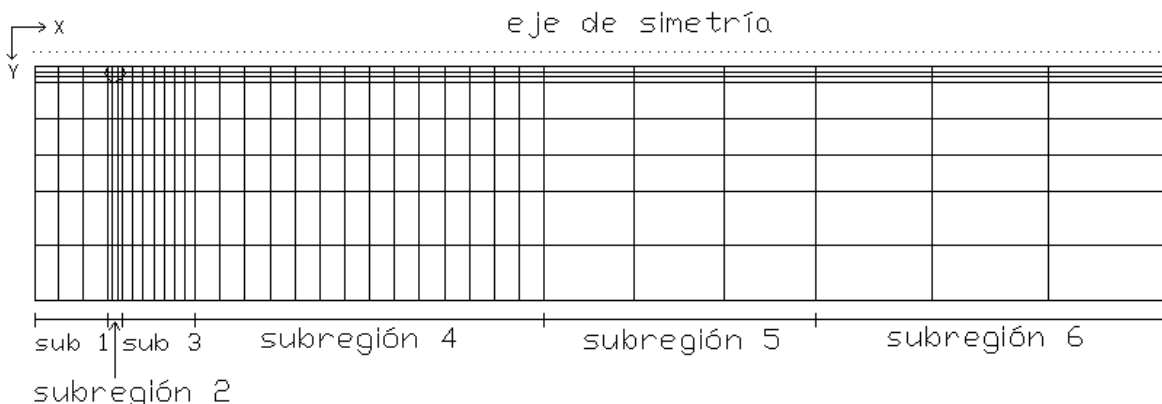


Figura 5.2: 5.2A (arriba): representación del mallado, 5.2B (abajo): posición de la fuente emanadora en el mallado.



En estas figuras, que ilustran la ubicación del mallado del sistema, se aprecia un eje de simetría, lo cual significa que en la simulación solo se considera la mitad del sistema real; esto quiere decir que se divide la fuente de emanación en dos partes en su sección transversal y solo se simuló en una de ellas por efectos de simplificación, puesto que se supone que en la otra parte de la fuente el comportamiento de los factores físicos es idéntico.

Como lo indica la figura 5.3, en el plano  $x - y$ , específicamente en la dirección  $x$ , existen 6 subregiones que se pueden leer del lado izquierdo al derecho de la ilustración en dirección  $x$ . La primera consiste en 10 celdas de 0.5[m], en la segunda, que es donde se encuentra la fuente, se tienen 13 celdas distribuidas en 26 [cm] de longitud, en seguida se tiene la subregión 3 que mide 5 metros y consta de 40 celdas. En la cuarta se tienen 75 celdas de 0.66 metros cada una, en la quinta y sexta se tienen 10 y 10 celdas de 4.5[m] y 5[m] respectivamente. De esta forma, en toda la región en dirección  $x$  se tiene una distancia de simulación de 155.26 metros y 168 celdas. Este arreglo se debe principalmente a que el modelo analítico de Pasquill-Gifford calcula la concentración de gas lejos de la fuente emanadora, más de 100 metros de distancia.



*Figura 5.3: Plano  $x - y$  de la malla, descripción de subregiones en dirección  $x$ .*

En la figura 5.4 se presenta esquemáticamente el plano  $z - y$  del sistema, en donde existen 3 subregiones en la dirección  $y$ . En la primera se tiene definido el

radio de la fuente que cuenta con 13 celdas de 2[cm] cada una. En seguida tenemos las subregiones 2 y 3, las cuales tienen 10 y 5 celdas de 0.155[m] y 0.31[m] respectivamente. Con la información anterior sumamos 28 celdas y 3.36[m] en total por toda la región en dirección  $y$ .

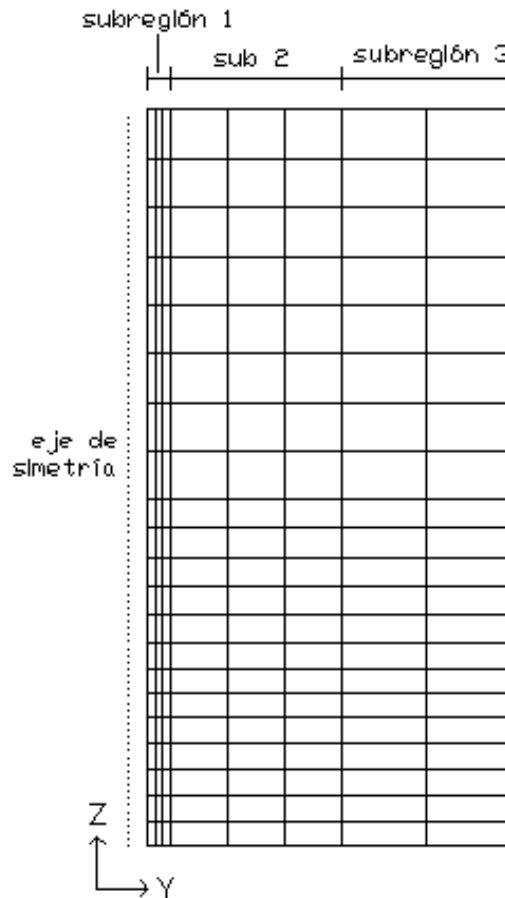


Figura 5.4: Plano  $y$ - $z$  de la malla, descripción de subregiones en dirección  $y$ .

Por último, se tiene la figura 5.5 en donde se muestra el plano  $x$ - $z$  del sistema. En dicho plano tenemos 3 subregiones en la dirección  $z$ . La primera está compuesta de 30 celdas de 0.166[m] cada una y es en donde se delimita la altura de nuestra fuente, en la segunda existen 20 celdas de 0.125[m] cada una, y por último en la tercera hay 30 de 0.25[m] por celda, para simular un total de 80 celdas y 15[m] de distancia en la dirección  $z$ .

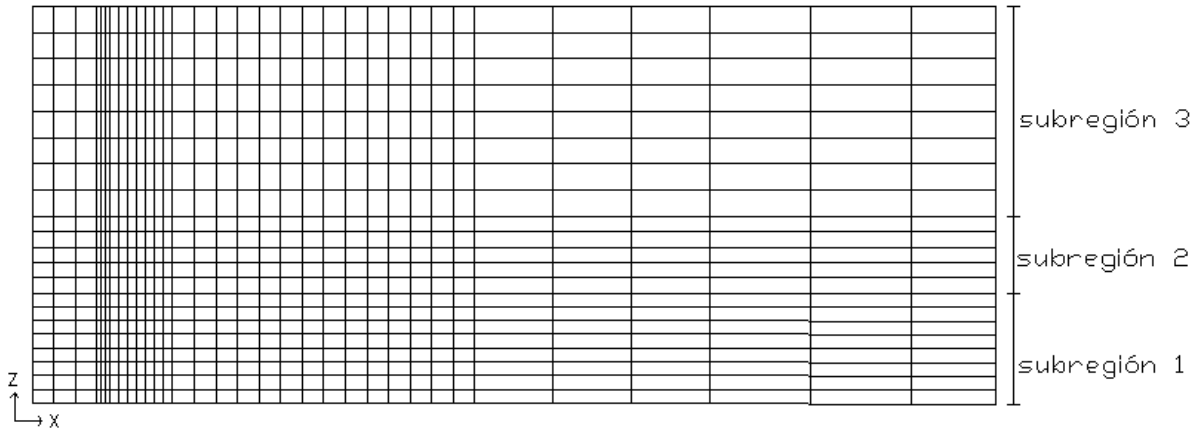


Figura 5.5: Plano  $x - z$  de la malla, descripción de subregiones en dirección  $z$ .

### 5.3.1 Condiciones de frontera

Adicionalmente se requiere establecer las condiciones de frontera del dominio descrito en el apartado anterior. En dichas condiciones de frontera se tomaron en cuenta variables claves para el desempeño de recreación del fenómeno, dichas variables son por ejemplo presión, velocidad, energía cinética turbulenta con su respectiva tasa de disipación y la concentración de la especie conservada.

En la figura 5.6 se muestra una ilustración de las condiciones de frontera dispuestas en el dominio o mallado. Se presenta en la parte lateral de la figura la entrada de aire a  $3[m/s]$  y la salida del gas a  $10[m/s]$ .

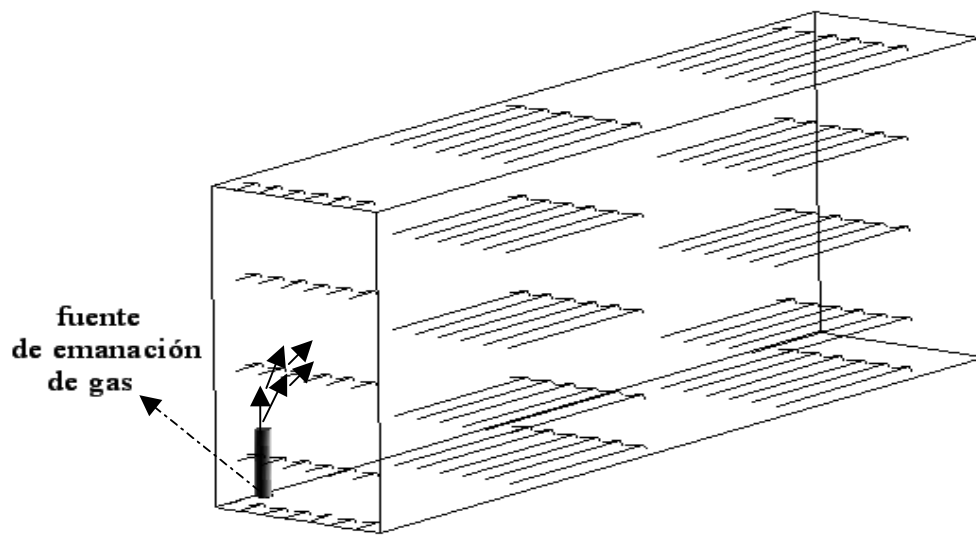
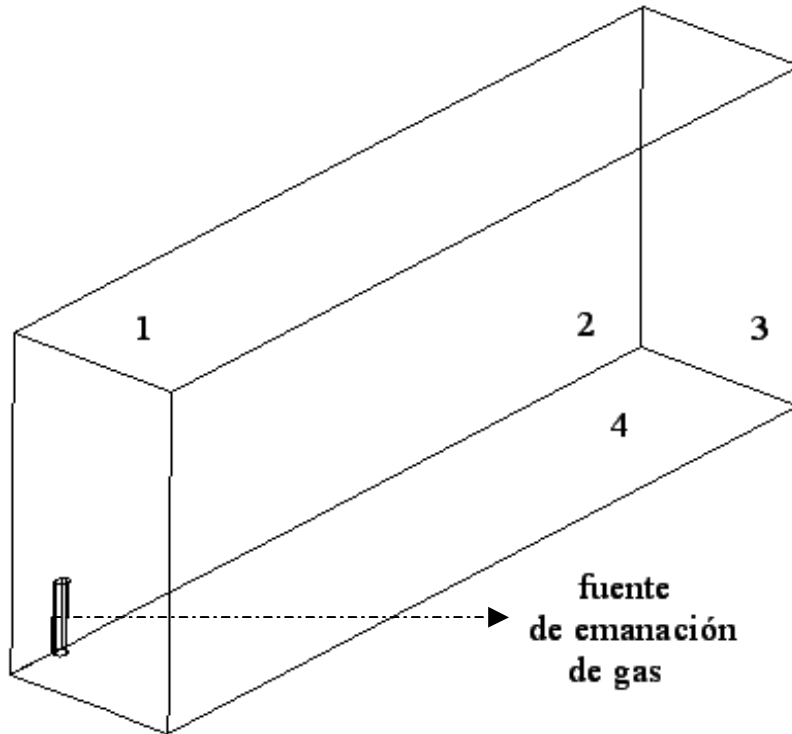


Figura 5.6: Representación de la entrada y dirección del viento en el sistema.

Las condiciones de frontera se muestran en la figura 5.7 en donde se aprecian las fronteras 1, 2, y 3, las cuales son las salidas del sistema, mientras que 4 es el piso desde donde emerge el gas por medio del tubo (también apreciado en la figura) que está a 5[m] sobre el nivel del piso.



