# 

# Análisis de consecuencias: escape de sustancias peligrosas

«... El aire mismo que respiráis vendrá de las profundidades infernales. Será nauseabundo y venenoso, y vuestros rostros perderán por ello los colores de la vida. ¡Huid, Huid, imprudentes!»

Del vaticinio del adivino, a las gentes del pueblo de Asterix, *El adivino*, R. Goscinny y A. Uderzo.

### Introducción

En el capítulo anterior se han revisado los métodos de estimación de consecuencias de incendios y explosiones. En todos los casos se requiere conocer las características del escenario en el que tiene lugar el accidente. Así, por ejemplo, necesitamos conocer la cantidad de vapor inflamable en una nube para poder estimar los efectos de la explosión que tiene lugar como consecuencia de su ignición. Por otro lado, si lo que se produce es la fuga de una sustancia tóxica, es necesario estimar el mapa concentración-distancia-tiempo, antes de poder determinar la vulnerabilidad de las personas expuestas. En este capítulo nos ocuparemos en una primera etapa de los modelos que se utilizan para estimar los valores de parámetros relevantes en la descarga de sustancias peligrosas (tales como caudales, concentraciones, cantidad total descargada, etc.), cuyo conocimiento es necesario para aplicar los modelos de efectos.

Siguiendo con el ejemplo de la explosión de una nube de vapor inflamable (EVNC), en la figura 4.1 se esquematizan las etapas del proceso de cálculo para la estimación de sus efectos:

*i*) Si, como se supone en la figura, la nube se forma a partir de la evaporación de líquido, que a su vez procede de un derrame accidental, se requiere en primer lugar la estimación de la magnitud de la fuga de líquido (*source strength*). Dada la altura de líquido sobre el nivel del orificio, la presión en el espacio de vapor del depósito y las características



Figura 4.1. Esquema de cálculo para estimar los efectos de la explosión de una nube inflamable, producida a partir de un hipotético escape de líquido.

del líquido y del orificio, se puede predecir la evolución del caudal de descarga en función del tiempo hasta que la fuga cesa por sí misma o es detectada y detenida.

*ii)* Por otro lado, el líquido derramado sufre evaporación. La velocidad con que ésta se produce depende de las características del líquido y de las condiciones ambientales (temperatura atmosférica, viento, radiación solar, tipo de terreno, etc.), así como de la superficie de líquido expuesta, que puede ser aproximadamente constante (por ejemplo, si existe un dique de contención alrededor del tanque), o variable. Los modelos de evaporación aplicados a este caso nos permiten estimar la intensidad del flujo de vapor desde la superficie del líquido en un instante dado.

*iii)* El vapor producido se mezcla con el aire circundante dispersándose en él y dando origen a un gradiente de concentraciones. La región del espacio que contiene mezclas de vapor y aire dentro de los límites de inflamabilidad (o bien la región del espacio con concentraciones peligrosas para la salud, en el caso de considerar la fuga de una sustancia tóxica) puede estimarse con la ayuda de los modelos de dispersión adecuados. Sólo después de conocida la cantidad de vapor inflamable incorporada a la nube hasta el momento de la ignición pueden aplicarse los modelos vistos en el capítulo 3, y estimar los efectos de la EVNC.

*iv)* Una vez calculadas las curvas concentración-distancia en el momento en que se produce la ignición (o la evolución concentracióndistancia-tiempo en el caso de una emisión tóxica), los modelos de vulnerabilidad que se exponen en el capítulo siguiente nos proporcionan los probables efectos finales sobre personas e instalaciones.

#### Secuencias de evolución

La figura 4.2 nos muestra posibles secuencias de sucesos a partir del escape de una sustancia que pueda considerarse peligrosa por sus características de inflamabilidad y/o toxicidad. Es importante distinguir entre un escape instantáneo, que correspondería al colapso del recipiente, o uno semicontinuo, producto de una perforación o fisura lo suficientemente pequeña como para que la duración del proceso de descarga sea significativa. En el caso de un escape instantáneo se supone que todo el fluido está inmediatamente disponible para la dispersión en la atmósfera cuando se trata de gases, o para la extensión sobre el terreno y evaporación, en el caso de la fuga de un líquido. En el caso de un



Figura 4.2. Secuencias de evolución a partir del escape de una sustancia peligrosa.

escape semicontinuo, por lo general, las condiciones en el recipiente desde el que se produce la fuga irán cambiando con el tiempo (disminución del nivel de líquido, o de la presión, si el recipiente contiene un gas), aunque, si la fuga es pequeña, las aproximaciones de estado pseudoestacionario (es decir, suponer constantes las condiciones en el recipiente) suelen ser aceptables durante un intervalo de tiempo limitado.

Una vez determinado si el escape es instantáneo o semicontinuo, el estado físico del material que escapa al exterior es el factor más importante. En el caso de escapes bifásicos, el conocimiento de las proporciones relativas de gas/vapor y líquido en el vertido es importante para determinar la pérdida de carga y, por tanto, el caudal en unas condiciones determinadas. Sin embargo, no siempre es posible conocer de antemano la fracción de vapor, que además puede cambiar en el transcurso de la descarga. En la figura 4.3 se proporcionan ejemplos de maneras en que puede producirse la descarga del contenido de un depósito. Está claro que la localización de la fuga es un factor importante en la determinación del estado físico de la descarga. Sin embargo, las proporciones iniciales de las fases pueden modificarse. Así, en la descarga instantánea, parte del líquido del recipiente, súbitamente sometido a la presión y temperatura ambientales, puede experimentar una evaporación flash, que aumentaría considerablemente la proporción de vapor. A su vez, la evaporación de una fracción apreciable del líquido puede arrastrar gotas del mismo a la fase vapor, dando origen a una niebla cuyas gotas pueden sedimentar o evaporarse antes de llegar al suelo, etc. Lo mismo cabe decir de los escapes semicontinuos correspondientes a los puntos 1, 3, 6, 8 y 9 de la figura 4.3. Por otro lado, los escapes inicialmente en fase gas podrían sufrir condensaciones parciales; las descargas a través de los elementos de alivio de emergencia o a través de perforaciones pueden arrastrar mezclas de gas y líquido. etc.

Como se indica en la figura 4.2, si la pérdida de contención da origen a un derrame de líquido inflamable, los vapores sobre la superficie del mismo pueden incendiarse, dando origen a un incendio de líquido en charco. En el caso de la descarga de gas inflamable presurizado, lo que tiene lugar tras una ignición inmediata es un dardo de fuego, mientras que si la ignición se retrasa el chorro de gas tiene tiempo de dispersarse en una zona más amplia, dando origen a una nube. Por su parte, las otras descargas en fase gas, o la evaporación del líquido descargado también dan origen a la formación de una nube. Las características de la mezcla del vapor/gas tóxico o inflamable con el aire circundante van a determinar la peligrosidad de la nube formada, junto con otras circunstancias concomitantes, como el momento en que se produce la ignición (en el caso de nubes inflamables), las condiciones atmosféricas, la topografía del terreno, etc.

