Asociación Argentina



de Mecánica Computacional

Mecánica Computacional Vol XXXV, págs. 1049-1068 (artículo completo) Martín I. Idiart, Ana E. Scarabino y Mario A. Storti (Eds.) La Plata, 7-10 Noviembre 2017

SIMULACIÓN DE LA EYECCIÓN DE SPRAY LÍQUIDO DESDE UN PICO DE PULVERIZADORA PARA APLICACIÓN DE HERBICIDAS

Carlos G. Sedano^a, Cesar A. Aguirre^{a,b} y Armando B. Brizuela^{a,b}

^aFacultad de Ciencias Agropecuarias, Universidad Nacional de Entre Ríos, Ruta 11 – Km 10 (3101), Oro Verde, Entre Ríos, Argentina, carlosgsedano@gmail.com; cesaraguirredalotto@gmail.com

^bCentro de Investigaciones Científicas y Transferencia de Tecnología a la Producción (CICyTTP – CONICET), Materi y España s/n, E3105BWA, Diamante, Entre Ríos, Argentina, <u>http://www.cicyttp.org.ar</u>

Palabras Clave: Modelos de simulación, Eyección de spray, Herbicidas.

Resumen. El presente trabajo muestra los resultados preliminares de la simulación computacional de la eyección de spray líquido desde un pico de pulverización tipo HARDI™ utilizado comúnmente en las aplicaciones de herbicidas que se realizan en cultivos extensivos de zonas rurales. Primero se realizó la simulación de fluido confinado con el fin de determinar el perfil de velocidad del líquido a la salida del pico de pulverización. Luego se utilizó el código acoplado LES-STO (Simulación de los Grandes Vórtices - Modelo Estocástico Lagrangiano) para simular la trayectoria de las partículas en estado líquido desde el mismo y hasta el suelo en condiciones de aire calmo y suelo plano. En este último código se implementaron algoritmos para la simulación de los diámetros de gotas, sus velocidades y trayectorias, considerándolas como partículas líquidas. Se presenta un algoritmo de eyección aleatoria de gotas de diferentes diámetros cuya función de densidad de probabilidad ajusta a una distribución Weibull con dos parámetros. Éstos son ajustados previamente utilizando datos de mediciones experimentales en laboratorio. Para la simulación de las trayectorias se tuvo en cuenta la presión de salida del líquido, temperatura, propiedades físicas y altura de aplicación. Los procesos micro-físicos de coalescencia-ruptura y evaporación-condensación no son simulados en este trabajo. Se contrastaron los tamaños de gotas simulados con los observados experimentalmente y con los que surgen de la distribución de Weibull con excelentes coeficientes de correlación. Se obtuvieron además las trayectorias de las partículas en las condiciones de medición en laboratorio. Se observa que las velocidades de sedimentación, coeficientes de arrastre y tiempos característicos de relajación de las partículas líquidas simuladas ajustan bien a los datos experimentales. Se confirma además que las partículas líquidas menores a 50 micrómetros alcanzan rápidamente su velocidad de sedimentación antes de llegar al suelo.

1 INTRODUCCION

Según los datos consignados por el Ministerio de Agroindustria y Producción de la Nación en la República Argentina (MAgyP, 2017), durante la campaña 2015-2016 se utilizaron para la siembra un total de *38.999.024 ha*, representando un *14 %* de la superficie continental del territorio. Esta situación, adquiere significación cuando se observa que los límites de las denominadas 'zonas urbanas' y el inicio de las 'zonas rurales' comienzan a desdibujarse producto de proyectos urbanísticos o nuevas dinámicas productivas vinculadas principalmente a la economía, el avance tecnológico o negligencia profesional.

Según los datos aportados por la Cámara de Sanidad Agropecuaria y Fertilizantes de la República Argentina (CASAFE, 2015) dentro de los productos fitosanitarios utilizados en la producción agropecuaria, el herbicida que posee mayor incidencia de uso en el país es el glifosato, en un 65 % de los casos, con destino principal el control de malezas en barbecho, es decir, antes de la siembra del cultivo, en el 41 % de los casos, mientras que las demás aplicaciones se realizan posterior a la siembra. Por otra parte, el Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva de la Nación (MINCyT, 2016) informa que durante el año 2011, se utilizaron casi 250.000.000 lts de glifosato en sus diferentes presentaciones, representando un incremento de uso del 29,5 % con respecto al año inmediato anterior. Además, el Ministerio hace mención que la superficie sembrada en dicho periodo aumentó un 11,2 %, lo que representa un incremento en la aplicación del citado producto de poco más de 1 lts.ha⁻¹.año⁻¹.

Teniendo en cuenta estos datos, es que resulta importante la simulación computacional de los procesos de la deriva de partículas liquidas provocados por la pulverización mediante un equipo de arrastre, a fin de predecir posible alcance del producto pulverizado a lugares no deseados, como zonas de intercambio de biodiversidad, poblaciones rurales, establecimientos agrícola-ganaderos, etc.