*Figura 5.7: Representación de las condiciones de frontera del sistema.*

Las condiciones meteorológicas ayudan para que la simulación sea muy cercana a lo que realmente pasa en la naturaleza. La temperatura ambiente es 293[K] ó 20[°C], la temperatura de la sustancia emanada se considera con un valor de 293[K] ó 20[°C].

El gas descargado tiene un gasto de 0.5[Kg/s] y una densidad muy similar a la del aire.

#### **5.4 Resultados del modelo numérico**

A continuación se presentan y discuten los resultados cualitativos de la simulación de la dispersión turbulenta de una descarga en una atmósfera neutra. Cada una

de las figuras 5.8, 5.10, 5.12, 5.14, y 5.16 tienen una barra de colores, la cual hace referencia e indica los valores de campos de velocidad, presión y concentración del gas.

En la figura 5.8 se aprecia una vista superior o aérea de la fuente de emisión del fluido. Se puede observar la forma en que el viento viene desde la dirección este de nuestro sistema y al encontrarse con el tubo choca con él, debido a que éste representa un obstáculo para el flujo normal del viento. El flujo de viento tiende a seguir su trayectoria a causa de su cantidad de movimiento. Este flujo es instantáneo y detrás del tubo forma vórtices toroidales seguidos por otros vórtices alineados con un eje que fluctúan en tiempo y espacio. Éstos, producen una zona de depresión próxima al eje que induce en medida una zona de recirculación en el punto contrario en el cual el viento choca con el tubo, este fenómeno formado se muestra en la figura 5.8 en términos de valores medios.

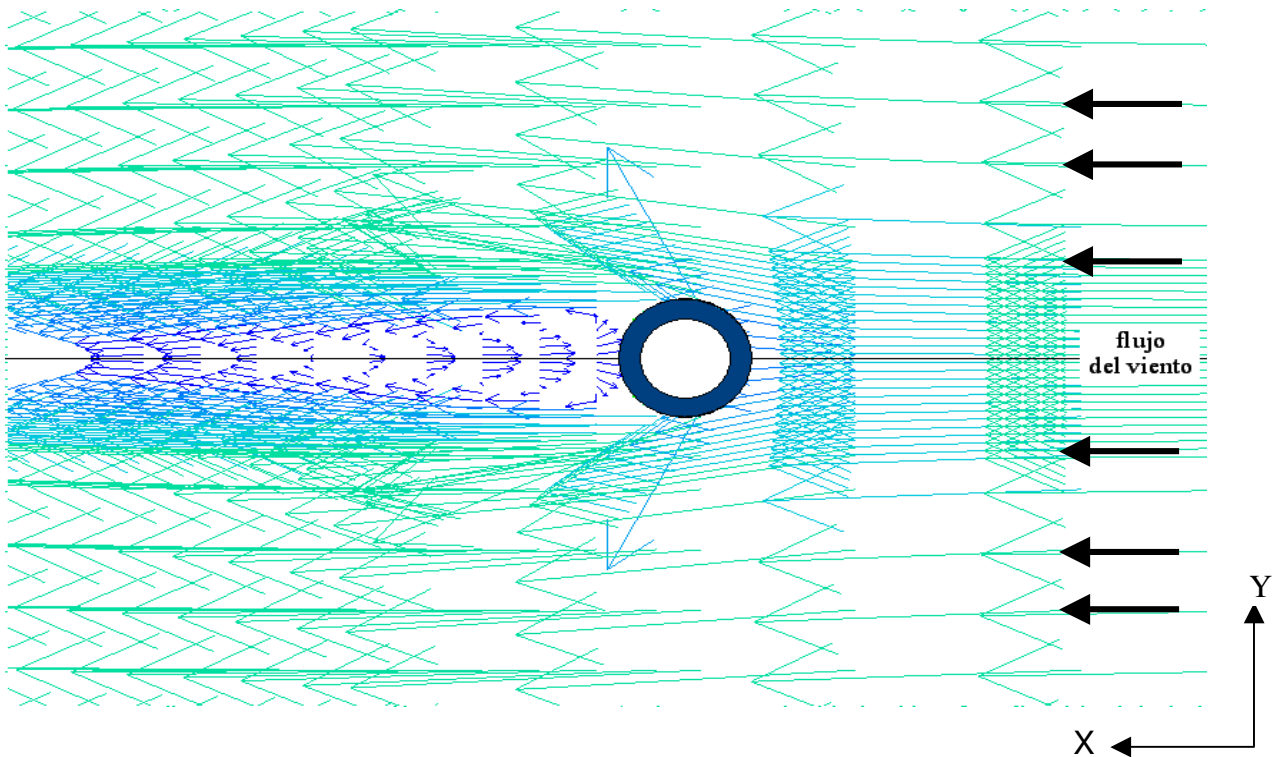


Figura 5.8: Vista superior de la zona de recirculación, en color azul marino se muestra el aro que representa la fuente emanadora de gas.



Figura 5.9: Valores del campo de velocidades, vista superior (Referente a la figura 5.8).

A continuación, en la figura 5.10 se muestra una vista lateral del flujo de aire con diferentes perspectivas.

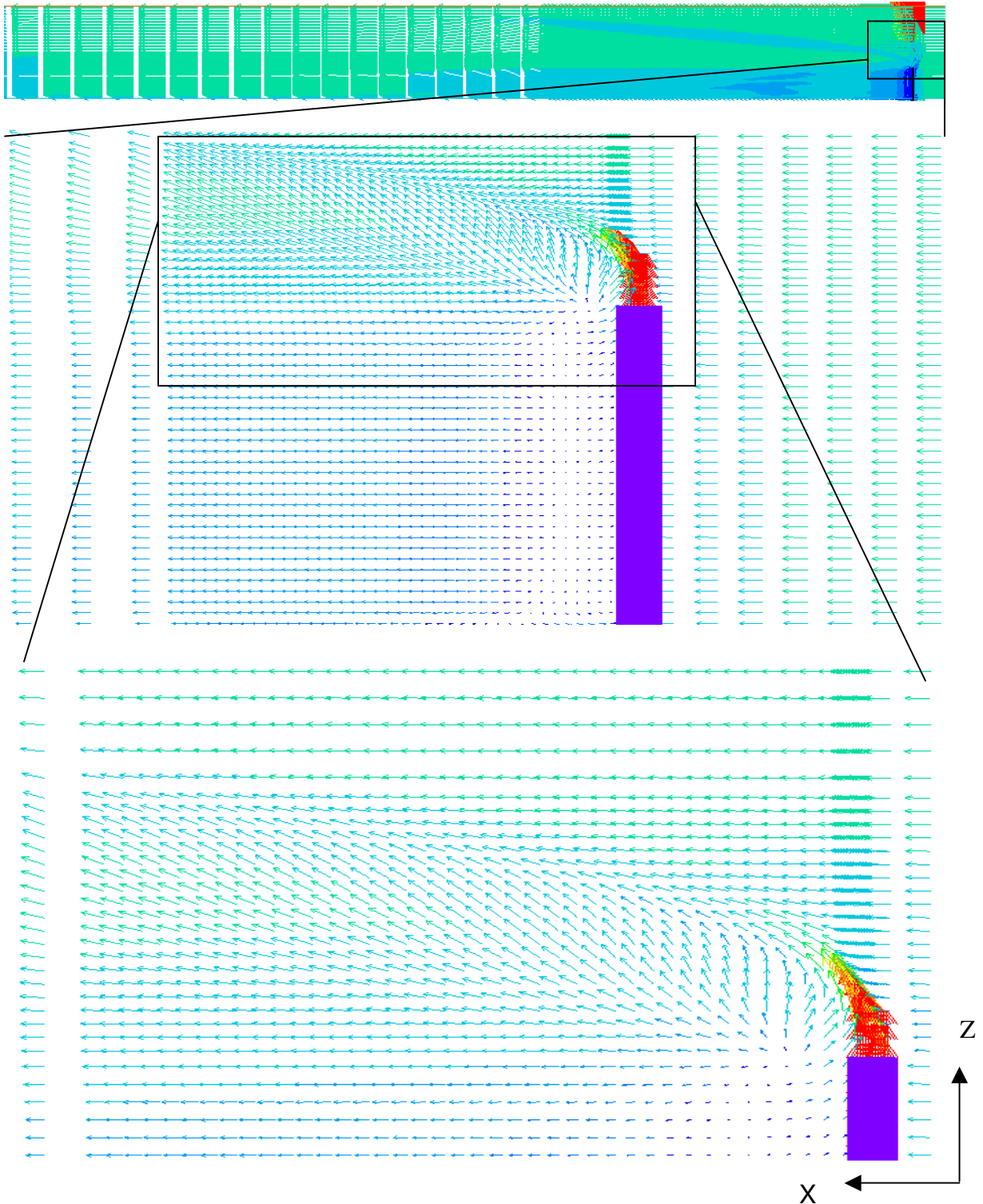


Figura 5.10: 5.10A (arriba): vista lateral del campo de velocidades en todo el sistema, 5.10B (en medio): acercamiento hacia la zona de recirculación, 5.10C (abajo): vista lateral de la mezcla del gas que sale de la fuente emanadora y el viento.



*Figura 5.11: Valores del campo de velocidades medido en [m/s], vista lateral (Referente a la figura 5.10).*

La zona de recirculación o vórtice formado, después del tubo de descarga, se aprecia desde un ángulo diferente, en este caso es una vista lateral de sistema con diferentes acercamientos, que es ilustrado en la figura 5.10. Esta zona de recirculación puede afectar, en determinados casos, la dispersión del gas en la atmósfera. En la parte A de dicha figura, se ve el campo de velocidad del viento y del gas en todo el dominio del sistema. En la parte B y C de la misma figura se puede ver con más detalle la zona de recirculación creada por el flujo de aire cerca de la fuente de emanación de gas. Se aprecia también el flujo de aire antes y después de que se encuentre con la dispersión del gas, parte de ese aire es arrastrado por el chorro. El rectángulo que se nota en color azul en la figura 5.10, hace referencia a la fuente de emanación.

En la figura 5.12 se presenta una vista superior próxima a la fuente de emanación, en la cual se aprecia la forma en que el campo de presiones se comporta en los alrededores de la fuente de la descarga del gas.

Detrás del tubo de descarga se tiene una zona de baja presión, formada por los motivos expuestos anteriormente.