En cuanto a la evolución del caudal en el tiempo, la descarga puede seguir uno de los caminos indicados en la figura 4.4. La curva 1 corresponde a una descarga instantánea. En un espacio de tiempo muy corto



I. ESCAPE INSTANTÁNEO: Colapso del recipiente con vertido muy rápido de su contenido. El estado físico inicial de éste puede modificarse al quedar expuesto a las condiciones ambientales.



II. ESCAPE SEMICONTINUO: Pérdida de contención de magnitud limitada. Algunas localizaciones posibles:

1. Perforaciones o fisuras en las conducciones de líquido.

2. Perforaciones o fisuras en las conducciones de gas.

3. Fugas en las válvulas de las conducciones de líquido.

4. Fugas en las válvulas de las conducciones de gas.

5. Disco de ruptura, o en su caso válvula de seguridad.

6. Bridas y uniones.

7. Perforaciones o fisuras en la zona de gas del depósito.

8. Perforaciones o fisuras en la zona de líquido del depósito.

9. Bombas, etc.

Figura 4.3. Algunos de los posibles casos de pérdidas de contención en un proceso. (lo que tarda el recipiente en desintegrarse físicamente) se llega al máximo del caudal, seguido por una caída brusca tras el colapso del recipiente. En la curva 2 hay un período de crecimiento hasta que se establece un caudal máximo, y después un decrecimiento paulatino a medida que la fuerza impulsora para la descarga va agotándose. Si durante un cierto tiempo el material en el interior del recipiente se repone a la velocidad a la que se consume, tras el máximo puede aparecer un período de caudal aproximadamente constante (curva 3). Por último, la curva 4 representa el caso en el que la abertura que da origen a la fuga va ensanchándose con el tiempo. En cualquiera de los casos la cantidad total descargada puede ser menor, igual o mayor que la contenida inicialmente en el recipiente, dependiendo de la altura de la perforación y de la configuración concreta de tuberías, válvulas de aislamiento, etc. La duración del escape puede venir determinada por la cantidad total de fluido susceptible de derrame, o por el tiempo de respuesta (detección más acciones correctoras) ante el escape.



Figura 4.4. Distintas posibilidades de variación del caudal descargado con el tiempo (adaptado de la referencia 10).

# Descarga accidental de líquidos

La fuga de líquidos contenidos en un recipiente puede ocurrir a través de una perforación en la pared del mismo o en la tubería de descarga, válvula, etc., de acuerdo con lo señalado en la figura 4.3. Las ecuaciones que establecen el flujo de líquido para una configuración dada del sistema pueden encontrarse en cualquier texto convencional de mecánica de fluidos. Para el caso en el que la fuga se produce a través de un orificio en la pared de un depósito, el caudal másico de descarga viene dado por:

$$m^* (\text{kg/s}) = F_c A \sqrt{2\rho(P_1 - P_2)}$$
 [4.1]

o bien

$$m^* (\text{kg/s}) = F_c A \rho \sqrt{\frac{2(P - P_2)}{\rho} + 2gb}$$
 [4.1b]

donde  $F_c$  es el coeficiente de descarga del orificio y A su área transversal (m<sup>2</sup>),  $P_1$  y  $P_2$  son las presiones a ambos lados del orificio (Pa), P la presión total en el espacio de vapor del recipiente (Pa), h la altura de líquido sobre el orificio (m) y p la densidad del líquido (kg/m<sup>3</sup>). Para la estimación de los valores de A y  $F_c$  se requiere conocer el tipo de orificio y sus dimensiones. En algunos casos pueden realizarse análisis de casos concretos en los que las características del orificio de salida son conocidas (por ejemplo, estudio del caso en que la conducción de salida del tanque es arrancada de cuajo a nivel de la soldadura de unión por el impacto de un vehículo). En otros, el análisis se puede realizar para una serie de suposiciones razonables (por ejemplo, grietas de bordes irregulares en la pared del tanque, a distintas alturas y con distintas áreas equivalentes), calculándose las consecuencias en términos de caudal-tiempo.

En la ecuación [4.1] la presión en el lado interior de la perforación,  $P_1$ , depende de la altura de líquido sobre el orificio y de la presión en el espacio de vapor del tanque. Puesto que la altura va variando con el tiempo, el caudal de descarga también lo hará, por lo que la ecuación [4.1] predice valores distintos de  $m^*$  a medida que varía  $P_1$ . El cálculo de la variación de altura (y, por lo tanto, de  $P_1$ ) tras la descarga de un volumen de líquido determinado es inmediata para tanques cilíndricos verticales. Para tanques esféricos o tanques cilíndricos horizontales las relaciones entre la altura y el volumen de líquido pueden encontrarse en textos apropiados (1). Cuando el nivel de líquido llega al nivel de la perforación, el vertido de líquido se interrumpe para ser sustituido, si la presión en el espacio de vapor del tanque es mayor que la atmosférica, por el escape de gas o por un escape bifásico.

Para el caso de un tanque cilíndrico vertical, con una presión P constante en el espacio de vapor sobre el nivel de líquido (como ocurriría en los casos de tanques con un sistema de inertización y regulación de presión con nitrógeno, tanques isotermos conteniendo un líquido en equilibrio con su vapor o tanques abiertos a la atmósfera), puede demostrarse que la variación del caudal con el tiempo viene dada por (2):

$$m^* (\text{kg/s}) = F_c A \rho \sqrt{\frac{2(P - P_2)}{\rho} + g b_o} - \frac{\rho g (F_c A)^2 t}{A_R}$$
[4.2]

donde P es la presión en el espacio de vapor del tanque (igual a  $P_2$  si el tanque está venteado a la atmósfera),  $h_o$  es la altura inicial de líquido sobre el orificio, t el tiempo en segundos y  $A_R$  el área transversal del cilindro. El tiempo para que el depósito se vacíe hasta el nivel del orificio  $t_F$  se obtiene haciendo  $m^* = 0$  en la ecuación anterior, de donde

$$t_F = \frac{A_R}{F_c A_g} \sqrt{\frac{2(P - P_2)}{\rho} + gb_o}$$
 [4.3]

y la cantidad total (kg) de líquido derramado hasta ese momento viene dada por

$$M_T = A_R \, b_o \, \rho \tag{4.4}$$

Si el vertido de líquido se produce no desde un orificio en la pared del tanque, sino a través de una perforación en la tubería de descarga, puede plantearse una ecuación análoga a la [4.1], en la que ahora  $P_1$  es la presión en el interior de la tubería a la altura de la perforación. El valor de  $P_1$  debe obtenerse en función del caudal que circula por la tubería (hasta la perforación), las condiciones en el depósito y las características de la conducción (longitud, rugosidad, accesorios, etc.), corriente arriba del orificio. Otros casos de fugas de líquido contemplados en la figura 4.3 pueden plantearse de manera semejante.