En el presente trabajo se utilizaron técnicas de simulación numérica con herramientas computacionales para obtener la dispersión de partículas líquidas eyectadas desde un pico de pulverización. La primera es una herramienta de diseño asistido por computadora (CAD) que permitió simular el flujo del líquido confinado previo a la eyección con el fin de obtener el perfil de velocidad de las partículas líquidas. Posteriormente, se utilizó el código acoplado eulero-lagrangiano de partículas LES-STO (Large-eddy Simulation - Stochastic Lagrangian Model) para simular la trayectoria de dichas partículas en su fase líquida. El código euleriano LES a diferencias finitas original denominado Advanced Regional Prediction Systems (ARPS) desarrollado por el Centro de Análisis y Predicción de tormentas (CAPS) de la Universidad de Oklahoma, (Xue et al., 1995) ha sido adaptado por Aguirre (2005) para la simulación de partículas fluidas con el fin de validarlo con mediciones de concentración de un gas pasivo realizadas en túnel de viento por Fackrell and Robins (1982) en suelo plano y Gong (1991) en presencia de una colina de suave pendiente. Posteriormente, fue utilizado por Aguirre et al. (2006a, b) para obtener una descripción de los fenómenos de dispersión atmosférica, difusión y reacciones químicas de especies en fases gaseosa; Aguirre et al. (2012) para la simulación de la pluma de dispersión de gases en un episodio de emisión de olores desde una planta de fabricación de celulosa ubicada en la República Oriental del Uruguay con viento prevalente del oeste, Aguirre et al. (2013) para una situación de dispersión de olores desde un basural a cielo abierto en la localidad de Paraná, Argentina. Aguirre et al. (2014a) incorpora un acople del modelo LES-STO con el Modelo de Capa Límite Atmosférica de Meso-escala (MCLM) propuesto por Berri (1987) para tener en cuenta las variaciones de la circulación de viento durante un día en la región del Río de la Plata incorporadas como condiciones de borde dinámicas. Orcellet et al. (2016) utiliza este modelo acoplado para representar la dispersión atmosférica de Total de Azufre Reducido (TRS) emanados desde la planta de fabricación de celulosa durante varios días contrastando los resultados de las simulaciones con reportes de olores de autoridades del Programa de Monitoreo Ambiental de la Comisión Administradora Binacional (Argentina-Uruguay). Además, Aguirre *et al.* (2014b) presentan el modelo LES-STO para la dispersión de partículas sólidas de diámetros del orden de las decenas de micrón. Aguirre y Brizuela (2016) contrastan los resultados de este modelo con mediciones de concentración de partículas de metales en cercanías de una planta de fundición en Tucumán (Argentina) que funcionó durante 24 años, realizadas por Fernández-Turiel *et al.* (2001). Otros autores utilizaron este modelo acoplado para dispersión de partículas líquidas (Vinkovic *et al.*, 2006a) y partículas sólidas en movimiento de saltación o suspensión en túnel de viento (Vinkovic *et al.*, 2006b).

En este trabajo, se presenta un algoritmo de eyección aleatoria de gotas de diferentes diámetros cuya función de densidad de probabilidad ajusta a una distribución *Weibull* de dos parámetros. Estos parámetros son ajustados previamente utilizando datos de mediciones experimentales en laboratorio usando un analizador de partículas de fase doppler (PDPA) realizadas por Nuyttens (2007). Luego, se presentan los resultados preliminares de la eyección del producto desde una boquilla pulverizadora HARDITM contrastando los valores de velocidades de partículas líquidas en función del diámetro con mediciones experimentales de laboratorio realizadas por Sidahmed *et al.* (1998); Tuck *et al.*(1997); Holterman (2003) y Nuyttens (2007).

2 MATERIALES Y METODOS

2.1 Simulación de fluido confinado en el tubo de distribución del liquido

Con el objetivo de obtener el perfil de velocidad de las partículas liquidas a la salida de la boquilla, se realizó la simulación del líquido antes de su eyección usando una herramienta CAD que simula el flujo a fluido confinado. Para esto se reprodujo la boquilla HARDITM ISO F 110-O3 y se imprimió utilizando tecnología PolyJet Full Core 720 – transparente, en el *Laboratorio de Prototipado de Electrónica e impresión 3D* de la Facultad de Ingeniera – UNER. Esta impresión 3D se realizó a los fines de comprobar la igualdad morfológica (Figura 1).



Figura 1. Boquilla HARDI™ ISO F 110-O3 utilizada en las experiencias de Nuttynes (2007). Izquierda: Boquilla duplicada (vista isométrica). Centro: Boquilla duplicada (vista en corte). Derecha: Boquilla real (azul) y duplicada (transparente).

Posteriormente, se realizó la simulación a fluido confinado asignando las siguientes condiciones iniciales y de borde: fluido newtoniano (agua), temperatura $20^{\circ}C$, presión interna *3 bar*, presión externa *1,01bar* (*101325 Pa*).

2.2 Simulación de las partículas líquidas eyectadas desde la boquilla

2.2.1 Condiciones iniciales de las posiciones y velocidades

Las condiciones iniciales de la eyección de partículas líquidas fueron asignadas al código de simulación según las especificaciones de la experiencia en laboratorio realizada por Nuttynes (2007):

- La altura de la boquilla fue situada a h=0,75m desde el suelo.

- La sección de salida de las partículas es de forma elíptica. La misma fue ubicada a una distancia Lc=0,023m debajo de la boquilla debido a que a esta distancia se realizaron las mediciones experimentales en laboratorio.

- El ángulo del spray en dirección transversal es de $\alpha = 110^{\circ}$ según las especificaciones técnicas de la boquilla HARDITM.

- El semieje menor de la elipse a la distancia *Lc* debajo de la boquilla (dirección transversal y) tiene un valor de: $dy_0=4, 6.10^{-3} m$.

- El semieje mayor de la elipse (dirección longitudinal x) a la distancia Lc debajo de la boquilla resulta:

$$dx_0 = Lc.tg\left(\frac{\alpha}{2}\right) = 0,0328 m \tag{1}$$

- La componente vertical de la velocidad de salida de las partículas líquidas a la distancia Lc bajo la boquilla es adoptada de la simulación a fluido confinado W_0 .

- La componente horizontal de la velocidad inicial de cada partícula líquida dependerá de la posición inicial de la misma dentro de la elipse:

$$U_0 = \frac{xc}{Lc} W_0,$$

$$V_0 = \frac{yc}{Lc} W_0,$$
(2)

donde (xc, yc) es la posición horizontal de la partícula líquida al instante inicial, relativa al centro de la elipse (Figura 2). Es decir, la componente $U \neq V$ de la velocidad de las partículas al instante inicial de la simulación depende en forma directamente proporcional a la distancia respecto al centro de la elipse A.



Figura 2. Cono de spray correspondiente a la boquilla HARDI™ ISO F 110-O3. Ubicación de la lámina de spray (elipse A) de inicialización de la eyección de partículas líquidas P y zona de intercepción con el suelo (elipse B). Posición inicial de las partículas líquidas eyectadas: *xc*, *yc*, *Lc*.

Velocidad inicial de las partículas líquidas eyectadas: U_0 , W_0 .

Todas las partículas se ubican en a la altura z=h-Lc dentro de la elipse A al instante inicial

de la simulación. Para determinar la posición horizontal inicial (xc, yc) se utiliza un algoritmo de variable aleatoria:

$$\begin{cases} xc = 2.dx_o .(\chi(0) - 0.5), \\ yc = 2.\left(\left(dx_o^2 - xc^2 \right) \left(\frac{dx_o^2}{dy_o^2} \right) \right)^{1/2} .(\chi(0) - 0.5), \end{cases}$$
(3)

donde, $\chi(0)$ es una variable aleatoria uniforme continua en el intervalo [0,1] cuyo valor medio

$$\mu_{\chi(0)} = 0.5$$
 y desvío estándar $\sigma_{\chi(0)} = \frac{\sqrt{3}}{6}$.