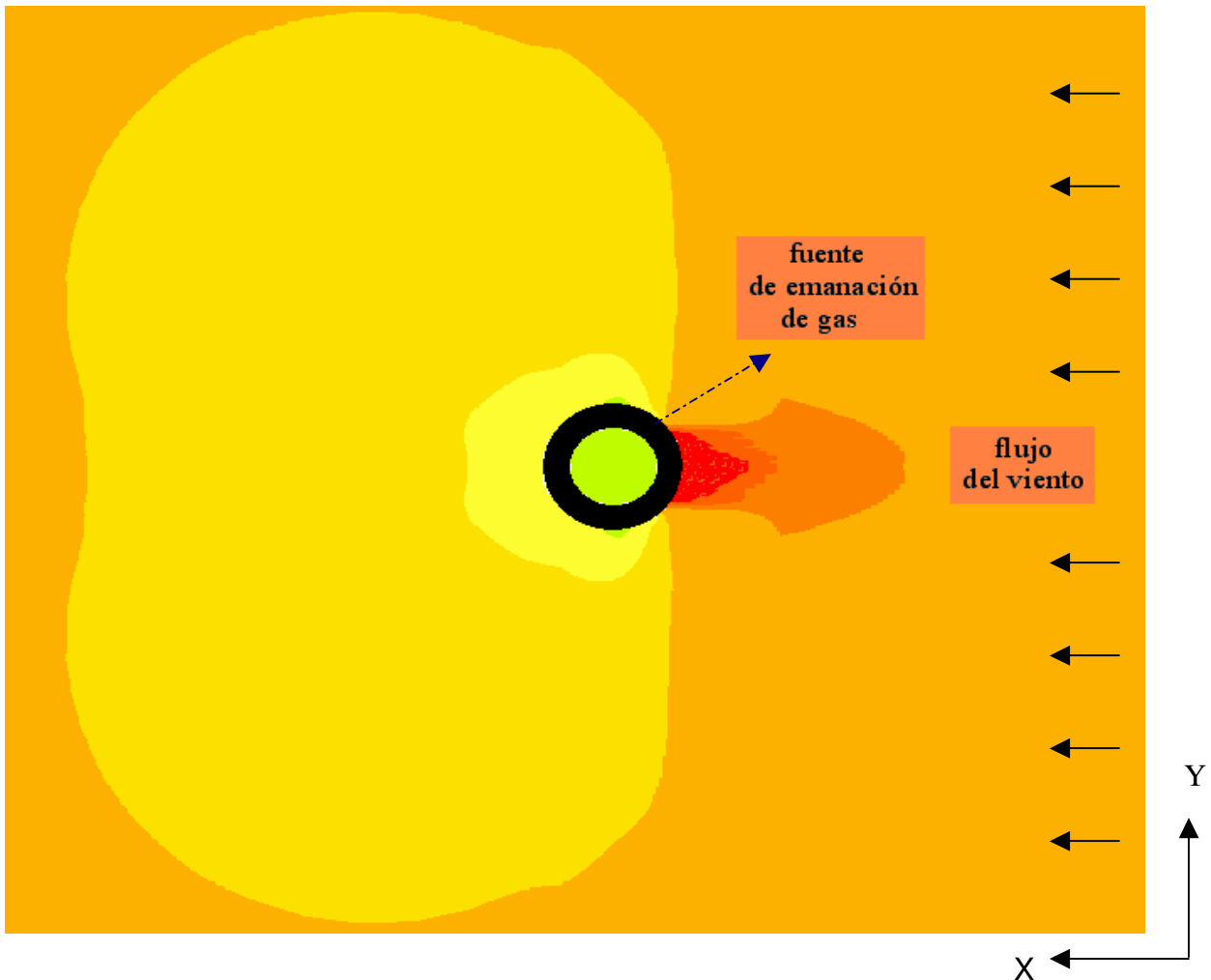


Figura 5.12: Vista superior del campo de presión  $P_1$ , en color negro se muestra la fuente emanadora.

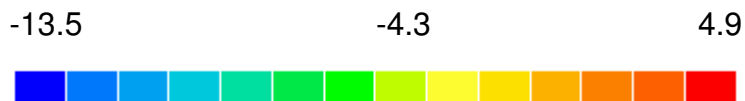


Figura 5.13: Valores del campo de presión  $P_1$  medido en [Pa], vista superior (Referente a la figura 5.12).

El campo de presión  $P_1$  se muestra en una vista lateral desde diferentes perspectivas de acercamiento del dominio (figura 5.14), esto para poder ubicar en la ilustración de manera simple las zonas de alta y baja presión que se caracterizan al formarse el penacho. La figura 5.14A ilustra el campo de presiones en todo el dominio del sistema. En la misma figura, pero en la parte B se muestra con más detalle el campo creado por el flujo de aire cerca de la fuente de



emanación de gas. La parte rectangular de color morado de la figura 5.14 corresponde a la fuente emanadora.

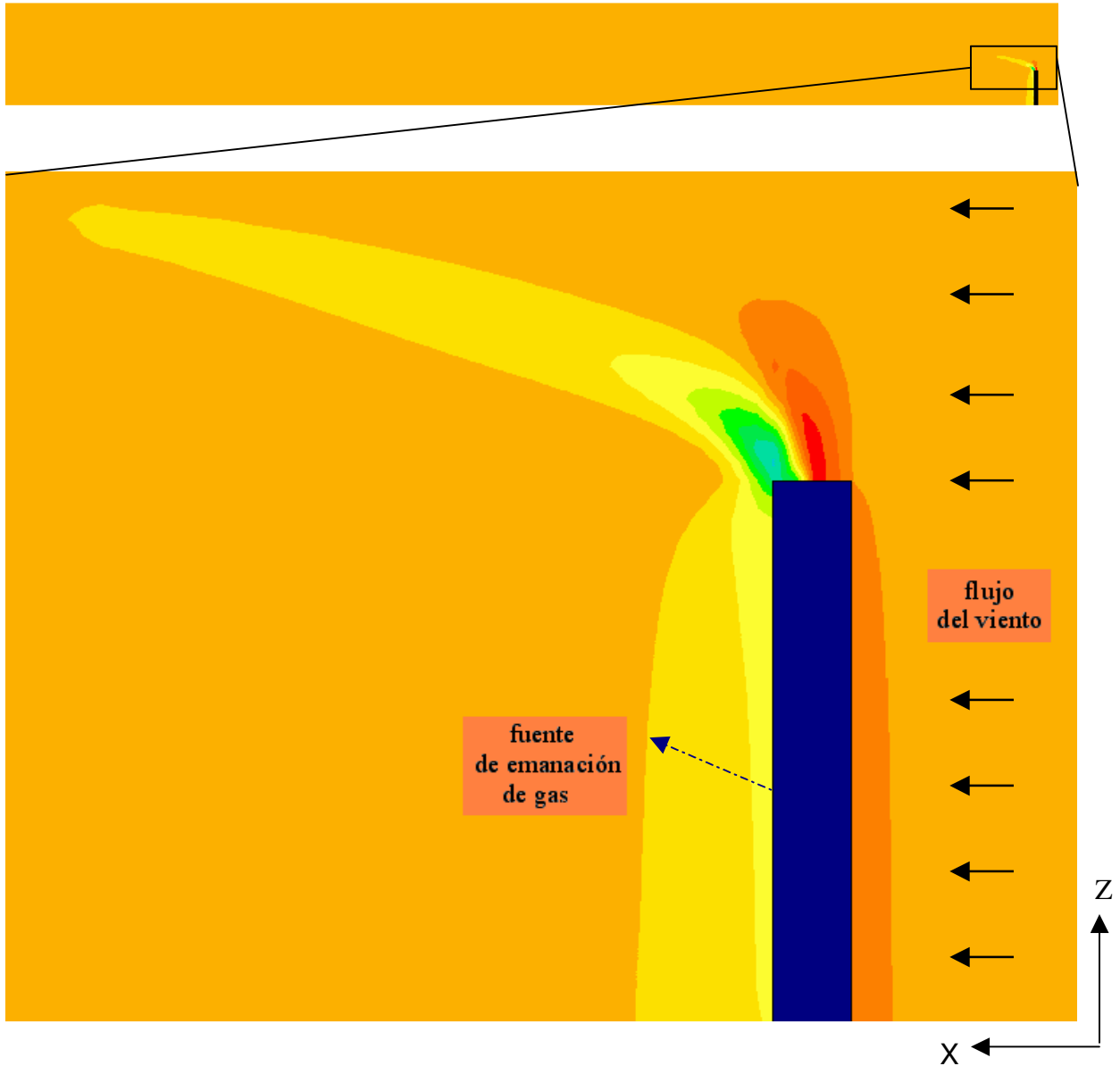


Figura 5.14: 5.14A (arriba): vista lateral del campo de presiones  $P_1$  en todo el sistema, 5.14B (abajo): vista lateral del campo de presiones  $P_1$  con un acercamiento hacia la fuente emanadora.

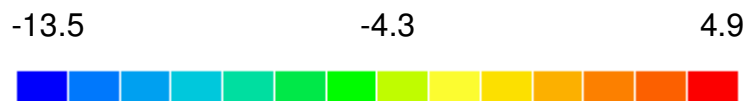


Figura 5.15: Valores del campo de presión  $P_1$  medido en [Pa], vista lateral (Referente a la figura 5.14).

En la figura 5.16 se muestra una vista lateral del campo de concentración del gas; ahí se muestra la formación del penacho cuando éste se dispersa en la atmósfera cerca de la fuente de emanación. A causa de la cantidad de movimiento del flujo cruzado, la descarga de gas se deflecta hacia la izquierda, en dirección del viento lateral. La parte rectangular en color negro de la figura 5.16 corresponde a dicha fuente. La figura 5.17 nos indica los valores de concentración del fluido de gas en nuestro sistema.

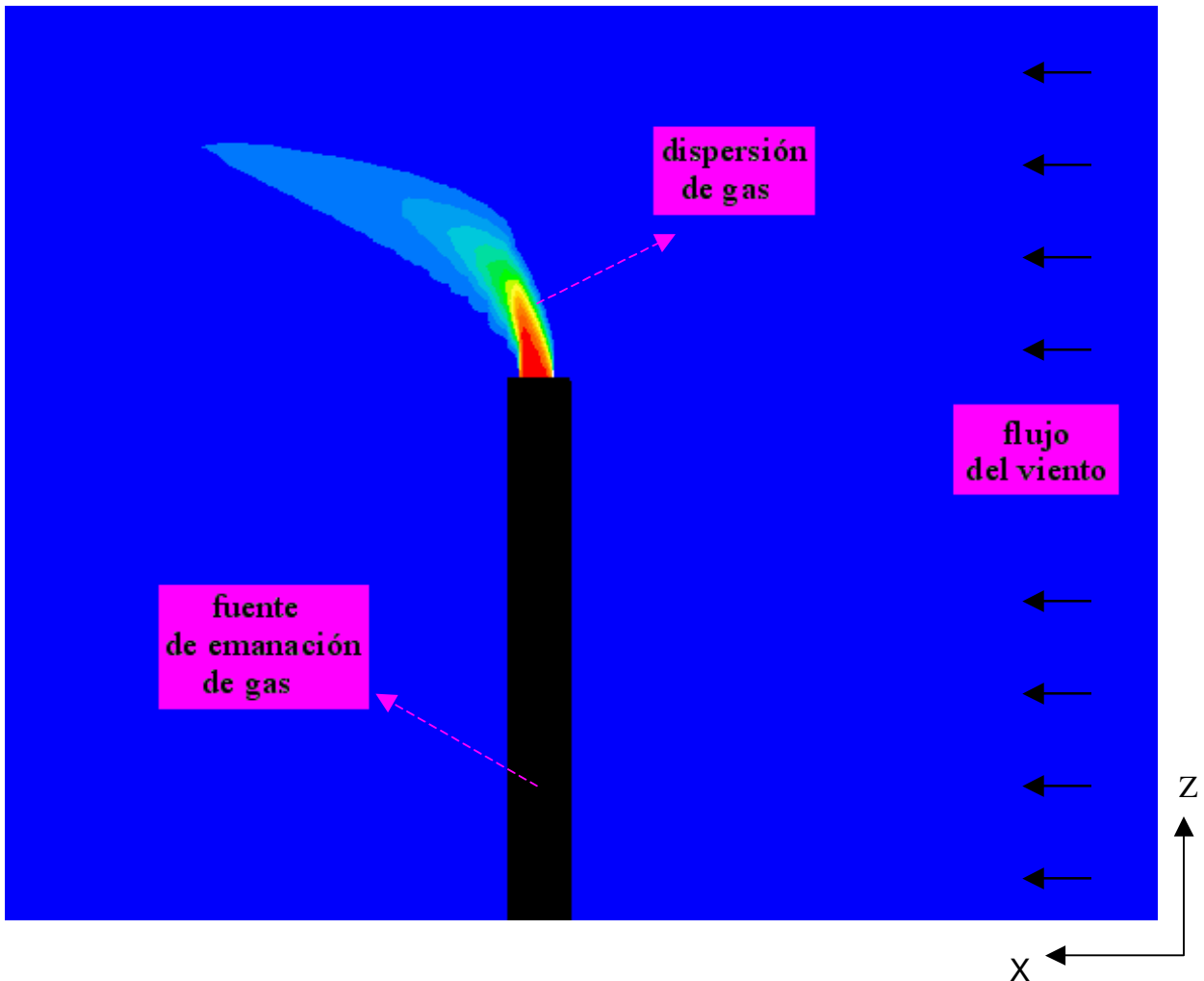


Figura 5.16 Vista lateral del campo de concentración del gas, cuando éste se dispersa.

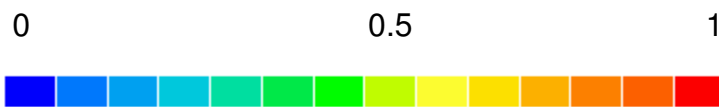


Figura 5.17: Valores del campo de concentración del gas medido en  $[Kg/m^3]$ , vista lateral (Referente a la figura 5.16).