# Descarga accidental de gases o vapores

En el caso de la descarga de gases a través de una perforación hay que distinguir entre descarga sónica y subsónica, según que el valor del cociente entre las presiones  $P_2$  (en general igual a la presión atmosférica) y  $P_1$  sea inferior o no al valor crítico, dado por

$$r_{crit} = \left(\frac{P_2}{P_1}\right)_{crit} = \left[\frac{2}{k+1}\right]^{\frac{R}{k-1}}$$
[4.5]

Así, en el caso de presiones iniciales  $P_1$  moderadamente altas (basta con que sean mayores que 1,9 bares para la mayoría de los gases diatómicos), la descarga comienza con un valor de la relación de presiones inferior al crítico, y el flujo es sónico. Eventualmente, si el depósito no recibe aportes de materia, la presión  $P_1$  disminuirá lo suficiente como para que el valor de  $P_2/P_1$  llegue a ser superior al crítico, con lo que el flujo se convierte en subsónico. Por lo general, el tiempo que el gas invierte en pasar a través del orificio es tan corto que el intercambio de calor con el exterior puede despreciarse, y el proceso se considera adiabático. Las ecuaciones de la mecánica de fluidos para el flujo subsónico de gases ideales a través de orificios establecen que en este caso el flujo másico viene dado por

$$m^{*} = F_{c}AP_{1}\sqrt{\frac{2M}{R_{g}T_{1}}\frac{k}{k-1}\left[\left(\frac{P_{2}}{P_{1}}\right)^{\frac{2}{k}} - \left(\frac{P_{2}}{P_{1}}\right)^{\frac{k+1}{k}}\right]}$$
[4.6]

donde  $P_1$  y  $T_1$  son la presión y temperatura en el lado del depósito,  $P_2$  es la presión en el lado de la descarga (usualmente la presión atmosférica), M es el peso molecular del gas y  $R_g$  la constante universal de los gases. k tiene un valor igual al cociente de capacidades caloríficas si la expansión es isentrópica, y un valor inferior en caso contrario. En el caso de que

 $(P_2/P_1)$ tenga un valor inferior al crítico, el flujo es sónico en la garganta, y $m^{\ast}$ tiene un valor dado por

$$m^{*} = (m^{*})_{max} = F_{c}A \sqrt{P_{1}\rho_{1}\frac{2k}{k-1} \left[ (r_{crit})^{\frac{2}{k}} - (r_{crit})^{\frac{k+1}{k}} \right]}$$
[4.7a]

o bien

$$m^* = (m^*)_{max} = F_c A \sqrt{P_1 \rho_1 k \left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k+1}{k-1}}}$$
 [4.7b]

Es de notar que bajo condiciones de flujo sónico la presión  $P_2$  en el lado de la descarga del orificio no influye en el caudal másico a su través, como se indica en las ecuaciones anteriores, donde no aparece dependencia respecto de  $P_2$ . La variación del flujo viene dada por la ecuación 4.7b hasta el momento en que el flujo se convierte en subsónico, en cuyo momento la ecuación que proporciona el caudal es la [4.6].

Un caso de descarga de fluidos a través de orificios con gran importancia práctica es el del alivio de presión de un recipiente a través de discos de ruptura o válvulas de seguridad. Este caso se trata con cierta extensión en el capítulo 7, donde también se discute la posible existencia de flujo bifásico.

En cuanto a las distintas posibilidades de fugas de gases en conducciones, la casuística es tan amplia como el número posible de configuraciones de tuberías y modos de fallo (perforaciones en la pared de la tubería, fallos en los cierres de válvulas, fugas en juntas de bridas, etc.), por lo que cada caso ha de plantearse separadamente. De cualquier manera, un planteamiento convencional de flujo de gases en conducciones permite obtener la presión en el punto de la tubería en que se produce la fuga. Para ello existen ecuaciones que contemplan el flujo isotermo (tiempos de residencia largos, conducciones sin aislamiento térmico) o adiabático (altas velocidades de gas, que proporcionan tiempos de residencia y, por tanto, de intercambio de calor cortos, conducciones calorifugadas). En realidad, el flujo estará comprendido entre ambos extremos, y normalmente la diferencia entre los caudales que predicen las ecuaciones de flujo isotermo y adiabático de gases en tuberías es pequeña, por lo que las ecuaciones del caso adiabático pueden utilizarse en casi todas las circunstancias. Para el caso de un depósito conectado a una tubería de descarga, Levenspiel (4) proporciona gráficos que relacionan la caída de presión con el caudal que circula en flujo adiabátirco. Estas relaciones pueden utilizarse para obtener la presión en el interior de la conducción en el punto en el que se produce la fuga. A partir de aquí se sigue un tratamiento análogo al indicado anteriormente para las perforaciones en la pared de un depósito.

## Descarga bifásica

En muchos casos el fluido que escapa por una perforación o a través de una conducción no contiene una sola fase, sino que es una mezcla de líquido y vapor, con proporciones de uno y otro que pueden variar a medida que el fluido descarga hacia el exterior. El flujo bifásico puede ocurrir durante el vaciado de un recipiente conteniendo gas y líquido, especialmente si el líquido tiene tendencia a formar espumas y la perforación se encuentra cerca del nivel de la interfase, o puede tener lugar por transformación parcial de una de las fases. Así, por ejemplo, los líquidos almacenados bajo presión a temperaturas más altas que su punto de ebullición normal experimentarán una evaporación súbita o «flash» parcial a medida que el paso por la perforación o la descarga a través de la conducción, producen la caída de presión correspondiente.

Es importante conocer con cierta precisión cuándo puede producirse flujo bifásico y cuáles son sus características, ya que el caudal bifásico descargado en unas condiciones determinadas puede ser considerablemente distinto del que se obtiene cuando sólo una de las fases está presente. Así, en una de las aplicaciones con mayor interés de la descarga bifásica a través de orificios, que es el venteo de emergencia de recipientes, se ha señalado frecuentemente (5), (6) que el área requerida en presencia de flujo bifásico es mayor que en el caso de descarga de vapor puro. El flujo bifásico dista mucho de estar bien comprendido, y persiste un grado considerable de empirismo en las expresiones propuestas. Entre los problemas que no están aún completamente resueltos está el del grado de equilibrio que existe entre líquido y vapor durante la descarga de líquidos acompañada de evaporación flash, y la determinación del punto en el que se alcanza el flujo bifásico crítico, similar al que se obtiene con gases. Para el flujo en una conducción, las características del flujo bifásico pueden estimarse a partir de expresiones empíricas como las que aparecen en la mayoría de los textos de mecánica de fluidos. Estas expresiones, por lo general, están basadas en los conocidos diagrama de Baker y correlaciones de Lockart-Martinelli para la predicción del tipo de flujo y de la pérdida de carga, respectivamente.