2.2.2 Condiciones iniciales de los diámetros de las partículas líquidas

Una de las funciones de ajuste para simular los diámetros de partículas líquidas es la función de distribución Rosin-Rammler (R-R) (Lefebvre, 1980). Ésta es una función acumulada de variable aleatoria continua cuya función de densidad de probabilidad (f.d.p.) se corresponde a una tipo Weibull de dos parámetros. La función de distribución R-R es utilizada por Ayres et al. (2001), Schick (2008), Baetens (2009), Fung (2013) para ajustar datos experimentales de mediciones de diámetros de las gotas en función de la fracción de volumen de líquido pulverizado con el propósito de obtener los parámetros de forma y escala de la f.d.p Weibull. Los datos experimentales requieren mediciones muy precisas de los diámetros de las gotas líquidas. El analizador de partículas de fase doppler (PDPA) cumple los requisitos necesarios y presenta la ventaja de obtener datos pareados de velocidad y diámetro de gotas muy pequeñas que son evectadas de la boquilla de una pulverización. Nuyttens (2007) presenta resultados de las mediciones realizadas en laboratorio con este dispositivo para diferentes presiones de trabajo con una boquilla de tipo HARDI™ ISO F 110-O3, entre otras, en condiciones de aire calmo. Estos resultados permiten encontrar los parámetros de la f.d.p. Weibull para las condiciones iniciales de diámetro de gotas evectadas. En este trabajo se realizará el ajuste de la f.d.p. Weibull siguiendo la metodología presentada por Macías-García et al. (2004) para las mediciones de diámetros de gotas que son eyectadas con una presión interna de 3 bar.

Si la variable aleatoria ϕ_0 representa el diámetro inicial de las partículas líquidas, la función de distribución R-R, $F(\phi_0)$ se expresa como:

$$F(\phi_0) = I - exp\left[-\left(\frac{\phi_0}{k}\right)^m\right],\tag{4}$$

donde los parámetros m y k representan respectivamente el parámetro de forma y de escala de la distribución R-R. Ambos parámetros son ajustados a partir de mediciones experimentales. La expresión (4) puede ser escrita como:

$$\ln\{-\ln[1 - F(\phi_0)]\} = m \cdot \ln(\phi_0) - m \cdot \ln(k).$$
(5)

Si asociamos la expresión (5) a una ecuación lineal de primer orden donde la variable dependiente es $ln\{-ln[I-F(\phi_0)]\}$ y la variable independiente es $ln(\phi_0)$ entonces, la pendiente es el parámetro *m* y la ordenada al origen es el término b=-m.ln(k).

El método de ajuste a la f.d.p. *Weibull* consiste en graficar a escala logarítmica los resultados de las mediciones experimentales $ln\{-ln[1-F(\phi_0)]\}$ vs $ln(\phi_0)$ y aproximar la nube de puntos a una recta de regresión lineal por el método de mínimos cuadrados para obtener la pendiente (parámetro de forma) m y la ordenada al origen b. A partir de ambos se obtiene el

parámetro de escala k:

$$k = \exp\left(-\frac{b}{m}\right) \tag{6}$$

Con estos dos parámetros (m, k) es posible obtener la f.d.p *Weibull* que describe la distribución de diámetros de gotas del experimento:

$$\begin{cases} f(\phi_0) = \frac{m}{k^m} \phi_0^{m-1} . \exp\left[-\left(\frac{\phi_0}{k}\right)^m\right] , & \phi_0 \ge 0, \\ f(\phi_0) = 0 & , & \phi_0 < 0. \end{cases}$$
(7)

2.2.3 Aleatorización inicial de los diámetros

Si bien la expresión (7) describe la f.d.p. de la distribución de diámetros de gotas del experimento de medición a nivel Lc, es necesario realizar una secuencia temporal de la simulación de estos diámetros. En este trabajo se propone un algoritmo de aleatorización basado en la función de variable aleatoria $\chi(0)$ ya utilizada para la ubicación de las gotas en la elipse A (Figura 2). El algoritmo de aleatorización debe permitir asignar los diámetros a cada gota eyectada de forma tal que las medidas de tendencia central y de dispersión de la f.d.p. del conjunto de gotas simuladas en un largo período de tiempo sean próximas a los correspondientes a la f.d.p. *Weibull* (7).

Utilizando el teorema del límite central para un conjunto de valores correspondientes a la variable aleatoria $\chi(0)$, de valor medio $\mu_{\chi(0)} = 0.5$ y desvío estándar $\sigma_{\chi(0)} = \frac{\sqrt{3}}{6}$, puede obtenerse una variable aleatoria normalizada Z de valor medio $\overline{Z} = 0$ y desvío estándar $\sigma_{Z} = 1$.

$$Z = \frac{\overline{\chi(0)} - \mu_{\chi(0)}}{\sigma_{\chi(0)} / \sqrt{n}},\tag{8}$$

donde *n* es el tamaño de la muestra. Michelot (1996) realizó varias pruebas de ajuste con diferentes valores de *n* utilizando un millón de partículas para encontrar un número aceptable desde el punto de vista de los tiempos de cálculo. El autor concluye que n=50 es suficiente para obtener la variable aleatoria normal estándar a partir de la generación de números aleatorios con la variable $\chi(0)$.