Por último se muestra en la figura 5.18 una postura en tres dimensiones del comportamiento de la dispersión y la concentración que el fluido desarrolla en diferentes puntos del sistema. En dicha figura se aprecian la fuente de emanación y la formación del penacho en la misma dirección del viento. En la misma figura se aprecia la barra de colores que indican los valores de concentración de gas en la atmósfera neutra.

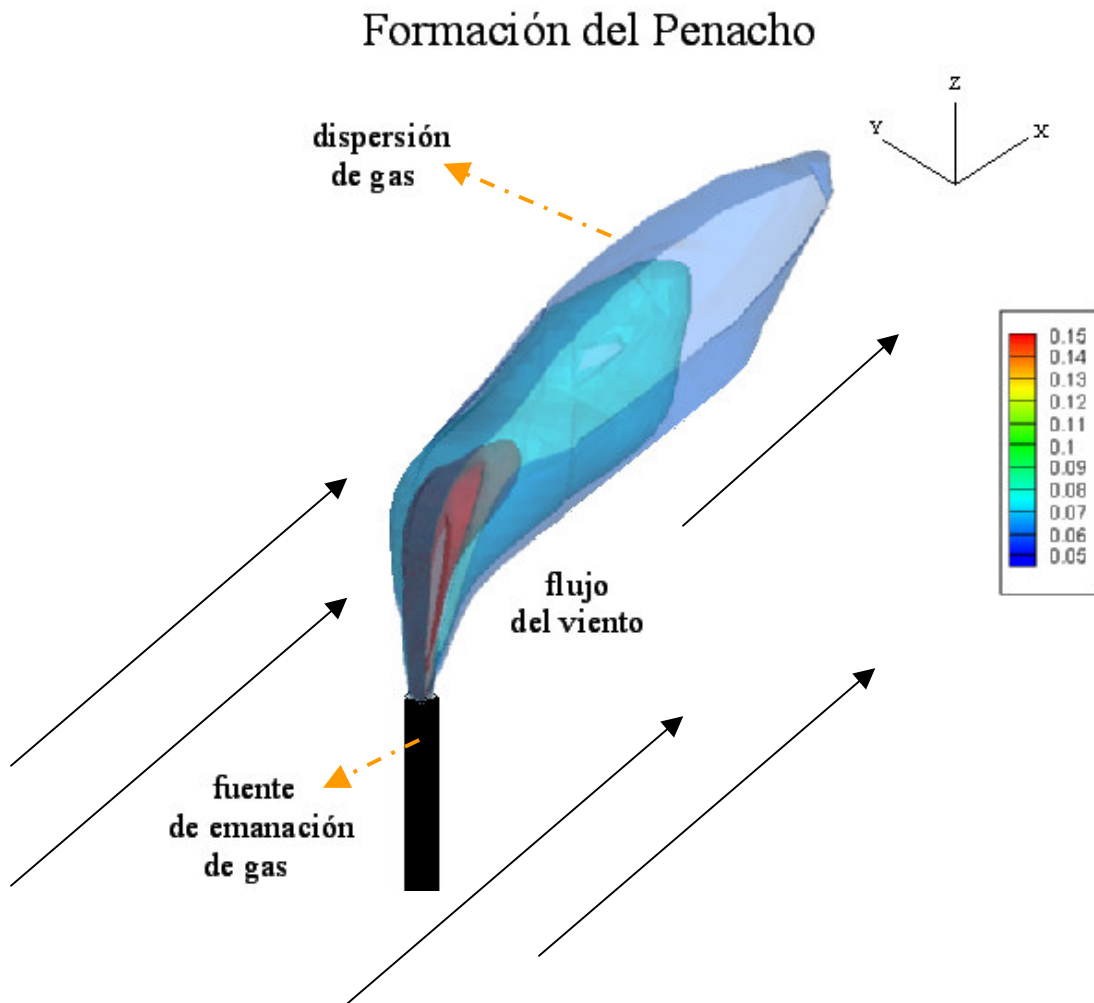


Figura 5.18: Vista en 3 dimensiones de la dispersión de gas formando el penacho.

## 5.5 Comparaciones entre el modelo numérico y el modelo teórico de Pasquill-Gifford

Con las mismas condiciones, se simuló el caso expuesto anteriormente con ambos modelos, el modelo de CFD y el modelo teórico de Pasquill-Gifford. Las comparaciones que se hicieron son acerca de la especie química conservada. Cabe mencionar que el modelo analítico proporciona predicciones bidimensionales, por lo que los resultados numéricos del modelo de CFD se hicieron en el plano y igual a cero a lo largo del eje  $x$ , y para múltiples estaciones sobre el eje  $z$ , el cual representa la altura del penacho. La concentración de la especie química conservada se comparó en partes por millón (ppm) y se hizo para distancias longitudinales, a partir de la fuente entre 100 y 150 metros. Hay que recordar que el modelo analítico es válido para distancias mayores de 100 metros. Las alturas sobre la fuente que se compararon son 0.5, 1.5, 2.5, 3.5 y 4.5 metros. Estos casos se muestran en las figuras 5.19, 5.20, 5.21, 5.22 y 5.23.

En estaciones donde  $\Delta h < 1.0$  [m], el modelo analítico predice valores mayores que el modelo de CFD mientras que para estaciones superiores,  $\Delta h > 1.0$ , este último modelo indica valores más altos debido principalmente a que el modelo de CFD predice que el penacho alcanza alturas mayores. En específico, los dos modelos tienden casi a los mismos valores aproximadamente cuando  $\Delta h = 1$  (ver figura 5.19). Después de los 6 metros, las concentraciones alcanzan un valor máximo en aproximadamente una altura entre 5.5 y 7.5 metros. Después de esta altura, las concentraciones vuelven a disminuir, debido a la mezcla que se tiene con el aire. Adicionalmente, el modelo de CFD predice valores mayores que el analítico debido a un mayor transporte de la especie química predicha por este modelo.

A pesar de las diferencias entre ambos modelos, las órdenes de magnitud son parecidas. Por el momento no se puede decir qué modelo es mejor ya que se

carece de datos experimentales de esta magnitud, los cuales nos permitirían validar los modelos.

El modelo de CFD tiene la ventaja adicional de que se pueden simular otras condiciones atmosféricas y tomar en cuenta el efecto gravitatorio, que en determinadas circunstancias puede tener una influencia grande en la dispersión del contaminante.

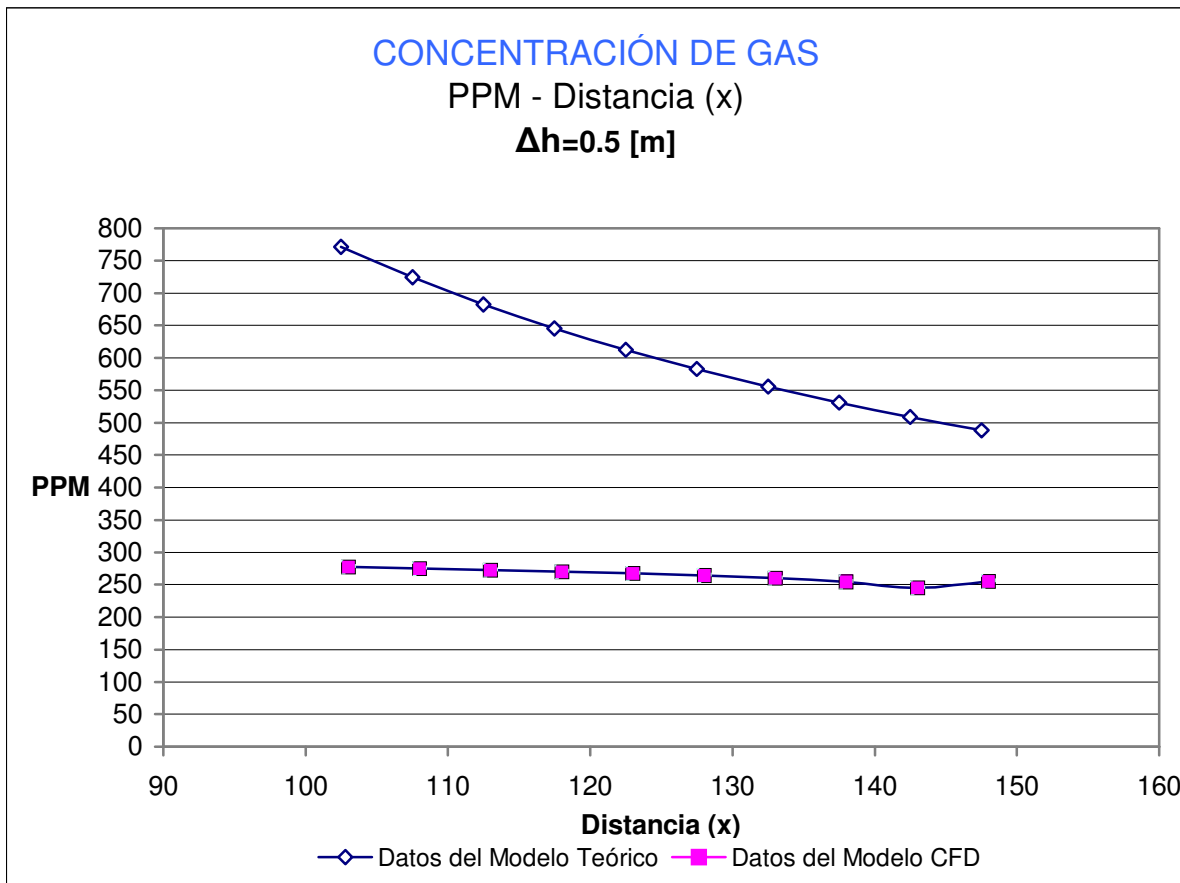


Figura 5.19: Gráfica comparativa. Concentración de gas a los 5.5 metros de altura.

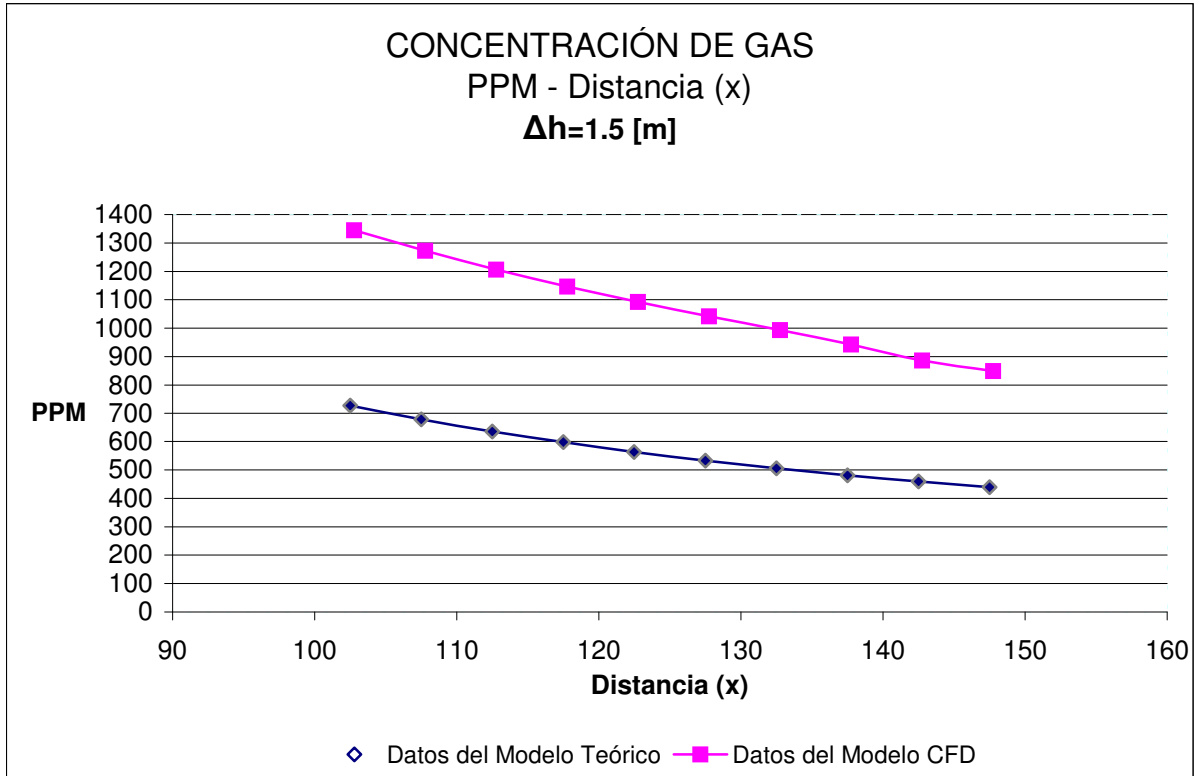


Figura 5.20: Gráfica comparativa. Concentración de gas a los 6.5 metros de altura.