En el caso de la descarga bifásica a través de un orificio, el CCPS (7) propone la siguiente expresión, obtenida por Fauske y Epstein (3), para estimar el caudal de descarga de un líquido en el que se produce la evaporación flash al ser despresurizado:

$$G = F_c \sqrt{(G_{sub})^2 + \frac{(G_e)^2}{N}}$$
 [4.8]

donde G representa la densidad de flujo másico (kg/m<sup>2</sup>s). G<sub>sub</sub> representa la contribución del subenfriamiento y viene dado por

$$G_{sub} = \sqrt{2(P - P_v)\rho_f}$$

$$[4.9]$$

siendo *P* la presión total en el recipiente,  $P_v$  la presión de vapor a la temperatura de almacenamiento (Pa), y  $\rho_f$  la densidad del líquido (kg/m<sup>3</sup>). En el caso de líquidos saturados puede considerarse que el equilibrio se alcanza si el conducto de descarga tiene más de 0,1 m de longitud (o si la longitud de la conducción de descarga es mayor que 10 diámetros). En este caso  $G_e$  viene dado por

$$G_e = \frac{\Delta b_v}{v_{fg} \sqrt{TC_p}}$$
[4.10]

donde  $\Delta h_v$  es el calor latente de vaporización (kJ/kg),  $C_p$  el calor específico (kJ/kg K), T la temperatura del depósito (K) y  $v_{fg}$  el cambio en el volumen específico al pasar de líquido a vapor (m<sup>3</sup>/kg). En conducciones de menos de 0,1 m, la cantidad de líquido que sufre evaporación flash durante la descarga disminuye rápidamente al disminuir la longitud de la conducción, tendiendo a cero al anularse ésta. Para tener en cuenta este efecto es para lo que se introduce el factor de corrección N en la ecuación [4.8]

$$N = \frac{(\Delta h_v)^2}{2\Delta P \rho_f v_{fg} T C_p (F_c)^2} + \frac{L}{0,1}$$
 [4.11]

donde  $\Delta P$  es la diferencia de presiones entre el interior y el exterior del depósito. La ecuación anterior es válida para valores de la longitud L mayores que 0 y menores que 0,1 m. Para L = 0, la descarga consiste sólo en líquido, y las ecuaciones anteriores se reducen a la ecuación [4.1], es decir, el caudal de descarga a través de una perforación en una pared de espesor despreciable puede estimarse como si no ocurriera evaporación flash. Esto no quiere decir que no haya evaporación flash de parte del líquido tan pronto como sale del orificio, sino que la evaporación prácticamente no se produce durante el paso por la perforación y, por lo tanto, no influye en la velocidad de descarga.

El procedimiento de cálculo representado por las ecuaciones [4.8] a [4.11] constituye un método simplificado. Existen otros más sofisticados, que hacen uso intenso del cálculo de las propiedades físicas de los fluidos implicados, plantean balances globales de materia y energía y utilizan ecuaciones semiempíricas basadas en una extensa gama de experimentos a distintas escalas. Merecen especial atención los resultados que ha obtenido el DIERS (*Design Institute for Emergency Relief Systems*), del AIChE, que es la referencia obligada en este tipo de estudios. En el capítulo 7 se revisan los métodos para diseñar aperturas de alivio en recipientes a presión, y se examinan con más detalle las ecuaciones existentes para la predicción del caudal de descarga cuando existe flujo bifásico.

#### Ejemplo 4.1:

Se produce una fisura de 2mm de diámetro en un depósito que contiene metano (k = 131) a temperatura ambiente (15° C). El coeficiente de descarga para el orificio se estima en 0,61. Calcular el caudal inicial de descarga para presiones en el interior de 1,5 y 15 atmósferas, respectivamente.

La presión de vapor del metano a 15° C es considerablemente mayor que 15 atmósferas, por lo que la descarga se produce en fase gaseosa en ambos casos. El área de la fisura (suponiendo forma circular) es de 3,14 mm<sup>2</sup>, 3,14  $\times$  10<sup>-6</sup> m<sup>2</sup>.

# Ejemplo 4.1 (continuación):

La relación crítica de presiones se obtiene sustituyendo k = 1,31 en la ecuación [4.5], resultando  $r_{crit} = 0,54$ . Con este valor,  $P_{1,crit} = 1/0,54 = 1,85$  atm = 187.400 Pa. En el primer caso,  $P_1$  es inferior a este valor y el flujo es subsónico, en el segundo es considerablemente superior, y el flujo es sónico.

Cuando  $P_1 = 1,5$  atm, la aplicación de la ecuación [4.6] proporciona un flujo de 154,6 kg/m<sup>2</sup>s, es decir, 0,49 g/s para el área de la fisura considerada. Por otro lado, cuando  $P_1 =$ 15 atm (1,52 × 10<sup>6</sup> Pa), de la ecuación [4.7] se obtiene G/A = 1.603,4 kg/m<sup>2</sup>s, o 5,0 g/s para el área considerada.

# Evaporación de derrames de líquido

En los tres apartados anteriores hemos examinado métodos de cálculo para estimar el caudal y la duración de la descarga de líquidos, gases y mezclas de ambos cuando se produce una perforación en un depósito o en una conducción. Es ahora el momento de preguntarse por los acontecimientos que tienen lugar como consecuencia de la descarga del material. En la figura 4.5 se expresan de forma gráfica algunas de las posibilidades tras la descarga de un fluido procedente de un recipiente dañado. En lo que sigue se van a distinguir tres casos, correspondientes a la evaporación de líquidos sobrecalentados (procedentes de gases licuados por compresión), de líquidos hirvientes (procedentes de gases licuados por enfriamiento) y de líquidos no hirvientes.

#### Evaporación de líquidos sobrecalentados

Cuando un depósito contiene un gas licuado bajo presión, al producirse una pérdida de contención el líquido escapa al exterior, con lo que se ve sometido a la presión atmosférica. La temperatura inicial del líquido es la ambiental si el depósito estaba en equilibrio térmico con los alrededores, o inferior si el líquido se mantenía bajo refrigeración. En cualquier caso, el líquido que escapa es un líquido sobrecalentado, con una temperatura mayor que su temperatura de ebullición normal,



Figura 4.5. Algunos ejemplos de los procesos que pueden tener lugar tras una descarga accidental de fluidos. (Adaptado de la referencia 8.)

y, por lo tanto, sufre una evaporación flash al ser expuesto a las condiciones ambientales.