Con este método es posible simular diámetros de partículas líquidas que respondan a la distribución normal a partir de la generación de números aleatorios.

$$\phi_0 = \phi_0 + \sigma_{\phi}.Z,\tag{9}$$

donde $\overline{\phi_0}$ y σ_{ϕ} son respectivamente el valor medio y el desvío estándar de la f.d.p. *Weibull* (7) cuyas expresiones son:

$$\begin{cases} \overline{\phi_0} = k \cdot \Gamma\left(1 + \frac{1}{m}\right), \\ \sigma_{\phi} = k \cdot \left\{\Gamma\left(1 + \frac{2}{m}\right) - \left[\Gamma\left(1 + \frac{1}{m}\right)\right]^2\right\}^{\frac{1}{2}}. \end{cases}$$
(10)

Sin embargo, en (9) no se está considerando la asimetría propia de la f.d.p. Weibull. Para

ello es necesario incorporar la moda (Mo) de la f.d.p. Weibull cuya expresión es:

$$Mo = k \left(\frac{m-1}{m}\right)^{1/m}.$$
(11)

Incorporando este valor a en (9), la variable aleatoria ϕ que simula los diámetros de las partículas líquidas puede escribirse como:

$$\begin{cases} \phi_0 = Mo + \sigma_{\phi}.Z &, \ \overline{\phi_0} = Mo, \ \text{Simétrica f.d.p. Normal,} \\ \phi_0 = Mo + \sigma_{\phi}.Z.\exp\left(\frac{Z}{2(\overline{\phi_0} - Mo)}\right) &, \ \overline{\phi_0} \neq Mo, \ \text{Asimétrica f.d.p. Weibull.} \end{cases}$$
(12)

Las ecuaciones (2), (3) y (12) permiten simular las condiciones iniciales de velocidades, posiciones y diámetros de las partículas líquidas eyectadas de la boquilla HARDITM ISO F110-O3 a *3 bar* de presión de trabajo.

2.2.4 Parámetros característicos de las partículas líquidas

En este trabajo se presentan los algoritmos para incorporar la posibilidad de simular partículas líquidas de diferentes dimensiones y densidades, eyectadas desde una boquilla pulverizadora. El modelo presenta un acople bi-direccional, es decir, la intensidad turbulenta del fluido que transporta las partículas líquidas es tenido en cuenta en la simulación de sus trayectorias y viceversa, la presencia de las partículas líquidas transportadas son tenidas en cuenta en la ecuación de balance de la cantidad de movimiento del flujo de aire portador de las mismas.

En esta simulación, las partículas líquidas son eyectadas desde la elipse A, ya que, según las mediciones de Nuyttens (2007), es la región de desprendimiento de las mismas desde el abanico de la película líquida. Se considera además que las mismas poseen una forma esférica constante en su trayectoria. En este trabajo no se simulan los procesos de evaporacióncondensación, como así tampoco la dinámica cinética que involucra la interacción entre las partículas (rebote, ruptura y coalescencia). Asumiendo estas simplificaciones, la fuerza por unidad de masa F_i de una partícula líquida en la dirección i=1,2,3 (x,y,z) del sistema de coordenadas cartesianas donde x es la dirección del semieje mayor de las elipses A y B, y es la dirección transversal y z es la dirección vertical (Figura 2) depende sólo de la viscosidad y la gravedad:

$$F_{i} = \underbrace{\frac{U_{i} - V_{i}}{\tau_{s}}}_{\text{Fuerza de Viscosidad}} - \underbrace{\underline{g_{i}\delta_{i3}}}_{\text{Fuerza de Gravedad}}.$$
(13)

Siendo τ_s el tiempo de relajación de la partícula liquida (Holterman, 2003):

$$\tau_s = \frac{4}{3} \frac{\phi}{C_D} \frac{\rho_l}{\rho} \frac{l}{|U_i - V_i|}.$$
(14)

En (14) τ_s representa el tiempo necesario para que la partícula líquida alcance la velocidad de caída libre o velocidad de sedimentación V_s , V_i representa la velocidad de la partícula líquida y U_i representa la velocidad del aire en la posición de la misma. C_D es el coeficiente de arrastre dinámico debido a la fricción del aire sobre la partícula, ρ_l es la densidad de la partícula líquida y ρ es la densidad del aire. Es importante destacar que, si se incrementa la presión de trabajo y consecuentemente la diferencia de velocidad entre la

partícula y el flujo, o se disminuye el diámetro de la gota, el tiempo de relajación también se reducirá.

Como la partícula líquida se considera esférica, el coeficiente de arrastre C_D depende del diámetro de la partícula ϕ y de la viscosidad del fluido, lo cual es utilizado para el cálculo del número de Reynolds referido a la partícula líquida $\Re e_l$:

$$\Re e_l = \phi \frac{|U_i - V_i|}{v},\tag{15}$$

siendo ν la viscosidad dinámica del fluido que transporta las gotas.

A fin determinar la velocidad de sedimentación, se considera que un flujo se encuentra en régimen de *Stokes* cuando $\Re e_l < 0.25$ y flujo turbulento cuando $\Re e_l \ge 0.25$, por lo que el coeficiente de arrastre es calculado por medio del siguiente sistema, de acuerdo a lo descripto por Holterman (2003):

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{\Re e_l} \left(l + 0.15 \Re e_l^{0.687} \right) & \text{si} & \Re e_l \ge 0.25, \\ \frac{24}{\Re e_l} & \text{si} & \Re e_l < 0.25, \end{cases}$$
(16)

siendo la fuerza de arrastre, la suma de las fuerzas aerodinámicas que se oponen al movimiento de la partícula en sentido del flujo, la cual, para flujo en régimen turbulento se define como (Sidahmed, 1998):

$$F_{D} = \frac{l}{2} \rho C_{D} A_{l} |U_{i} - V_{i}|^{2}, \qquad (17)$$

siendo A_l el área proyectada de la partícula en dirección normal al flujo de aire.

Una vez que la partícula supero el tiempo de relajación τ_s , la misma continúa su trayectoria con una velocidad de sedimentación V_s , la cual se encuentra influenciada en forma directamente proporcional a la raíz cuadrada del diámetro de la partícula, Nuyttens (2007):

$$V_s = \left(\frac{4}{3} \frac{\rho_l g \phi}{\rho C_D}\right)^{\frac{1}{2}}.$$
 (18)