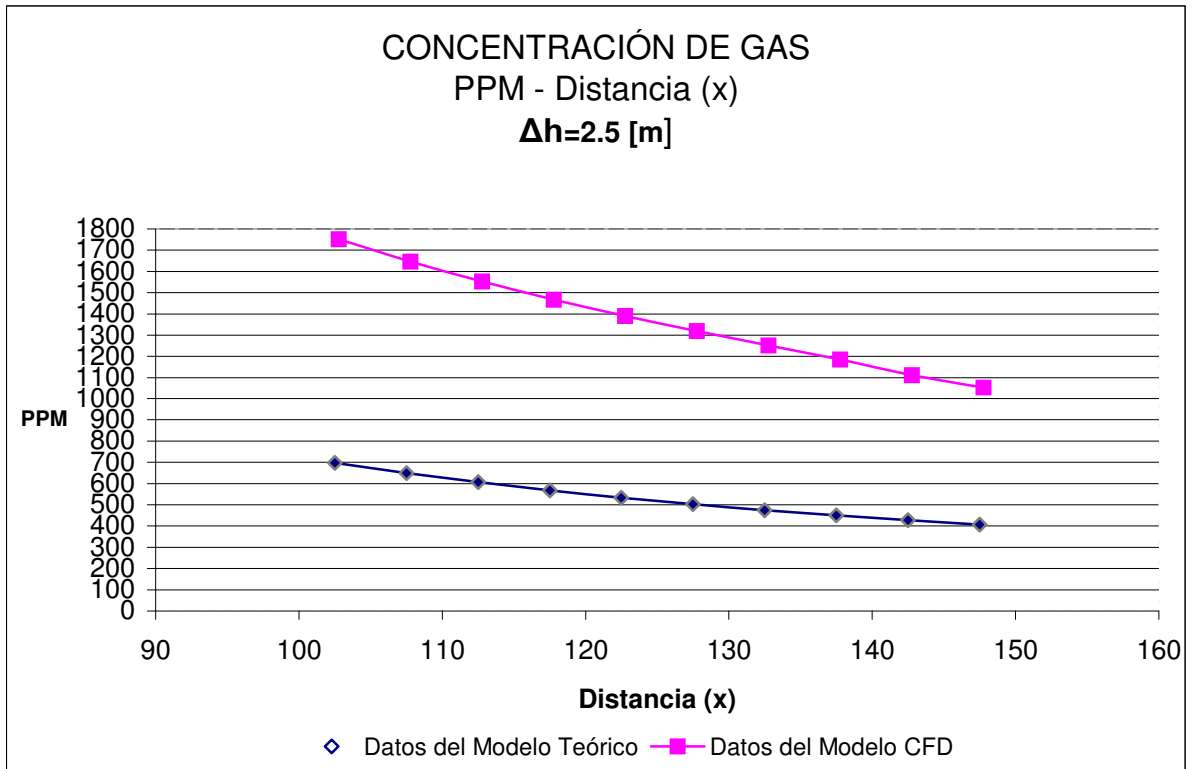


Figura 5.21: Gráfica comparativa. Concentración de gas a los 7.5 metros de altura.

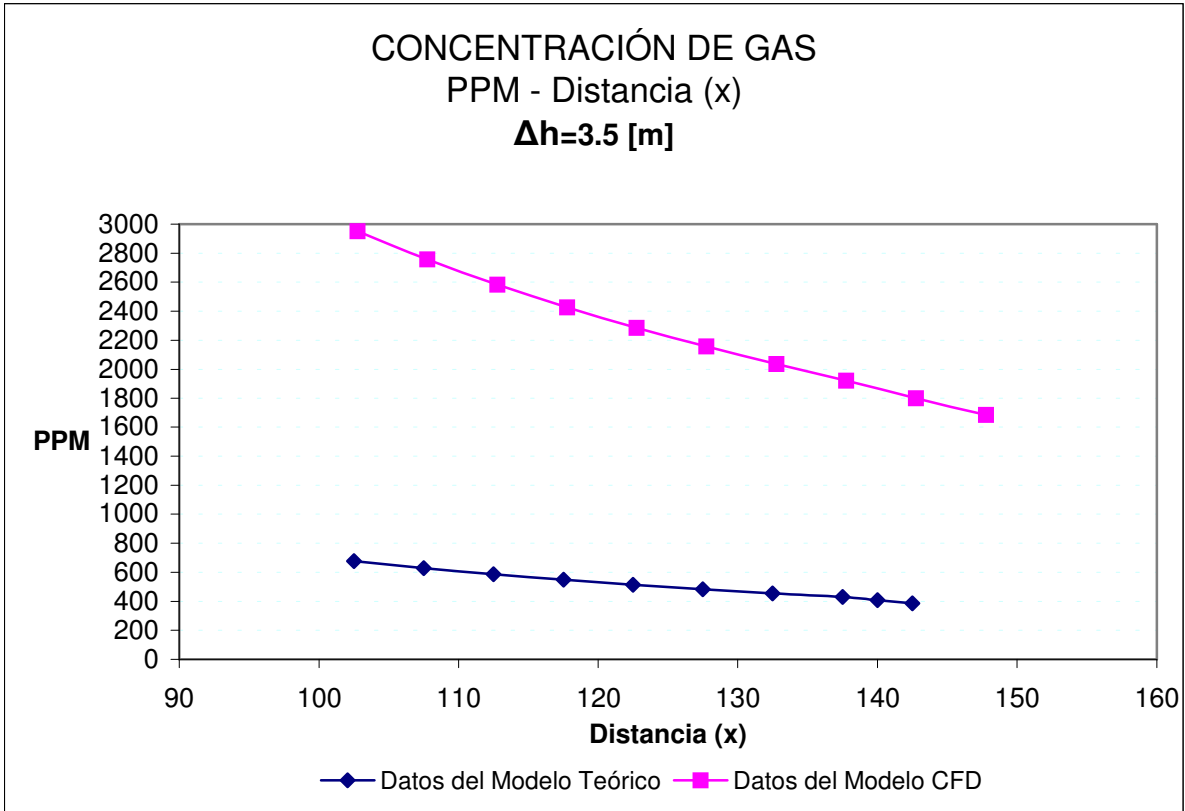


Figura 5.22: Gráfica comparativa. Concentración de gas a los 8.5 metros de altura.

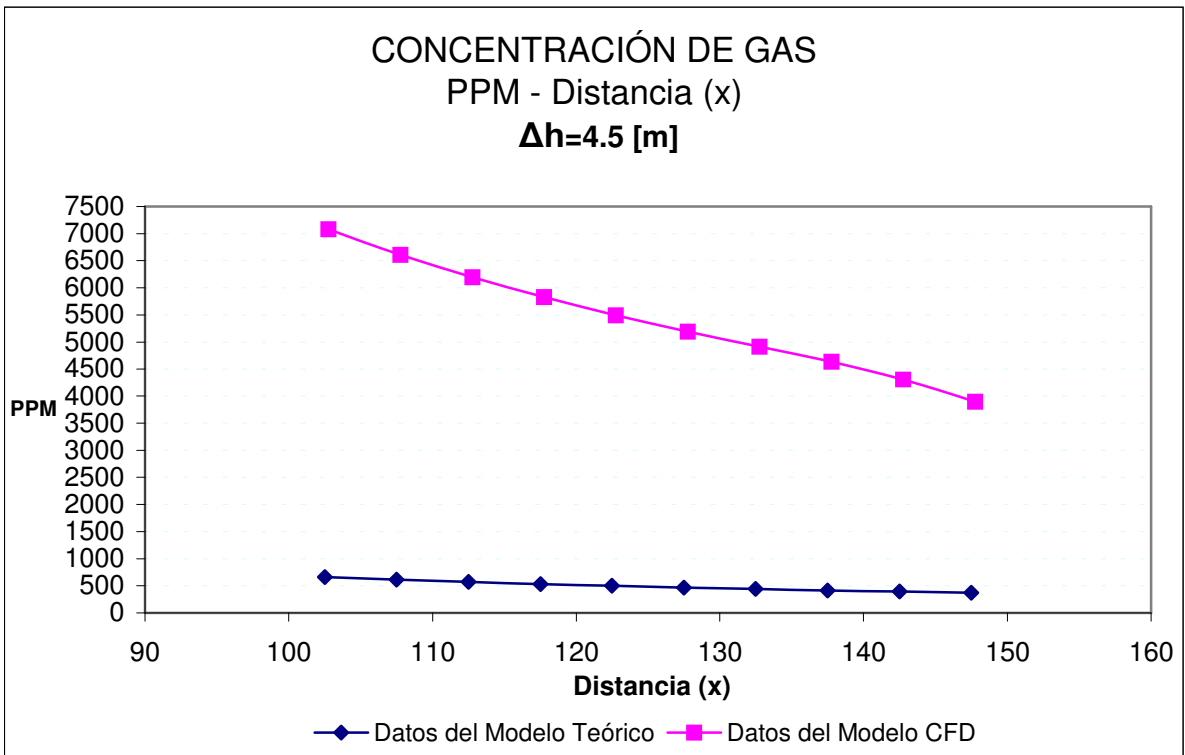


Figura 5.23: Gráfica comparativa. Concentración de gas a los 9.5 metros de altura.

En la siguiente figura se muestra comparativamente el comportamiento del modelo analítico con respecto al modelo CFD para todas las alturas estudiadas. Se aprecia que los valores de concentración del modelo analítico y del modelo CFD presentan aproximación aunque los valores del primero no fluctúan tanto como el modelo CFD.

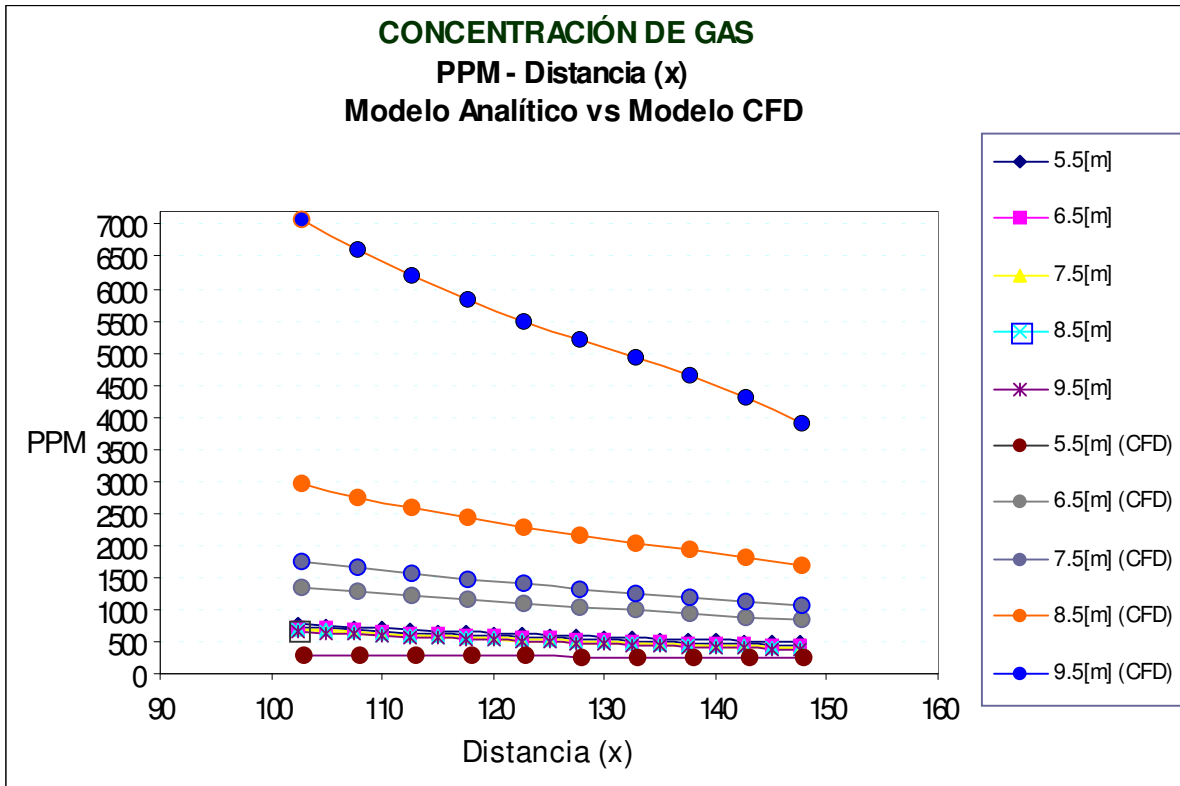


Figura 5.24: Gráfica comparativa. Comportamiento de la concentración de gas del modelo analítico y modelo CFD de 5.5 - 9.5 metros de altura.