La evaporación súbita puede arrastrar una cantidad considerable de líquido en forma de gotas, con lo que la superficie de evaporación aumenta considerablemente tras el flash inicial. Parte de estas gotas puede volver a caer al suelo, mientras que el resto se evaporará antes de terminar la sedimentación, utilizando calor procedente del aire ambiente que se mezcla con la emisión. En cuanto al charco de líquido que queda sobre el suelo, en algunos casos el vertido es de poca magnitud, y la evaporación es tan rápida que todo el líquido se incorpora a la atmósfera en muy poco tiempo. En descargas de mayor entidad, tras la rápida evaporación inicial, el líquido y el terreno contiguo se han enfriado lo suficiente como para que la evaporación desde la superficie del charco proceda más paulatinamente.

La evaporación flash inicial ocurre tan rápidamente que el proceso puede considerarse aproximadamente adiabático. El exceso de energía contenido en el líquido sobrecalentado se invierte en calor latente de vaporización, lo que permite calcular el grado de evaporación flash. En esta primera fase, la evaporación de una cantidad diferencial de líquido, dm, produce un descenso de temperatura, dT, en la masa de líquido, de acuerdo con

$$\Delta h_v dm = mC_v dT \tag{4.12}$$

La evaporación flash continúa hasta que la temperatura del líquido ha disminuido hasta el punto de ebullición. Separando variables e integrando en la ecuación anterior se obtiene el cambio de la masa de líquido al variar la temperatura. Para un solo componente, la masa evaporada resulta

$$m_{v} = m_{o} \left( 1 - e^{-\frac{C_{p}(T_{v} - T_{o})}{\Delta b_{v}}} \right)$$
[4.13]

donde  $m_o$  es la masa inicial del líquido,  $m_v$  la vaporizada en el flash,  $T_o$  y  $T_{eb}$  las temperaturas inicial y de ebullición, respectivamente, y  $C_p$  y  $\Delta h_v$  representan los valores del calor específico y del calor de vaporización promediados entre  $T_o$  y  $T_{eb}$ . En mezclas multicomponentes el cálculo manual puede resultar tedioso, por lo que se recomienda acudir

a los cálculos de flash adiabático en cualquiera de los simuladores de proceso comerciales, como PROCESS o ASPEN PLUS.

El valor de la fracción vaporizada,  $f_{ex}$  estimada a partir de la ecuación [4.13] como el cociente entre  $m_v$  y  $m_o$ , suele estar muy por debajo de las observaciones experimentales, lo que principalmente se debe al arrastre de líquido en forma de gotas (aerosol) antes mencionado. La formación del aerosol, además de aumentar la masa total del componente que se incorpora a la nube, altera las características de ésta, aumentando su densidad aparente y produciendo un enfriamiento suplementario (al evaporarse el líquido arrastrado en las gotas), que puede conducir a la condensación de la humedad del aire atmosférico. La predicción fiable del grado de aerosolización es difícil, requiriendo modelos de atomización y aceleración de las gotas formadas, seguido de procesos sedimentación/ evaporación. Kletz (9) propone una estimación simplificada, sugiriendo que la fracción proveniente del aerosol iguala la de la evaporación flash, con lo que el valor aproximado de la fracción líquida incorporada a la nube se obtendría como 2f... Sin embargo, este valor corregido puede ser aún considerablemente inferior a la realidad. En la revisión del CCPS (7) secitan trabajos experimentales en los que no se obtiene líquido tras el flash inicial, a pesar de que la fracción vaporizada teórica era de sólo el 20 por 100 (y en algunos casos del 10 por 100). Por tanto, en ausencia de cálculos más sofisticados, puede admitirse como suposición conservadora que toda la masa vertida se incorpora a la nube, salvo que los valores de  $f_{e}$  teóricos para el vertido de líquidos sobrecalentados sean inferiores al 10-20 por 100. En este caso podría aplicarse la corrección sugerida por Kletz.

En el caso de que tras la evaporación flash inicial subsista una masa apreciable de líquido, se obtendrá un charco de líquido a su temperatura de ebullición, y a partir de ese momento la evaporación puede calcularse con los métodos que se indican a continuación.

# Evaporación de líquidos hirvientes

Bajo este epígrafe se trata la evaporación de vertidos de gases licuados por enfriamiento (y que están ya a su temperatura de ebullición o próximos a ella), o bien de la evaporación de vertidos procedentes de gases licuados por compresión una vez que ha ocurrido el flash inicial y la temperatura del líquido remanente es la de ebullición. Análisis de consecuencias: escape de sustancias peligrosas

Cuando un líquido con las características anteriores entra en contacto con el terreno, inmediatamente tiene lugar la transferencia de calor desde éste hacia el líquido, que está mucho más frío. Si el derrame ocurre en un medio seco y el líquido derramado no penetra en él de manera significativa, la transferencia de calor viene regulada por la ecuación de Fourier, aplicada al enfriamiento de un medio semiinfinito:

$$\rho_s C_{ps} \frac{\partial T_s}{\partial t} = K_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2}$$
[4.14]

donde  $\rho_s$ ,  $C_{ps}$ ,  $K_s$  y  $T_s$  son, respectivamente, la densidad, calor específico, conductividad térmica y temperatura del sustrato (terreno) sobre el que ocurre el vertido, y el sentido de crecimiento de la coordenada z es hacia el interior del terreno. La ecuación [4.14] se resuelve con las condiciones de contorno siguientes:

A 
$$t = 0,$$
  
A  $t > 0,$   
 $T = T_{s'}$  para cualquier valor de z  
 $T = T_{eb}$  para  $z = 0$   
 $T = T_{s}$  para z igual a infinito [4.15]

El calor transferido por conducción desde el terreno  $(W/m^2)$  se calcula por la condición de continuidad en la interfase como

$$Q = K_s \left. \frac{\partial T_s}{\partial z} \right|_{z=0}$$
[4.16]

La solución de las ecuaciones [4.14] a [4.16] nos proporciona la expresión del flujo de calor transmitido por unidad de superficie desde el terreno hacia el líquido:

$$Q = \frac{K_s \left(T_s - T_{eb}\right)}{\sqrt{\pi\alpha_s t}}$$
[4.17]

donde  $\alpha_s$  es la difusividad térmica del sustrato (m<sup>2</sup>/s). En la tabla 4.1 se proporcionan algunos valores aproximados de conductividades y difusividades térmicas para varios sustratos (10). El caudal de evaporación  $M_e$  (kg/m<sup>2</sup>s) se calcula como Análisis y reducción de riesgos en la industria química

$$M_e = \frac{K_s \left(T_s - T_{eb}\right)}{\Delta h_v \sqrt{\pi \alpha_s t}}$$
[4.18]

donde  $\Delta h_v$  viene dado en J/kg. Como medida conservadora se recomienda (10) comparar el valor del caudal de evaporación que predice la ecuación [4.18] con el que se estimaría para líquidos no hirvientes (que se discuten en la sección siguiente), y tomar el mayor de los dos.