Finalmente, la distancia recorrida por una gota hasta alcanzar su velocidad de sedimentación z_s depende de las características físicas de la misma y del flujo de aire que la transporta. Holterman (2003) presenta la solución de la ecuación diferencial para la velocidad para calcular esta distancia:

$$z_s = W_0 \tau_s \,. \tag{19}$$

2.2.5 Ecuaciones para la simulación de la trayectoria de las partículas líquidas

Las ecuaciones de gobierno de las trayectorias de las partículas líquidas responden a un modelo *estocástico lagrangiano* a *'una partícula y una escala de tiempo'* siguiendo la ecuación clásica de *Langevin* con un término determinista y un término aleatorio:

$$\frac{dU_i}{dt} = \underbrace{h_{ij}(U_j, t)}_{\text{determinista}} + \underbrace{q_{ij}(U_j, t)\eta_j(t)}_{\text{aleatorio}},$$
(20)

características de la turbulencia del flujo en cada instante y en cada posición de la simulación. Esta condición requiere un acople de las ecuaciones que resuelven los grandes vórtices. η_j denota la característica aleatoria del término debido a que la misma es una variable aleatoria de media cero y covarianza:

donde U_i denota la velocidad de una partícula de aire en la posición de la partícula líquida que transporta. Los parámetros h_{ij} y q_{ij} son determinados dinámicamente en función de las

$$\langle \eta_i(t')\eta_i(t'')\rangle = \delta_{ii}\delta(t'-t''). \tag{21}$$

Por tanto, es necesario simular la velocidad de la partícula de aire que transporta la partícula líquida. Para esto, el método de simulación de los grandes vórtices descompone la misma en una componente resuelta u_i^{\oplus} por las ecuaciones de balance y una fluctuación u_i^- :

$$U_{i}(x_{i},t) = u_{i}^{\oplus}(x_{i},t) + u_{i}^{-}(x_{i},t).$$
(22)

Aguirre y Brizuela (2016) muestran que el acople entre la simulación de los grandes vórtices y la ecuación de *Langevin* (20) permite encontrar las expresiones de los términos determinista y aleatorio a partir de la ecuación de transporte de la f.d.p filtrada para la velocidad o ecuación de *Fokker-Plank*:

$$\begin{cases} h_{ij}(U_j,t) = \frac{du_j^{\oplus}}{dt} + \alpha_{ij}u_j^{-}, \\ q_{ij}(U_j,t) = \sqrt{C_0\varepsilon} \,\delta_{ij}. \end{cases}$$
(23)

Las derivadas materiales de la componente filtrada de la velocidad del flujo de aire y de la disipación molecular de energía ε son calculadas usando el código ARPS en cada posición y en cada paso de tiempo de la simulación. $C_0=2,1$ es la *constante de Kolmogorov*. Por tanto, sólo resta considerar el parámetro α_{ij} . Para turbulencia inhomogénea y anisotrópica, Aguirre y Brizuela (2016) proponen la expresión:

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{2K^-} \frac{dK^-}{dt} \delta_{ij} - \left(\frac{3}{4}C_0\right) \frac{\varepsilon}{K^-} \delta_{ij} + \left(\frac{R_{ij}}{2K^-} - \frac{\delta_{ij}}{3}\right) \frac{\varepsilon}{K^-},\tag{24}$$

donde K^{\neg} es la energía cinética turbulenta de sub-malla.

En el segundo miembro de la primera ecuación de (23) se observa la componente de velocidad no resuelta u_i^- . Ésta es obtenida en forma discreta usando las *cadenas de Markov:*

$$\bar{u_{j(n)}} = \bar{u_{j(n-1)}} + \alpha_{ij(n)}\bar{u_{j(n-1)}}\Delta t + \sqrt{C_0} \mathcal{E}\Delta t \ \chi_{(n)},$$
(25)

donde el subíndice (n) denota el valor de la variable en el instante de tiempo de la simulación mientras que (n-1) es el valor de la variable en el paso de tiempo anterior. Para el primer instante de tiempo de la simulación se considera turbulencia homogénea isotrópica (Pope, 1994):

$$u_{j(0)}^{-} = \sqrt{\frac{2}{3}K_{(0)}^{-}} \chi_{(0)}.$$
(26)

Con las ecuaciones (22), (23), (24), (25) y (26) es posible calcular la velocidad del aire a la posición de la partícula líquida. Las ecuaciones que describen el movimiento de la partícula líquida en su forma discreta son:

$$\begin{cases} V_{i(n+1)} = V_{i(n)} + \frac{\Delta t}{\tau_s} \left(U_{i(n)} - V_{i(n)} \right) - g_i \Delta t \delta_{i3}, & \text{si} \quad \tau_s > \Delta t, \\ V_{i(n+1)} = U_{i(n)} - V_s \delta_{i3}, & \text{si} \quad \tau_s \leq \Delta t, \end{cases}$$

$$\begin{cases} X_{i(n+1)} = \frac{V_{i(n+1)} - V_{i(n)}}{2} \Delta t. \end{cases}$$

$$(27)$$

Es necesario hacer notar que en la primera de las ecuaciones (27) la relación $\Delta t/\tau_s$ debe ser mayor que la unidad para que la solución numérica sea convergente. Para los casos en los cuales las partículas líquidas son muy pequeñas, se debe utilizar la segunda de las ecuaciones (27) considerando que se ha llegado a la velocidad de sedimentación V_s antes de que haya ocurrido un paso de tiempo Δt . Por tal motivo, el paso de tiempo de la simulación Δt debe ser elegido de manera tal que sea menor al tiempo de relajación de la partícula líquida más pequeña posible. Según las mediciones experimentales de Nuyttens (2007) las partículas líquidas cuyos diámetros son menores a 50 µm quedan expuestas a deriva antes de llegar al suelo. Estas partículas poseen tiempos de relajación menores a 0,0076 s. Por tal motivo, se ha elegido para este trabajo un paso de tiempo $\Delta t = 0,002$ s con lo cual, se están considerando partículas líquidas cuyos diámetros son menores a 25 µm.

3. RESULTADO Y DISCUSION

3.1 Simulación de fluidos confinado

Los valores de velocidad de partículas líquidas simulados con la herramienta CAD que se obtuvieron a la salida de la boquilla pulverizadora se muestra en la Figura 3.

La velocidad máxima obtenida en el eje de simetría del tubo fue 20 m.s⁻¹, la velocidad media del perfil fue de $14,142 \text{ m.s}^{-1}$ y la velocidad *bulk* de $16,356 \text{ m.s}^{-1}$ (Figura 4). Estos valores son muy cercanos a los obtenidos experimentalmente por Tuck et al. (1997), Sidahmed *et al.* (1999), Sidahmed and Brown (2001).



Figura 3: Simulación CAD de fluido confinado antes de la eyección. Izquierda: Vista 3D del campo de velocidades. Derecha: Vista lateral (perfil) de velocidades.



Figura 4: Evolución temporal de la velocidad del flujo de fluido confinado antes de la eyección.
Velocidad máxima del perfil (eje del tubo).
Velocidad *bulk*.
Velocidad media del perfil.