---

## *CAPÍTULO 6*

---

### *CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES*

#### **6.1 Introducción**

En este trabajo se simuló de forma numérica la dispersión turbulenta de un gas neutro que es descargado en una atmósfera neutra. Es decir, tanto el fluido descargado como el fluido atmosférico tienen la misma densidad. La descarga de gas se ha simulado con un código de Dinámica de Fluidos, el cual es denominado PHOENICS. Este código usa la alternativa RANS para describir la aerodinámica del flujo: continuidad, conservación de la cantidad de movimiento y conservación de la especie química. El término de convección turbulenta resultante de haber promediado las ecuaciones, se modela mediante el modelo de turbulencia  $k - \epsilon$ . Las ecuaciones de transporte son resueltas con un método de volúmenes finitos. El sistema se simula en 3 dimensiones y los resultados se comparan con los de un modelo teórico gaussiano.

#### **6.2 Dispersión de gas**

El sistema simulado consta de una fuente emanadora en posición vertical y cilíndrica. Se añadió una cierta velocidad al viento dirigido transversalmente al flujo de descarga. El gas liberado está en fase gaseosa y con la misma densidad del aire que se encuentra en la atmósfera. Se trata de una descarga de fluido continua, la cual es arrastrada en dirección del viento formando el penacho sin depender en lo absoluto del tiempo. Detrás del cilindro que representa la fuente de emanación se forma una zona de recirculación debida a que el viento a causa de su cantidad de movimiento choca con el tubo al ser éste un obstáculo en su trayectoria. Se forman vórtices toroidales detrás del cilindro seguidos por otros vórtices alineados con un eje que

fluctúan en tiempo y espacio, los cuales provocan una zona de depresión en el punto contrario en el cual el viento choca con el tubo.

Respecto al campo de concentración del gas, se mostró la formación del penacho cuando el fluido se dispersa en la atmósfera cerca del tubo de descarga. A causa de la cantidad de movimiento del flujo cruzado, la descarga de gas sufre una desviación hacia el lado izquierdo, en dirección del viento.

El modelo analítico de Pasquill-Gifford considera un rango de validez de entre 100 metros y 10 kilómetros. En este trabajo de investigación, los resultados de la simulación y los resultados provenientes del modelo gaussiano fueron referidos a una distancia de entre 100 y 150 metros.

En las gráficas del capítulo anterior se puede observar un patrón en el comportamiento de los datos del modelo de Pasquill-Gifford, el cual entre los 100 y 150 metros de distancia de la fuente emanadora de gas, los valores de concentración tienden a estar en un rango promedio de 300 y 750[ppm]. Más específicamente, en 125[m] el valor de concentración es de alrededor de 500[ppm] en las diferentes alturas estudiadas. En la primera gráfica la curva tiene una tendencia diagonal, en la segunda este comportamiento disminuye, siendo menor dicha tendencia; así sucesivamente, conforme los valores de altura son mayores se va ampliando el rango de concentración teniendo en la curva una tendencia ahora horizontal.

Respecto al comportamiento de la curva del modelo CFD, se aprecia que no es el mismo, sino que es al contrario y es mucho más notorio el cambio de tendencia, puesto que en 5.5 metros comienza con tendencia horizontal y termina con tendencia diagonal a 9.5 metros de altura. Además, los valores de concentración del modelo CFD se alejan más reiteradamente entre ellos conforme la altura del penacho incrementa. El rango de valores en ppm en donde se encuentra la curva es diferente para cada altura (valores de  $z$ ). En el modelo numérico, entre más sea la distancia en dirección  $x$ , los valores de ppm tienden a subir rápidamente, mientras que en el modelo analítico, entre más distancia los valores van siendo menores, pero no tan drásticamente como en el modelo numérico, porque a los 100 metros el valor máximo es mayor por 100[ppm] con respecto al valor mínimo, por lo tanto el rango de ppm se

mantiene casi constante. Dicho comportamiento de los modelos indica que la máxima dispersión respecto al modelo CFD tiene lugar a una mayor altura (9.5 metros) debido a la cantidad de movimiento del flujo cruzado, lo cual provoca una dispersión con tendencia diagonal. En el caso del modelo analítico el flujo cruzado no propicia que la dispersión tenga una tendencia diagonal al ser el chorro arrastrado por el viento, sino que el gas descargado se dispersa casi en una forma horizontal aproximadamente después de salir de la fuente de emanación cuando es arrastrado por el viento a 5.5 metros de altura.

Esta herramienta computacional es sumamente eficiente y poderosa, entre las principales ventajas a resaltar es que en el código de CFD se pueden tomar en cuenta factores que son de mucha relevancia para la dispersión de fluido como se ha visto en esta tesis, como por ejemplo diferentes densidades entre el gas y la atmósfera en la cual el gas estará inmerso una vez que se disperse. La atmósfera estratificada es otro ejemplo (en diferentes alturas se tienen diferentes temperaturas), es posible tomar en cuenta también el efecto de la fuerza de gravedad.

### **6.3 Recomendaciones para trabajos futuros**

En el análisis de la estimación de las consecuencias de las emisiones accidentales a la atmósfera de contaminantes procedentes de actividades industriales, uno de los aspectos clave a considerar es su dispersión en el medio ambiente. En la industria existen muchas descargas de sustancias que son dispersadas en la atmósfera a grandes distancias, que pueden resultar nocivas para la vida animal y vegetal, por estas razones es la importancia de este tipo de trabajos. Por lo anterior se recomienda, en una primera parte contar con datos experimentales a gran escala. Dados los últimos avances computacionales, se utilizan métodos de simulación que hasta hace poco se consideraban costosos computacionalmente, como lo es la Simulación de Grandes Escalas.

# APÉNDICE I

---

## MODELOS DE TURBULENCIA.

En este apéndice se introducen, de forma concisa, algunos de los modelos que se pueden utilizar para representar el efecto de la dispersión turbulenta de un chorro de gas en una atmósfera neutra simulada en esta tesis. Los modelos se clasifican en dos categorías:

- Modelos de tipo “difusividad turbulenta”, esencialmente variantes del método conocido como  $k - \varepsilon$ .
- Cierres de segundo orden, en la forma de modelos de transporte de los esfuerzos de Reynolds.

En primer lugar se presentará la ecuación exacta para los esfuerzos de Reynolds, seguida por los cierres de segundo orden que constituyen el transporte de esfuerzos Reynolds utilizado en este trabajo. A continuación se presenta el modelo de turbulencia  $k - \varepsilon$  estándar, que es el modelo utilizado en esta tesis.

### 1 Cierres de segundo orden

La ecuación de transporte exacta para los esfuerzos de Reynolds  $(u_i'' u_j'')$  [6] es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} u_i'' u_j'') + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho} u_k u_i'' u_j'') = - \underbrace{\left( \bar{u}_i'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \bar{u}_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \right)}_{(a)}$$

$$\begin{aligned}
 & - \underbrace{\left( \overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j} + u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} \right)}_{(b)} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_k} (\overline{\rho u_i'' u_j'' u_k''})}_{(c)} \\
 & - \underbrace{\overline{\rho \left( u_i'' u_k'' \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} + u_j'' u_k'' \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \right)}}_{(d)} \\
 & - \underbrace{\left( \overline{\tau_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k} + \tau_{ik}'' \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} \right)}_{(e)} \tag{1}
 \end{aligned}$$

Los términos del lado derecho de la ecuación (1) representan: El efecto del gradiente de presión media (a), la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad (b), el transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds (c), la producción de los esfuerzos de Reynolds por velocidad de deformación media (d), y la disipación viscosa (e). De los términos anteriores, en (a), (b), (c), y (e) están presentes correlaciones desconocidas, y por tanto requieren modelización.

El término que expresa el efecto del gradiente de presión media (a), se puede escribir como:

$$- \left( \overline{u_i'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} u_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}} \right) = \frac{\overline{\rho' u_j''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\overline{\rho' u_i''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \tag{2}$$

La correlación  $\overline{\rho' u_j''}$  se puede modelar de una ecuación de conservación truncada [6] como:

$$\overline{\rho' u_j''} = - \frac{1}{4.3} \frac{\tilde{k}}{\varepsilon} u_i'' u_j'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \tag{3}$$

donde  $k = 1/2 \overline{u_i'' u_i''}$  es la energía cinética turbulenta y  $\epsilon$  es su tasa de disipación. La contribución de este término es muy pequeña y frecuentemente se desprecia ([8] y [10]).

Con fines de modelización la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, (b), frecuentemente se divide en una parte redistributiva y una parte isótropa [13]:

$$\left( \overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} + \overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} \right) = - \left( \overline{u_i'' \frac{\partial p'}{\partial x_j}} + \overline{u_j'' \frac{\partial p'}{\partial x_i}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} \quad (4)$$

La parte isótropa se divide en dos términos, uno de transporte por presión y otro de dilatación por presión:

$$-\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{u_k'' \frac{\partial p'}{\partial x_k}} = \underbrace{-\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{\frac{\partial p' u_k''}{\partial x_k}}}_{(I)} + \underbrace{-\frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' \frac{\partial u_k''}{\partial x_k}}}_{(II)} \quad (5)$$

En flujos de baja velocidad  $Ma \ll 1$ , el término (II) de la ecuación (5) generalmente se desprecia [4]. El término (I) se suma al término de transporte turbulento de los esfuerzos de Reynolds (c) para formar el término:

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (C_{ijk}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \overline{p u_i'' u_j'' u_k''} + \frac{2}{3} \delta_{ij} \overline{p' u_k''} \right) \quad (6)$$

El término  $C_{ijk}$  se modela mediante un cierre de tipo gradiente [5]:

$$C_{ijk} = -C_s \frac{\tilde{k}}{\epsilon} u_k'' u_l'' \frac{\partial u_i'' u_j''}{\partial x_l} \quad (7)$$

El término (e) es la correlación de la disipación viscosa:

$$\overline{\tau_{ik} \frac{\partial u_j''}{\partial x_k}} + \overline{\tau_{ik}'' \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}} = \bar{\rho} \varepsilon_{ij} \quad (8)$$

Si se supone isotropía local, el término  $\varepsilon_{ij}$  se puede escribir en función de la disipación de energía cinética turbulenta  $\varepsilon$  como [6]:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \varepsilon \delta_{ij} \quad (9)$$

La tasa de disipación de la energía cinética turbulenta,  $\varepsilon$ , se calcula de la siguiente ecuación de transporte, deducida por procedimientos similares a los utilizados en el caso de densidad constante [6]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \varepsilon u_j) = & \underbrace{-C_{\varepsilon 1} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{\tilde{k}} u_k'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_j}}_{(A)} - \underbrace{C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{\tilde{k}}}_{(B)} + \underbrace{C_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon}{\tilde{k}} \frac{\overline{\rho' u_j''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}}_{(C)} \\ & + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} \left( C_{\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\tilde{k}}{\varepsilon} u_j'' u_k'' \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right)}_{(D)} \end{aligned} \quad (10)$$

donde, de acuerdo con lo expuesto anteriormente, el término (C) se desprecia.

La parte re-distributiva de la correlación entre gradientes de presión fluctuante y fluctuaciones de velocidad, expresión (4), usualmente se divide en dos partes: una que incluye cantidades turbulentas, y otra que incluye la tasa de deformación media.