Material	$K_s$ (W/mK)	$lpha_{s} imes$ 107 (m²/s)	
Suelo promedio	0,9	4,3	
Suelo arenoso seco	0,3	2,0	
Suelo arenoso (8 por 100 de agua)	0,6	3,3	
Madera	0,2	4,5	
Grava	2,5	11,0	
Acero al carbono	45,0	127.0	
Cemento *	1,1	10,0	

#### Tabla 4.1. Algunos valores típicos de conductividades y difusividades térmicas para utilizar en la ecuación [4.18]

\* Altamente variable, en función del contenido en agua

En las ecuaciones [4.17] y [4.18] la raíz cuadrada del tiempo aparece en el denominador, lo que significa que a medida que transcurre el tiempo y el terreno va enfriándose, la velocidad de evaporación que predice la ecuación [4.18] tiende a cero. Ello es debido a que en la deducción de las ecuaciones anteriores se ha supuesto que todo el calor para la evaporación proviene del enfriamiento del terreno. En los cálculos a tiempos largos la radiación del sol, debe tenerse en cuenta, y también puede ser necesario hacer correcciones por la transferencia de calor por convección desde los alrededores. La radiación solar varía notablemente con la hora, la época del año, las condiciones ambientales y la latitud. A título de ejemplo, se citan (24) valores típicos de radiación solar máxima (a mediodía, en días claros), oscilando entre 425 (enero) y 1.170 W/m<sup>2</sup> (julio), para una latitud de 45° norte. Los valores correspondientes para 35° norte serían 650 y 1.140 W/m<sup>2</sup>, respectivamente.

Las correcciones debidas a la radiación solar o a la transferencia de calor por convección pueden ser dominantes incluso a tiempos cortos si el derrame ocurre sobre superficies aisladas térmicamente. Opschoor (10) también sugiere correcciones para el caso de líquidos derramados sobre sustratos penetrables, tales como grava, que pueden proporcionar caudales de evaporación considerablemente mayores que los calculados con la ecuación [4.18], y para el caso de que el vertido ocurra sobre sustratos con contenidos apreciables de humedad, que pueden proporcionar un flujo adicional de energía a partir del calor liberado en la congelación del agua presente.

# Ejemplo 4.2:

El colapso de un depósito esférico refrigerado de 20 m de diámetro que contiene unos 2.000 kg de propano líquido  $a-5^{\circ}$  C produce el vertido instantáneo de su contenido en un cubeto con suelo arenoso a 20° C, produciéndose la evaporación súbita de la mayor parte del derrame. El líquido restante forma un charco con un área expuesta de 300 m<sup>2</sup>. Calcular la velocidad de evaporación en función del tiempo y estimar en qué momento la radiación solar (que en ese día es de 400 W/m<sup>2</sup>) se convierte en una contribución apreciable.

 $T_o = 268$  K,  $T_s = 293$  K y  $T_{eb} = 231$  K. De la tabla 4.1 se obtiene  $K_s = 0,3$  W/mK, y  $\alpha_s = 2 \times 10^{-7}$  m<sup>2</sup>/s. El calor específico del propano a 260 K es de 2,64 kJ/kgK, y puede tomarse como representativo del intervalo de temperaturas considerado. La entalpía de vaporización del propano a la temperatura de ebullición normal es de 430 kJ/kg.

Sustituyendo valores en la ecuación [4.18] se obtiene  $M_e = 0,055 t^{0.5} \text{ kg/m}^2\text{s}$ , o bien 16,5  $t^{0.5} \text{ kg/s}$ , si se considera el área involucrada. La variación en función del tiempo implica que si al cabo de un segundo la velocidad de evaporación es de 16,5 kg/s, al cabo de un minuto es de 2,12 kg/s, y al cabo de 5 minutos de sólo 0,95 kg/s.

El flujo de calor recibido desde el suelo viene dado por la ecuación [4.17], siendo  $Q = 23.470 t^{0.5} W/m^2$ . Si se considera que para que la radiación recibida del sol (400 W/m<sup>2</sup>) sea significativa con respecto a este valor debe representar al menos un 10 por 100 del mismo, entonces Q debe haber disminuido hasta 4.000 W/m<sup>2</sup>. Esto ocurre a  $t = (23.470/4.000)^2 = 34.4$  segundos.

#### Ejemplo 4.2 (continuación):

Sin embargo, el planteamiento del caso es probablemente poco realista. Teniendo en cuenta la temperatura inicial del propano y sus propiedades físicas, la ecuación [4.13] predice un valor de la fracción vaporizada  $m_v/m_o = 0,203$ , es decir, el 20,3 por 100. De acuerdo con lo señalado anteriormente para un valor de esta magnitud la formación de aerosol en el flash inicial es, por lo general, suficiente como para vaporizar todo el líquido, por lo que es poco probable la formación de charco.

# Evaporación de líquidos no hirvientes

Cuando se produce la descarga de un líquido con un punto de ebullición mayor que la temperatura ambiente, cuya temperatura en el momento de la descarga es inferior a la temperatura de ebullición, el resultado es un charco de líquido no hirviente desde el que tiene lugar la evaporación. En este caso la evaporación no se produce como resultado del enfriamiento del sustrato, sino que la principal fuerza impulsora es  $(P_v - P_{amb})$ , la diferencia entre la presión de vapor sobre la superficie del líquido y la que existe en los alrededores. El control del proceso pasa de la transferencia de calor a la de materia. La velocidad de evaporación de líquidos no hirvientes depende fuertemente de la existencia o no de corrientes de aire sobre el charco, que afectan al coeficiente de transferencia de materia.