3.2 Simulación Computacional de la eyección de las partículas liquidas

3.2.1 Ajuste de los parámetros de la f.d.p. Weibull

A fin de obtener la función de densidad de probabilidad (f.d.p. *Weibull*), correspondiente a los diámetros de las gotas, de acuerdo a lo descripto en la **sección 2.2.2**, se obtuvieron los parámetros de forma m y de escala k a partir de la función de distribución R-R

k=301,2281884 y m=2,605878982, logrando un ajuste de $R^2=0.9909$ para un diámetro medio de 267,67 μ m y una desviación estándar de 110,32 μ m (Figura 5).



Figura 5: Ajuste de los datos experimentales de diámetro de partículas obtenidos por Nuyttens (2007) a una función de distribución *Rosin-Rammler*.

Las Figuras 6 y 7 muestran la distribución de diámetros de partículas líquidas en función del volumen, simuladas en este trabajo, ajustadas a una f.d.p Weibull y obtenidas a partir de mediciones experimentales realizadas por Nuyttens (2007). Se observa que el modelo de simulación aleatorizado de eyección descripto en la **sección 2.2.3** ajusta bien con los datos experimentales.



Figura 6: Distribución de diámetros de partículas (µm) con respecto a la fracción de volumen (fr)

Función de densidad de probabilidad de Weibull con dos parámetros.

Simulados en este trabajo.



Mediciones experimentales realizadas por Nuyttens (2007).



3.2.2 Simulación computacional de la trayectoria de las partículas líquidas

Considerando las ecuaciones descriptas precedentemente en las secciones 2.2.4 y 2.2.5, y teniendo en cuenta el perfil de velocidad obtenido en la sección 3.1, se obtuvieron las trayectorias de las partículas líquidas en condiciones de viento calmo, sobre suelo plano y a temperatura del aire constante e igual a $20^{\circ}C$, eyectadas desde la boquilla a una altura de 0,75 m del suelo, apertura del abanico de 110° . La corrida del modelo acoplado se realizó para 20 segundos físicos de simulación lanzando $1x10^{6}$ partículas líquidas con un paso de tiempo de $\Delta t=0,002$ s (a razón de 100 partículas por paso de tiempo). La Figura 8 muestra un instante de la simulación donde se observa que el abanico de partículas sobre el suelo posee un semieje mayor de 2,14 m acorde a lo encontrado por Nuyttnes (2007) experimentalmente.





En las Figuras 9, 10, 11 y 12 se puede observar el tiempo de sedimentación y la velocidad de sedimentación obtenida por Holterman (2003) en relación con los valores obtenidos en al presente simulación.



Figura 9: Tiempos de sedimentación (ms) según Holterman (2003) y simulados en este trabajo en función de los diámetros de gotas (μm)



Figura 10: Tiempos de Sedimentación (ms) según Holterman (2003) vs simulados en este trabajo.

De igual manera, una vez que la partícula alcanzó su velocidad de sedimentación, la misma deja de tener el efecto de la inercia por lo cual es independientemente de las condiciones iniciales y su velocidad depende de la gravedad y la fuerza de arrastre.



Figura 11: Velocidad de Sedimentación (m/s) en función del diámetro (µm) según Holterman (2003) y simulados en este trabajo.



Figura 12: Velocidad de Sedimentación (m/s) según Holterman (2003) vs simulados en este trabajo.

Por otra parte, se observó que las componentes verticales de las velocidades de las primeras 13.900 partículas evaluadas a 0,35 m del pico eyector poseen un ajuste de $R^2=0,9293$ comparado con los datos publicados por Tuck *et al.* (1997). En la Figura 13 se muestran estas velocidades.



Figura 13: Distribución de velocidades de gotas en (m/s) en función del diámetros (µm) obtenidas a 0,35 m debajo del pico de eyección.

Simulación
 Mediciones de Tuck *et al.* (1997).

Analizando la diferencia de las componentes verticales de velocidad entre las mediciones de laboratorio realizadas por Tuck *et al.* (1997) y las simulaciones se observa particularmente que las gotas que rondan los $100 \ \mu m$ de diámetro alcanzaron la velocidad de sedimentación a la altura en la que se realiza la medición, motivo por el cual de acuerdo a lo descripto por la citada autora, la medición del laboratorio se corresponde a la medición del flujo que transporta las gotas y no a la velocidad de la propia de la misma. En el modelo de simulación no se tienen en cuenta los fenómenos de coalescencia por lo que las gotas simuladas

mantienen en todo el trayecto sus dimensiones originales.

Para diámetros mayores a los $100 \ \mu m$ se observa una sobreestimación de la velocidad de caída de las gotas. Estas diferencias también pueden deberse a que no se está modelando la interacción entre ellas.

Diámetro (µm)	Distancia recorrida hasta alcanzar la velocidad de sedimentación (m)	Diámetro (µm)	Distancia recorrida hasta alcanzar la velocidad de sedimentación (m)
10	0,00497	110	0,48696
20	0,02010	115	0,52374
30	0,04514	140	0,71208
40	0,08051	145	0,75081
50	0,12438	150	0,79012
60	0,16910	200	1,18410
70	0,22388	250	1,57709
75	0,25282	300	1,96055
80	0,28379	400	2,69476
90	0,34834	500	3,39193
100	0,41619	713	4,76287

Tabla 1: Simulación de distancia recorrida en dirección vertical hasta la velocidad de sedimentación.

En la Tabla 1 se observan las distancias recorridas por las gotas hasta alcanzar su velocidad de sedimentación en función de los diámetros usando la ecuación (19). Es importante destacar que, colocando los picos de la pulverizadora a una altura de 0,75 m sobre suelo desnudo, como se puede apreciar en la Tabla 1, las partículas menores a $145 \mu m$ aún se encuentran en el aire cuando alcanzan la velocidad de sedimentación, representando un volumen acumulado de aproximadamente el 15% del total de la aplicación. De igual manera, si los picos se colocan a una altura de 0,5 m las partículas de hasta $110 \mu m$ alcanzan la velocidad de sedimentación antes de llegar al destino, representando un volumen acumulado del 7 % del volumen total de la aplicación, siendo estas gotas las que se encuentran con mayor propensión a la deriva.