Modelos para este término se han propuesto por ejemplo por Launder et al (modelo ML), Gibson y Younis (modelo MG) y Musonge (modelo MJ). Denotando al término redistributivo como  $\Pi_{ij}$ , los modelos se escriben como:

$$\Pi_{ij} = -C_1 \bar{\rho} \varepsilon \left( \frac{u_i'' u_j''}{\tilde{k}} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \right) + C_2 \delta_{ij} \bar{\rho} u_l'' u_m'' \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_m} - C_3 \bar{\rho} P_{ij} + C_4 \bar{\rho} \tilde{k} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right)$$

$$-\frac{2}{3}C_4\bar{\rho}\tilde{k}\frac{\partial\tilde{u}_k}{\partial x_k}\delta_{ij}-\left(\frac{2}{3}C_2+C_3\right)\left(\bar{\rho}u_i''u_j''\frac{\partial\tilde{u}_l}{\partial x_i}+\bar{\rho}u_l''u_i''\frac{\partial\tilde{u}_l}{\partial x_j}\right) \quad (11)$$

donde  $P_{ij} = -(u_i''u_k''\partial\tilde{u}_j/\partial x_k + u_j''u_k''\partial\tilde{u}_i/\partial x_k)$ .

Las constantes de las ecuaciones (7), (10), y (11) se presentan en la tabla 1.

Sustituyendo las ecuaciones (6), (9) y (11) en la ecuación de los esfuerzos de Reynolds (1) se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}u_i''u_j'') + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}\tilde{u}_k u_i''u_j'') &= \frac{\partial}{\partial x_k}(C_{ijk}) - \bar{\rho}\left(u_i''u_k''\frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_k} + u_j''u_k''\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_k}\right) \\ &\quad - \frac{2}{3}\bar{\rho}\mathcal{E}\delta_{ij} + \Pi_{ij} \end{aligned} \quad (12)$$

Modelo	MG	ML	MJ
C <sub>e1</sub>	1.4	1.44	1.40
C <sub>e2</sub>	1.8	1.90	1.90
C <sub>e3</sub>	0.15	0.15	0.18
C <sub>e4</sub>	0.22	0.21	0.22
C <sub>1</sub>	3	1.50	3.00
C <sub>2</sub>	0.3	-0.582	-0.44
C <sub>3</sub>	-	0.764	0.46
C <sub>4</sub>	-	-0.182	-0.23

*Tabla 1: Constantes de las ecuaciones (7), (10) y (11).*

## 2 Modelos de viscosidad turbulenta

Un método alternativo para determinar los esfuerzos de Reynolds  $u_i''u_j''$ , son los modelos basados en el concepto de viscosidad turbulenta, que suponen que, de la misma manera que en flujo laminar los esfuerzos viscosos son proporcionales al gradiente de la velocidad, en un flujo turbulento los esfuerzos causados por las fluctuaciones turbulentas son proporcionales al gradiente de la velocidad media. Esta relación entre los esfuerzos de Reynolds y las variables medias es:



$$\bar{\rho} u_i'' u_j'' = -\bar{\rho} \nu_T \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left( \bar{\rho} \tilde{k} + \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (13)$$

Donde  $\nu_T (= \mu_T / \bar{\rho})$  es la viscosidad turbulenta. A diferencia de la viscosidad molecular ( $\nu = \mu / \rho$ ),  $\nu_T$  no es una propiedad del fluido, sino una característica del estado del flujo, y puede variar significativamente de un punto a otro dentro del mismo flujo.

Para el flujo turbulento de escalar, el concepto de viscosidad turbulenta o propiamente de difusividad turbulenta se expresa como:

$$\rho u_i'' u_\alpha'' = -\bar{\rho} \frac{\nu_T}{S_{c_T}} \frac{\partial \tilde{\phi}_\alpha}{\partial x_i} \quad (14)$$

donde  $S_{c_T}$  es el número de Schmidt/Prandtl turbulento.

La viscosidad turbulenta  $\nu_T$  puede calcularse de diferentes formas, dando lugar a una variedad de modelos con un número variable de ecuaciones diferenciales. Los más populares de estos modelos son, probablemente, los de la familia del modelo  $k - \varepsilon$ . Las variantes utilizadas en este trabajo se presentan a continuación.

### 3 Modelo $k - \varepsilon$ (modelo de turbulencia utilizado en esta tesis)

En este modelo, se define como:

$$\nu_T = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\varepsilon} \quad (15)$$

Donde  $C_\mu$  es una constante determinada experimentalmente. Los valores de  $\tilde{k}$  y  $\varepsilon$  se calculan a través de las ecuaciones de transporte.

La ecuación para la energía cinética turbulenta,  $\tilde{k}$  se obtiene de la ecuación (1), haciendo  $i = j$ , aplicando la hipótesis de isotropía local, y dividiendo entre dos:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\tilde{u}_j\tilde{k}) + \rho u_i''u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \underbrace{\left( \frac{1}{2} \overline{\rho u_j'' u_i'' u_i''} \right)}_{(a)} - \rho\epsilon \quad (16)$$

Los esfuerzos de Reynolds  $u_i''u_j''$  se expresan de acuerdo con la ecuación (13).

El término (a) se aproxima como:

$$- \left( \frac{1}{2} \overline{\rho u_j'' u_i'' u_i''} \right) \approx \frac{\mu_T}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \quad (17)$$

Sustituyendo las expresiones (13) y (17) en la ecuación (16), se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\tilde{u}_j\tilde{k}) = \rho(P_k - \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \frac{v_T}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j} \right) \quad (18)$$

donde:

$$P_k = v_T \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{2}{3} \left( \tilde{k} + v_T \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \quad (19)$$

Aplicando hipótesis similares a las utilizadas para la ecuación de  $\tilde{k}$  (18), la ecuación para la disipación de la energía cinética turbulenta,  $\epsilon$ , se obtiene a partir de la ecuación (10):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\tilde{u}_j\epsilon) = \rho \frac{\epsilon}{\tilde{k}} (C_{\epsilon 1} P_k - C_{\epsilon 2} \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \frac{v_T}{\sigma_k} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right) \quad (20)$$

Las constantes de las ecuaciones (18) y (20) se muestran en la tabla 2.

$C_\mu$	$\sigma_k$	$\sigma_\varepsilon$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
0.09	1.0	1.314	1.44	1.92

*Tabla 2: Constantes del modelo  $k-\varepsilon$  estándar.*

El modelo  $k-\varepsilon$  tal y como ha sido presentado se comporta satisfactoriamente en flujos sencillos, normalmente flujos parabólicos para los que el modelo fue desarrollado en los años 70's. En flujos más complejos, incluyendo aquellos con rotación o con curvatura apreciable en las líneas de corriente (como los investigados en esta tesis), las hipótesis de isotropía en las que se basa el modelo no son aplicables, y las predicciones proporcionadas por el modelo son en general menos satisfactorias. La popularidad de este tipo de modelos, en la que sin duda juega un papel importante su sencillez y economía, ha dado lugar a una serie de modificaciones, o variantes, que intentan paliar estas deficiencias sin tener que abandonar la hipótesis de viscosidad turbulenta a favor de cierres de segundo orden.

## APÉNDICE II

---

### ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN.

En este apéndice se presentan los esquemas lineales que se usan en la discretización de término convectivo de la ecuación general introducida en el capítulo 2.

En la formulación de la ecuación discretizada (3.1), se requiere conocer la densidad  $\rho$  y la variable escalar,  $\phi$ , en la cara de la celda. Estas variables se calculan en el nodo de la celda, por lo que es necesario interpolar entre celdas para conocer su valor en la cara. Este cálculo de  $\phi$  y  $\rho$  en la cara de la celda da lugar a los llamados esquemas de discretización. La determinación de los valores de estas variables en la cara es importante para la precisión y convergencia de la solución numérica.

A continuación, se presentan los esquemas de discretización lineales que se usan en esta tesis. Estos esquemas se describirán en base al sistema de celdas que se ilustra en la figura 1. Como ejemplo, se obtendrá el valor de  $\phi$  en la cara  $e$  de la celda P. La velocidad en la cara  $e$  se considerará, sin pérdida de generalidad, positiva ( $u_e > 0$ ).

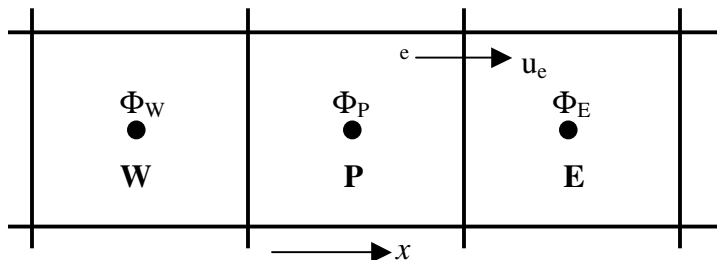


Figura 1: Diagrama esquemático de celdas.

## 1 Esquemas lineales

### 1.1 Diferencias desplazadas de primer orden

Con este esquema se supone que el valor de la variable  $\phi$  en la cara  $e$  es igual al nodo adyacente aguas arriba, es decir, para  $u_e > 0$ :

$$\phi_e = \phi_P \quad (1)$$

Esta alternativa es de implementación sencilla, acotada y altamente estable casi bajo cualquier situación pero tiene los inconvenientes de su precisión, que es de primer orden y de presentar problemas de difusión numérica. Esta falsa difusión es mayor si en el flujo hay un desalineamiento en la dirección del flujo y las líneas de malla, como por ejemplo en flujos de recirculación.

### 1.2 Diferencias centradas

Este esquema supone la variación lineal de  $\phi$  entre los nodos P y E; por tanto, el valor de la cara  $e$  es:

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (2)$$

Este esquema tiene una precisión de segundo orden pero tiene el inconveniente de no estar acotado, por lo que puede presentar inestabilidades numéricas. El límite de estabilidad de este esquema viene dado en función del número de Peclet (ecuación 3.3 del capítulo 3), que es un parámetro comparativo entre los procesos convectivo y difusivo.

Para situaciones en que los procesos convectivos dominan sobre los difusivos  $Pe > 2$ , por ejemplos flujos con número de Reynolds altos, el esquema presenta oscilaciones numéricas.

### 1.3 Híbrido

Este esquema fue introducido por Spalding [13] y consiste en combinar los esquemas de diferencias desplazadas y centradas para calcular el valor de la propiedad  $\phi$  en la cara del volumen de control. La selección del esquema se hace en función del número de Peclet de la celda:

- Si  $Pe \leq 2$ , se usan diferencias centradas:

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (3)$$

- Si  $Pe > 2$ , se usan diferencias desplazadas:

$$\phi_e = \phi_P, \quad (4)$$

Para flujos con bajo número de Reynolds/Peclet el esquema utilizado es el de diferencias centradas, y por tanto resulta de orden 2; sin embargo, el esquema presenta problemas asociados al esquema de diferencias desplazadas cuando el flujo está dominado por los procesos de convección  $Pe > 2$ .

Los esquemas lineales de alto orden presentan una buena precisión, pero no están acotados, por lo que pueden presentar oscilaciones numéricas. Su uso no es recomendado en el cálculo de cantidades que no aceptan valores negativos, o en general de cantidades acotadas (tales como concentraciones), pues las oscilaciones introducidas por el modelo pueden sacar al escalar de su dominio de definición.

## *APÉNDICE III*

---

### *ARCHIVO DE DATOS DE ENTRADA Q1*

TALK=F;RUN( 1, 1);VDU=X11-TERM

GROUP 1. Run title and other preliminaries.

TEXT( DESCARGA DE FLUJO EN LA ATMÓSFERA)

\*\* Declarando variables enteras y reales.

INTEGER(NYB,NZB,NYIN,NZIN,NZJ1,NZJ2)

REAL(wiful,vin,GRHO)

REAL(WINF,GVIST,FINF,HAIRIN,SECIN,DILIN)

REAL(WAIR,WFU,WPR,CPAIR)

REAL(HFU,STOIC,FSTOI,CEBU,CPFU,CPPR,HINF,EAIR,YREW,HCMB)

real(ljet);ljet=0.203

wiful=15.0

vin=0.0

\*\* Thermodynamic and eddy-break-up constants.