El flujo de material evaporado por unidad de superficie líquida puede escribirse como (10)

$$M_e = \frac{kM_m}{R_g T} (P_s - P_{amb}) + \frac{P_s M_e}{P}$$
[4.19]

donde k es el coeficiente de transferencia de materia,  $P_s$  y  $P_{amb}$  son, respectivamente, la presión de vapor del compuesto que se evapora sobre la superficie del líquido y la que existe en los alrededores, P es la presión total,  $M_m$  es el peso molecular y  $R_g$  la constante universal de los gases. El primer término de la ecuación representa el flujo de componente evaporado debido a la diferencia de presiones de vapor, mientras que el

Análisis de consecuencias: escape de sustancias peligrosas

segundo es debido al transporte por convección. En vista de su magnitud, el segundo término puede casi siempre despreciarse frente al primero en el caso de la evaporación de líquidos no hirvientes, con lo que el flujo de evaporación se expresa como

$$M_e = \frac{kM_m}{R_g T} (P_s - P_{amb})$$
[4.20]

Esta ecuación puede aplicarse en el caso de velocidades moderadas de transferencia de materia (valores de  $P_s$  menores que  $2 \times 10^4$  Pa). Para valores mayores, el término de flujo convectivo deja de ser despreciable. Opschoor (10) propone una ecuación más general, con modificaciones basadas en la teoría de la película. La expresión final a usar es:

$$M_e = \frac{kM_mP}{R_gT} \ln\left(1 + \frac{P_s - P_{amb}}{P - P_s}\right)$$
[4.21]

En las ecuaciones anteriores [4.20] y [4.21]  $P_s$  se calcula como la presión de vapor a la temperatura de la superficie líquida, T. Por tanto,  $P_s$  es constante una vez que se alcanza el estado estacionario, resultante del equilibrio entre los distintos flujos de calor existentes: el aportado por el aire circundante, el procedente del sustrato, el intercambio de calor por radiación y el flujo de calor perdido en la evaporación del líquido. En la mayor parte de los casos, hasta que el estado estacionario se alcanza, existe una disminución en la temperatura del líquido, por lo que los valores del flujo de evaporación dados por las ecuaciones anteriores corresponderían a los instantes iniciales, y pueden considerarse conservadores desde el punto de vista de la intensidad de la emisión (aunque como es lógico, darán origen a emisiones más cortas, lo cual puede ser no conservador en algunos casos).

Para la estimación del coeficiente de transferencia de materia puede utilizarse la fórmula de Sutton (11), usando como valores de los parámetros los recomendados por Opschoor (10), válidos para condiciones neutras de estabilidad atmosférica (que se tratan en la sección siguiente). En este caso, después de sustituir, se obtiene, para la evaporación a partir de una superficie circular:

$$M_e = 2 \times 10^{-3} (U_{w,10})^{0,78} r^{-0,11} \frac{M_m P}{R_g T} \ln \left( 1 + \frac{P_s - P_{amb}}{P - P_s} \right)$$
[4.22]

En la ecuación anterior  $U_{w,10}$  representa la velocidad del viento (m/s), medida a una altura de referencia de 10 metros, y r el radio del charco circular (m). La velocidad de evaporación,  $M_e$ , viene dada en kg/m<sup>2</sup>s. En el caso de evaporación a partir de charcos de superficie rectangular, basta con sustituir en la ecuación anterior r por la longitud del lado L. Para los casos en los que hay condiciones de estabilidad atmosférica no neutras la constante y los exponentes de la velocidad del viento y el radio del charco en la ecuación anterior deben corregirse.

Otra ecuación empírica para la estimación de velocidades de evaporación de líquidos no hirvientes es la siguiente (12):

$$M_e = 4,66 \times 10^{-6} (U_{w,10})^{0,75} C_T \frac{P_s M_m}{P_{ref}}$$
 [4.23]

donde  $M_e$  viene dada en lb/ft<sup>2</sup>min y  $U_{w,10}$  en millas por hora.  $P_{ref}$  es la presión de vapor del compuesto de referencia, en este caso la hidracina, que se calcula (en atmósferas), como

$$ln(P_{ref}) = 65,3319 - \frac{7.245,2}{T} - 8,22 \ lnT + 6,1557 \times 10^{-3}T \quad [4.24]$$

siendo T la temperatura absoluta (K). En cuanto a  $C_T$  es un coeficiente de corrección por la temperatura del vertido.  $C_T$  es igual a la unidad si esta temperatura es inferior a 0° C, y en caso contrario viene dado por

$$C_T = 1 + 4,3 \times 10^{-3} t^2$$
 [4.25]

donde t es la temperatura del charco en grados centígrados.

El libro de Hanna y Drivas (8) revisa distintos modelos para la predicción de flujos de evaporación a partir de charcos, y presenta resultados comparativos entre ellos. La comparación entre las predicciones de distintos modelos es interesante, porque muestra que las diferencias son importantes en muchos casos. Asimismo, la comparación entre los caudales de emisión modelados y las relativamente pocas observaciones experimentales existentes muestra que, en general, los modelos tienen tendencia a la sobreestimación de los caudales.

#### Ejemplo 4.3:

Un derrame de benceno queda confinado en un terreno irregular, con una superficie total expuesta de 80 m<sup>2</sup>. Calcular la velocidad de evaporación a 26° C, en un día con una velocidad del viento igual a 2 m/s.

A 26° C la presión de vapor del benceno es de 100 mm Hg, y evidentemente se trata de un líquido no hirviente. La presión de vapor de benceno en el ambiente puede despreciarse  $(P_{amb} = 0)$ .

El círculo de área equivalente a 80 m<sup>2</sup> tiene un radio de 10,1 m (si se hubiese supuesto otra forma geométrica, por ejemplo, un cuadrado, los resultados serían muy parecidos, ya que el término correspondiente en la ecuación [4.22] está muy amortiguado). La masa molecular del benceno es 78. Sustituyendo en la ecuación [4.22] se obtiene  $M_e = 0,0012$  kg/m<sup>2</sup>s, es decir, unos 96 g/s para los 80 m<sup>2</sup> de superficie del derrame.

Para utilizar la ecuación [4.23] se requiere calcular previamente la presión de vapor de la hidracina. A partir de la ecuación [4.24] se obtiene una presión de vapor de 0,0199 atmósferas, 15,13 mm Hg. Para  $C_T$  la ecuación [4.25] proporciona un valor igual a 3,9. Sustituyendo estos valores de la ecuación [4.23] se obtiene  $M_e = 0,0288$  lb/ft<sup>2</sup>min = 0,0023 kg/m<sup>2</sup>s. Esto equivale a una velocidad de evaporación de unos 184 g/s, aproximadamente el doble que la estimada en el caso anterior.

# Dispersión de gases y vapores en la atmósfera

Las emisiones gaseosas como tales, o los vapores producidos a partir de descargas de líquidos volátiles, sufren una dispersión en la atmósfera que rebaja la concentración de la sustancia emitida, al tiempo que la extiende sobre regiones cada vez mayores del espacio. El uso de modelos de dispersión permite la predicción de las concentraciones de la sustancia emitida para un lugar y tiempo determinados, dadas las condiciones de la emisión, calculadas en apartados anteriores, y las condiciones atmosféricas.