Por otra parte, al cotejar las instrucciones de uso del herbicida Glifosato marca RoundupTM, cuya inscripción en el Servicio Nacional de Sanidad y Calidad Agroalimentaria de la República Argentina (SENASA) se encuentra identificado bajo el N° 31.098, para las aplicaciones terrestres, las partículas deben tener un diámetro dentro del rango de 300 μm a 500 μm , lo que en este caso aseguraría que dichas partículas lleguen al destino antes de alcanzar la velocidad de sedimentación. No obstante, en el presente trabajo y según las determinaciones de Nuyttens (2007), esto representa solo el 38,8% del total del volumen aplicado según puede observarse en la Figura 14.



- Figura 14: Distribución de diámetros de las gotas (mm) con respecto al volumen aplicado indicado en la Etiqueta del Glifosato Marca RoundupTM.
 - Simulado con diámetros entre 300 μm y 500 μm según indicaciones de RoundupTM.
 - Simulado con diámetros menores a 300 μm y mayores a 500 μm.
 - _____ f.d.p Weibull.
 - Mediciones experimentales de Nuyttens (2007).

4 CONCLUSIONES

En el presente trabajo, se pudo simular y validar la velocidad de eyección de las partículas liquidas utilizando una herramienta CAD para la replicación de la boquilla HARDITM ISO F110-03. Con la determinación de la velocidad, se procedió a realizar la aleatorización de los diámetros de las gotas con respecto al volumen aplicado siguiendo un procedimiento de ajuste de los parámetros a una distribución *Rosin-Rammler* que derivó en una función de densidad de probabilidad *Weibull* de dos parámetros, obteniendo un coeficiente de correlación $R^2=0.9909$.

Posteriormente, con la simulación de la eyección de las gotas, se pudo validar que tanto el tiempo de sedimentación como así también la velocidad de sedimentación de las gotas eyectadas obteniendo un ajuste con respecto a los valores publicados de $R^2=0,9997$. Asimismo, se validó la simulación de la componente vertical de la velocidad de las gotas, con un coeficiente de correlación $R^2=0,9293$ con respecto a los datos de laboratorio.

Ello permitió determinar el diámetro máximo, y consecuentemente el porcentaje de volumen aplicado, que se encuentra susceptible de deriva en la aplicación de herbicidas con este tipo de boquilla y utilizando una presión de *3 bar* de eyección del spray líquido, teniendo en cuenta la altura de los picos. Esta misma comparación se realizó con respecto a una marca comercial de glifosato, demostrando que, con los diámetros que indica su etiqueta, las gotas no alcanzan su velocidad de sedimentación antes de llegar a la zona de impacto. Sin embargo, los diámetros indicados en la etiqueta solo representan el *38,8%* del total del volumen de la aplicación.

AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo, se encuentra financiado a través del Proyecto PIO CONICET-UNER 2015-2016. También se agradece al *Laboratorio de Prototipado de Electrónica e Impresión 3D* de la Facultad de Ingeniera – UNER, por el trabajo de impresión de la boquilla.

REFERENCES

- Aguirre C. A. Dispersión et Mélange Atmosphérique Euléro-Lagrangien de Particules Fluides Réactives. Application à des cas simples et complexes. *Thèse de doctorat. Université Claude Bernard Lyon 1, France.* **115-2005**, 323 pp. 2005.
- Aguirre C. A., Brizuela A. B., Vinkovic I. and Simoëns S. A sub-grid Lagrangian stochastic model for turbulent passive and reactive scalar dispersion. *International Journal of Heat and Fluid Flow. Ed. Elsevier Science.* **27** (4), pp: 627-635. 2006a.
- Aguirre C. A., Brizuela A. B., Vinkovic I. y Simoëns S. Modelo acoplado Eulero-Lagrangiano de simulación de la dispersión atmosférica de especies químicamente reactivas en la capa límite. *Serie Mecánica Computacional* **Vol XXV**, pp: 185-205. 2006b.
- Aguirre C. A., Brizuela A. B., Berri G. J. y Orcellet E. E. Dispersión de gases emanados desde la fábrica Botnia utilizando un modelo de simulación de las grandes escalas acoplado a un modelo estocástico lagrangiano. *II Congreso Latinoamericano de Ingeniería del Viento (CLIV2)*. 5 al 7 de diciembre de 2012, La Plata, Argentina. 2012. doi: 10.13140/2.1.3596.1283.

URL: http://www.cliv2.ing.unlp.edu.ar/public/actas%20congreso/18.Aguirre.CLIV2.pdf

- Aguirre C. A. Brizuela A. B. y Hildt L. E. Computational tools for the simulation of atmospheric pollution events. *Ed. Scientia Interfluvius*. **4** (1-2). *Ed: Universidad Autónoma de Entre Ríos*. ISSN on line: 1853-4430. ISSN printed: 1853-4422, pp: 7-29. 2013. URL: http://www.youblisher.com/p/948280-Scientia-Interfluvius-Vol-4-1-2-2013
- Aguirre C. A., Berri G. J., Brizuela A. B and Orcellet E. E. External Weather Data Assimilation to Simulate Wind and Temperature Fields in the Region of Gualeguaychú, Argentina. *Journal of Mechanics Engineering and Automation*. 4. *Ed: David Publishing Company*. Print ISSN 2159-5275; Online ISSN 2159-5283, USA, pp: 887 – 899. 2014a. URL: http://www.davidpublisher.org/Public/uploads/Contribute/5509138ac37fd.pdf
- Aguirre C. A., Aceñolaza P. G., Brizuela A. B. y Sedano C. G. Simulación Computacional de la Dispersión de Partículas Sólidas en la Atmósfera utilizando un Modelo Acoplado. *Revista Científica de Mecánica Computacional.* XXXIII (52). *Ed: Asociación Argentina de Mecánica Computacional AMCA*. ISSN 1666-6070, pp: 3431 – 3453. 2014b. URL: http://www.cimec.org.ar/ojs/index.php/mc/article/view/4928/4857
- Aguirre C. A. and Brizuela A. B. Computational Tools for the Simulation of Atmospheric Pollution Transport During a Severe Wind Event in Argentine. *Atmospheric Hazards*. Chapter 6 *INTECH Open Science, Open Minds. Ed. Jill Coleman.* ISBN: 978-953-51-4680-3, pp: 111-136. 2016.