GRHO=1.161

PRESS0=1.E5

\*\* Thermodynamic and eddy-break-up constants.

WAIR=29.0;CPAIR=1032.5068;CPPR=1500.0;CPFU=2096.1

WFU=16.0;WPR=28.0;HFU=5.0E7;STOIC=17.24

FSTOI=1./(1.+STOIC);CEBU=4.0

\*\* Domain specifications.

HAIRIN=1032.3374\*300.0

HCMB=2075.072\*300.0

EAIR=1.7064

FINF=.033083499

YREW=STOIC\*EAIR/(STOIC\*EAIR+1)  
HINF=HFU\*FINF+HAIRIN\*YREW+HCMB\*FINF

GROUP 2. Transience; time-step specification

tlast=10e-2  
tfrac(1)=-lstep;tfrac(2)=tlast/lstep

GROUP 3. X-direction grid specification

\*\* Con las siguientes instrucciones definiremos la malla cartesiana completa.  
\*\*Primero se define la región en la dirección X, con sus respectivas 6 subregiones.

NX=158; CARTES=T  
NREGX=6  
IREGX=1; GRDPWR(X,10,5.0,1.0)  
IREGX=2; GRDPWR(X,13,0.26,1.0)  
IREGX=3; GRDPWR(X,40,5.0,1.0)  
IREGX=4; GRDPWR(X,75,50.0,1.0)  
IREGX=5; GRDPWR(X,10,45.0,1.0)  
IREGX=6; GRDPWR(X,10,50.0,1.0)

GROUP 4. Y-direction grid specification

\*\* En segundo lugar definimos la región en la dirección Y, con sus respectivas 3 subregiones.  
\*\* El radio de la fuente de emanación es = 0.26[m] (Diámetro = 0.52[m]).

NY=28  
NREGY=3  
IREGY=1; GRDPWR(Y,13,0.26,1.0)  
IREGY=2; GRDPWR(Y,10,1.55,1.0)  
IREGY=3; GRDPWR(Y,5,1.55,1.0)

GROUP 5. Z-direction grid specification

\*\*Por último, se define la subregión en dirección Z, con sus 3 respectivas subregiones.

NZ=80  
NREGZ=3  
IREGZ=1; GRDPWR(Z,30,5.0,1.0)  
IREGZ=2; GRDPWR(Z,20,2.5,1.0)  
IREGZ=3; GRDPWR(Z,30,7.5,1.0)

GROUP 7. Variables stored, solved & named



\*\*Resolviendo variables físicas.

```
solve(p1,u1,v1,w1)
SOLUTN(P1 ,Y,Y,Y,N,N,N)
SOLVE(C1);STORE(TMP1,RHO1,PPMM);TURMOD(KERNG)
SOLUTN(U1 ,Y,Y,N,N,N,N)
SOLUTN(V1 ,Y,Y,N,N,N,N)
SOLUTN(W1 ,Y,Y,N,N,N,N)
```

GROUP 9. Properties of the medium (or media)

\*\*Las siguientes variables se refieren a las propiedades del medio ambiente.

```
ENUL=1.57968E-5
RHO1=1.1;RHO1A=WFU;RHO1B=WAIR;RHO1C=WPR
TMP1=300.0;TMP1A=CPFU;TMP1B=CPPR;TMP1C=CPAIR
```

GROUP 11. Initialization of variable or porosity fields

\*\* Initial values.

```
FIINIT(P1)=0.01
FIINIT(U1)=3.0;FIINIT(W1)=0.010
FIINIT(KE)=.01;FIINIT(EP)=0.01
```

\*\* Con las siguientes instrucciones se delimitará la fuente, el tubo vertical por donde el gas será conducido a la atmósfera.

```
CONPOR(PARED1,0.0,CELL,11,11,1,3,1,30)
CONPOR(PARED2,0.0,CELL,12,12,4,5,1,30)
CONPOR(PARED3,0.0,CELL,13,13,5,6,1,30)
CONPOR(PARED4,0.0,CELL,14,15,6,6,1,30)
CONPOR(PARED5,0.0,CELL,16,18,7,7,1,30)
CONPOR(PARED6,0.0,CELL,19,21,6,6,1,30)
CONPOR(PARED7,0.0,CELL,21,22,5,5,1,30)
CONPOR(PARED8,0.0,CELL,22,22,4,4,1,30)
CONPOR(PARED9,0.0,CELL,23,23,1,3,1,30)
```

GROUP 13. Boundary conditions and special sources

\*\*Indicando el rango de iteración en cada una de las celdas de las velocidades.

```
varmax(w1)=20.0
varmin(w1)=-20.0
varmax(v1)=15.0
varmin(v1)=-15.0
```

\*\* INLET FUEL  
\*\* Fuel/Oxidant inlet.

```
real(keini,epini)
keini=(0.03*wiful)**2
keini=19.44
epini=((0.09**0.75)*keini**1.5)/(0.1*56E-3)
```

\*\* Definiendo la entrada del flujo de aire, será por la cara oeste de nuestro sistema.

```
PATCH(patchf,WEST,1,1,1,NY,1,NZ,1,1)
coval(patchf,P1,fixflu,1.1*3.0);coval(patchf,w1,onlyms,0.0)
coval(patchf,v1,onlyms,0.0)
coval(patchf,u1,onlyms,3.0)
coval(patchf,KE,onlyms,1.0);coval(patchf,EP,onlyms,10.0)
coval(patchf,C1,onlyms,0.0)
```

\*\*Con los siguientes comandos se definirán las fronteras, las cuales son las salidas del sistema así como también el piso desde donde emerge el gas por medio del tubo vertical.

```
WALL(SUELO,LOW,1,NX,1,NY,1,1,1,1)
```

```
PATCH(SALIDA1,EAST,NX,NX,1,NY,1,NZ,1,1)
COVAL(SALIDA1,P1,FXP,0.0)
```

```
PATCH(SALIDA2,NORTH,1,NX,NY,NY,1,NZ,1,1)
COVAL(SALIDA2,P1,FXP,0.0)
```

```
PATCH(SALIDA3,HIGH,1,NX,1,NY,NZ,NZ,1,1)
COVAL(SALIDA3,P1,FXP,0.0)
```

\*\*Delimitando las fuentes de salida del gas

\*\*Definiendo para la primera sección (fuente 1)

```
PATCH(fuente1,LOW,12,22,1,3,1,1,1,1)
coval(fuente1,P1,fixflu,1.1*10.0);coval(fuente1,w1,onlyms,10.0)
coval(fuente1,v1,onlyms,0.0)
coval(fuente1,u1,onlyms,0.0)
coval(fuente1,KE,onlyms,.1);coval(fuente1,EP,onlyms,10.0)
COVAL(fuente1,C1,onlyms,1.0)
```

\*\* Definiendo para la segunda sección (fuente 2)

```
PATCH(fuente2,LOW,13,21,4,4,1,1,1,1)
```

```
coval(fuente2,P1,fixflu,1.1*10.0);coval(fuente2,w1,onlyms,10.0)
coval(fuente2,v1,onlyms,0.0)
coval(fuente2,u1,onlyms,0.0)
coval(fuente2,KE,onlyms,.1);coval(fuente2,EP,onlyms,10.0)
COVAL(fuente2,C1,onlyms,1.0)
```

\*\* Definiendo para la tercera sección (fuente 3)

```
PATCH(fuente3,LOW,14,20,5,5,1,1,1,1)
coval(fuente3,P1,fixflu,1.1*10.0);coval(fuente3,w1,onlyms,10.0)
coval(fuente3,v1,onlyms,0.0)
coval(fuente3,u1,onlyms,0.0)
coval(fuente3,KE,onlyms,.1);coval(fuente3,EP,onlyms,10.0)
COVAL(fuente3,C1,onlyms,1.0)
```

\*\* Definiendo para la cuarta sección (fuente 4)

```
PATCH(fuente4,LOW,16,18,6,6,1,1,1,1)
coval(fuente4,P1,fixflu,1.1*10.0);coval(fuente4,w1,onlyms,10.0)
coval(fuente4,v1,onlyms,0.0)
coval(fuente4,u1,onlyms,0.0)
coval(fuente4,KE,onlyms,.1);coval(fuente4,EP,onlyms,10.0)
COVAL(fuente4,C1,onlyms,1.0)
```

GROUP 15. Termination of sweeps

\*\*Definiendo el número de iteraciones que se harán en cada una de las celdas.

```
LSWEEP=15000;SELREF=F;RESFAC=0.1
restrt(all)
```

GROUP 16. Termination of iterations

GROUP 17. Under-relaxation devices

```
REAL(dmaxy,dmaxz,relx);dmaxy=.11;dmaxz=.253;RELX=0.01
```

\*\*Definiendo relajación lineal o de falso paso temporal para las variables a resolver (iterando de un valor a otro sin avanzar muy rápido).

```
RELAX(P1 ,LINRLX, 3.000000E+00)
RELAX(U1 ,FALSDT, 1.000000E-5)
RELAX(V1 ,FALSDT, 1.000000E-5)
```

RELAX(W1 ,FALSDT, 1.000000E-5)  
RELAX(KE ,FALSDT, 1.000000E-5)  
RELAX(EP ,FALSDT, 1.000000E-5)  
RELAX(C1 ,LINRLX, 0.7)

GROUP 18. Limits on variables or increments to them

\*\*Indicando el rango de iteración en cada una de las celdas de las variables a resolver,  
excepto velocidades.

VARMAX(P1 ) = 100000.0  
VARMIN(P1 ) = -100000.0  
VARMAX(KE ) = 30.000  
VARMAX(EP ) = 5.000E+4  
VARMIN(KE)=0.0;VARMIN(EP)=0.0

GROUP 19. Data communicated by satellite to GROUND

CHSOA=FSTOI;CHSOB=CEBU;TMP2A=FSTOI;TMP2B=HFU

\*\* Colocación de prod en EBM.

rg(1)=FSTOI\*0.125  
rg(2)=LSWEEP-1

GROUP 21. Print-out of variables

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

GROUP 22. Spot-value print-out

\*\*Monitoreando la iteración.

IXMON=30;IYMON=2;IZMON=35;TSTSWP=-1

GROUP 23. Field print-out and plot control

\*\*Dando formato a la tabla de resultados.

NPLT=1

ITABL=1  
iyprf=NY-2

STOP

## ***BIBLIOGRAFÍA***

---

- [1] P. Moin and K. Mashkes. *Direct Numerical Simulation: a Tool in Turbulence Research*. Annual Review of Fluids Mechanics, 30:539-578, 1998.
- [2] H. Tennekes and J.L. Lumley. *A first Course in Turbulence*. MIT Press. 1997.
- [3] E. Turmo and J. Cuscó. *Modelos de Dispersión de gases y/o vapores en la Atmósfera: Fuentes Puntuales Continuas*. PhD Thesis, Universidad de Zaragoza, España, 1998.
- [4] C. Jiménez. *Modelización de Flujos Reactivos: el Método de la Función de Densidad de Probabilidad en Simulaciones de Grandes Escalas*. [http://www.mtas.es/insht/ntp/ntp\\_329.html](http://www.mtas.es/insht/ntp/ntp_329.html) PhD thesis, Universidad de Zaragoza, España, 1998.
- [5] 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.
- [6] R.Aris. *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*.
- [7] A.Favre. *Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics*. SIAM, 1969.
- [8] W.P. Jones. *Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion*.
- [9] Harlow F.H y Nakayama P.I. *Transport of Turbulence Energy Decay Rate*. LA-3854, Los Alamos Science Lab., U. California, USA. 1968.
- [10] Enciclopedia CHAM. [www.cham.co.uk](http://www.cham.co.uk). 2005.
- [11] S.V. Pantankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Science. Hemisphere Publishing Corporation, January 1980.
- [12] H.H. Ferziger and M. Peric. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag.

- [13] D.B. Spalding. *Mathematical Modeling of FluidDynamics, Heat Transfer and Math Transfer Process*. Technical Report HTS/8011, Imperial College of Science, Technology and Medicine, 1980.
- [14] J.C. Ludwing, H.Q. Qin, and D.B Spalding. *The phoenics reference manual*. Technical Report CHAM TR/200, CHAM Ltd, London, 1989.
- [15] Van Nostrand Reinhold Company. *Industrial Pollution*. New York, 1974.