URL: http://www.intechopen.com/books/atmospheric-hazards-case-studies-in-modeling-communication-and-societal-impacts

- Ayres D., Caldas M., Semião V., da Graça Carvalho M. Prediction of the droplet size and velocity joint distribution for sprays. J. Fuel 80. Ed. Elsevier Science. ISBN: 0016-2361, pp: 383-394. 2001.
- Baetens K. Develepment and application of driftpredictionmodels in fieldspraying. *Doctoral Thesis. Faculteit Bio-ingenieurs wetenschappen, Katholieke Universiteit Leuven.* 2009.

- Berri G. J. Estudio del comportamiento termo-hidrodinámico de la capa limite atmosférica sobre la región del Río de La Plata con un modelo de simulación numérica. *Tesis doctoral, Departamento de Ciencias de la Atmósfera y los Océanos, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires.* 189 p. 1987.
- Cámara de Sanidad Agropecuaria y Fertilizantes de la República Argentina (CASAFE). Guía de Productor Fitosanitarios para la República Argentina: Edición 2015-2017, productos A-Z. ISBN: 978-987-15-6308-1, 1200 pp. 2015.
- Fernandez-Turiel J. L., Aceñolaza P., Medina M. E., Llorenz J. F. and Sardi F. Assessment of a smelter impact area using surface soils and plants. *Environmental Geochemistry and Health*, **23**, pp: 65 78, 2001.
- Fackrell J. E. and Robins A. G. Concentration Fluctuation and Fluxes in Plumes from Point Sources in a Turbulent Boundary Layers. *Journal of Fluid Mechanics*. **117**, pp: 1-26, 1982.
- Fung M. C. Experimental and numerical study of spray characteristics of nasal spray device. Doctoral Thesis. School of Aerospace, Mechanical and Manufacturing Engineering Science, Engineering and Technology Portfolio RMIT University. 179 pp. 2013.
- Gong W. A Wind Tunnel Study of Turbulent Dispersion over two and three- dimensional Gentle Hills from Upwind Point Sources in Neutral Flow. *Boundary Layers Meteorology*, 54, pp: 211-230. 1991.
- Monsanto, Herbicida RoundupTM, Registro SENASA Nº 31.098.
- ULR: http://www.monsantoglobal.com/global/ar/productos/documents/roundup.pdf. 2017.
- Holterman H. J. Kinectic and evaporation of waterdrops in air. *Wageningen: IMAG. Report* 2003-12/Wageningen UR, InstituutvoorvMilieu en Agritechniek; ISBN 90-5406-234-7. 2003.
- Lefebvre A. H. Atomiz Spray. Tech. pp: 3-37. 1987.
- Macías-García A., Cuerda-Correa E. M. and Díaz-Díez M. A. Application of the Rossin-Rammler and Gates-Gaudin-Schuhmann models to the particle size analysis of agglomerated cork. *Material Characterization*, **52**, *Ed. Elsevier Inc.*,pp: 159-164. 2004. doi:10.1016/j.matchar.2004.04.007.
- Michelot C. Développementd'unmodèlestochastiquelagrangien. Application à la dispersion et à la chimie de l'atmosphère. *Thèse de doctorat. Université Claude Bernard Lyon 1, France.* **110-1996**, 170 pp, 1996.
- Ministerio de Agroindustria y Producción de la Nación. (MAgyP). Producción y Estimaciones. https://datos.magyp.gob.ar/reportes.php?reporte=Estimaciones, 2017.
- Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva de la Nación (MINCyT). Análisis Tecnológicos y Prospectivos Sectoriales Insumos para el agro. 2016.
- Nuyttens D. Drift from field crops prayers: The influence of spray application technology determined using indirect and direct drift assessment means. *Doctoral Thesis. FaculteitBio-ingenieurs wetenschappen, Katholieke Universiteit Leuven.* ISBN 978-90-8826-039-1. 2007.
- Orcellet E. E., Berri G. J., Aguirre C. A. and Müller G. V. Atmospheric dispersion study of TRS compound semitted from a pulp mill plant in coastal regions of the Uruguay River, South America. *Aerosol and Air Quality Research*, **16**. *Ed. Taiwan Association for Aerosol Research*. ISSN: 1680-8584 print / 2071-1409 online. 2016. doi: 10.4209/aaqr.2015.02.0112. Taiwan, pp: 1473 – 1482.

URL: http://www.aaqr.org/article/detail/AAQR-15-02-OA-0112

- Pope S. B. Lagrangian PDF Methods for Turbulent Flow. Ann. Rev Fluid Mech, 26, pp: 23-63, 1994.
- Schick R. J. Spray Technology Reference Guide: Understanding drop size. *Spraying System Co.* **Bulletin No. 459 C**, USA, pp:1 36. 2008.

- Sidahmed M. M. Analytical comparison of force and energy balance methods for characterizing sprays from hydraulic nozzles. *Transactions of the ASAE*, **41(3)**, pp: 531-536. 1998.
- Sidahmed M., Brown R. B. and Darvishvand M.. Drop-size/velocity correlations at formation of sprays from fan nozzles. *Transactions of the ASAE*, **42** (1), pp: 1557-1564. 1999.
- Sidahmed M. M. and Brown R. B. Simulation of spray dispersal and deposition from a forestry air blast sprayer part I: Air jet model. *Transactions of the ASAE*, **44(1)**, pp: 5-10, 2001.
- Tuck C. R., Butler Ellis M. C. and Miller P. C. H. Techniques for measurement of droplet size and velocity distributions in agricultural sprays. *Crop Prediction*. **16** (7), pp: 619-629. 1997.
- Vinkovic I., Aguirre C. A., Simoëns S. and Gorokhovski M. Large-Eddy Simulation of Droplet Dispersion for Inhomogeneous turbulent Wall flow. *International Journal of Multiphase Flow.* 32, pp: 344-364. 2006a.
- Vinkovic I., Aguirre C. A., Ayrault M. and Simoëns S. Large-Eddy Simulation of the Dispersion of Solid Particles in a Turbulent Boundary Layers. *Boundary-Layer Meteorology. Srpinger*, pp: 1-29. 2006b.
- Xue M., Droegemeier K. K. and Wong V. The Advanced Regional Prediction System and Real-time Storm Weather Prediction. *International Workshop on Limited-area and Variable Resolution Models. Beijing, China. Word Meteorology Organization.* 1995.