# Tipos de emisiones

Desde el punto de vista de la naturaleza de la emisión y de su continuidad en el tiempo puede establecerse la clasificación siguiente:

Naturaleza de la emisión	Continuidad de la descarga		
Neutra	Emisión instantánea (Puff)		
Flotación positiva	Emisión continua (Plume)		
Densa o de flotación negativa	Emisión variable en el tiempo		

El tipo de emisión desde el punto de vista de la continuidad de la descarga viene dado por la escala de tiempos involucrada. Una emisión instantánea será aquella en la que el tiempo necesario para que el material emitido alcance a un receptor situado a una distancia determinada (por ejemplo, una persona), es mucho mayor que el tiempo requerido para la descarga de todo el material. El ejemplo clásico es el del estallido de un recipiente conteniendo gas a presión. Como se ve, la definición es relativa, y así una emisión con una duración determinada puede ser considerada instantánea o no, dependiendo de la localización del receptor y las condiciones ambientales. En una emisión continua el tiempo de emisión es largo comparado con el tiempo necesario para alcanzar al receptor, lo que permite resolver el modelo de dispersión para obtener un estado estacionario de concentraciones. El ejemplo típico de este tipo de situaciones es el de la emisión desde una chimenea. El caso más complicado es el de una emisión variable, continua o intermitente, pero con cambios importantes en la concentración, caudal, etc., de la sustancia emitida, o con variaciones importantes en las condiciones atmosféricas.

En la práctica, la mayor parte de las emisiones accidentales se encuentran en una posición intermedia entre la emisión instantánea y continua, teniendo además un cierto grado de variación en las características de la emisión. A pesar de ello, ambas situaciones extremas son útiles para construir los modelos de dispersión, y en muchos casos describen aproximadamente la realidad. En lo sucesivo, a no ser que se indique lo contrario, se supondrá que en cualquiera de los dos tipos de emisiones las condiciones atmosféricas permanecen constantes durante el tiempo necesario para que la emisión alcance al receptor. Asimismo se considerarán constantes en el tiempo las características (caudal, concentración, etc.) de las emisiones continuas.

184

De acuerdo con lo anterior, una emisión instantánea se dispersará, trasladándose el centro de la emisión a distancias cada vez mavores del origen, debido a la acción de arrastre ejercida por el viento. Este proceso se esquematiza en la figura 4.6, con el desplazamiento a lo largo del eje x de una nube aproximadamente esférica, que va expandiéndose. El caso de una emisión continua se muestra en la figura 4.7. A medida que el tiempo transcurre, los orígenes real (0,0,h) y virtual (0,0,H) de la emisión permanecen fijos en el espacio. A medida que las sustancias descargadas son arrastradas por el viento dominante en la dirección x, el aire atmosférico entra en la pluma por la acción de remolinos turbulentos, lo que provoca la dilución y dispersión de ésta a medida que se aleja del punto de emisión. Los contornos de la pluma o penacho de la emisión (al igual que en el caso de una emisión instantánea ocurre con los contornos de la nube) se definen mediante una concentración determinada, fijada arbitrariamente (por ejemplo, una concentración que sea un 1 por 100 superior a la concentración ambiental, una concentración determinada en partes por millón, etc.).



Figura 4.6. Dispersión de una emisión instantánea.



Figura 4.7. Dispersión de una emisión continua con flotación positiva. (Adaptado de la referencia 18.)

Análisis de consecuencias: escape de sustancias peligrosas

En cuanto a la naturaleza de la emisión, los tres grupos que se han establecido con anterioridad se refieren a las densidades relativas del material emitido y del aire. El que una emisión sea de flotación positiva o negativa con respecto al aire depende no sólo de la sustancia involucrada, sino también de la temperatura de la emisión y del aire circundante, de la humedad relativa y de la formación de aerosoles. Así, por ejemplo, una emisión de dióxido de azufre ( $M_m = 64$ ) sería más densa que el aire, tanto si se realiza a temperatura ambiente como a temperaturas inferiores. Por el contrario, el metano ( $M_m = 16$ ) es mucho más ligero que el aire a temperatura ambiente, pero si la emisión tiene lugar a su temperatura de ebullición normal (-162° C), la densidad en el punto de la emisión será mayor, por lo que cabe esperar que inicialmente la nube tenga comportamiento de flotación negativa. Como es lógico, tras la dilución o intercambio de calor con aire las características de una emisión densa pueden cambiar rápidamente, aproximándose a la neutralidad.

#### Estabilidad atmosférica

Puesto que en la práctica es difícil tener en cuenta todas las condiciones meteorológicas, se ha desarrollado un parámetro denominado «clase de estabilidad», que resume las condiciones relevantes desde el punto de vista de la dispersión de vapores en la atmósfera. Estabilidad en este contexto se refiere a la mezcla vertical de las distintas capas de aire. Depende de los refuerzos rasantes producidos por el viento y, sobre todo, de los gradientes de temperatura en la atmósfera. La escala de estabilidad más utilizada es la de Pasquill, con seis clases de estabilidad desde la A (inestabilidad alta, mezcla intensa) hasta la F (la más estable, con poca mezcla). Las clases de estabilidad se muestran en la tabla 4.2 en función de la velocidad del viento, el calentamiento solar y el momento del día (día o noche) (7). Un cuadro más completo puede encontrarse en el trabajo de Van Buijtenen (13), particularizado para el caso holandés.

Durante el día, la temperatura del aire atmosférico decrece, por lo general, a medida que aumenta la altura sobre el terreno. Si una masa de aire se desplaza desde una altura  $z_1$  hasta otra mayor  $z_2$ , donde existe una presión  $P_2 < P_1$ , el aire se expande. El fenómeno de enfriamiento asociado puede cuantificarse para el caso de un proceso adiabático (en

Valasidad	In	Insolación diurna			Condiciones nocturnas		
Velocidad — superficial del viento (m/s)	Fuerte	Moderada	Ligera	Cubrimiento mayor que 4/8 de nubes bajas	Cubrimiento de nubes menor que 3/8		
< 2	A	A-B	В				
2-3	A-B	В	С	E	F		
3-4	В	B-C	С	D	E		
4-6	C	C-D	D	D	D		
>6	C	D	D	D	D		

#### Tabla 4.2. Condiciones meteorológicas para la definición de las clases de estabilidad de Pasquill

NOTAS:

A: Condiciones muy inestables

D: Condiciones neutras E: Condiciones estables

B: Condiciones inestables C: Condiciones ligeramente inestables

F: Condiciones muy estables

El grado de nubosidad se define como la fracción (medida en octavos) del cielo sobre el horizonte local aparente que está cubierta por nubes.

El grado de insolación se determina de acuerdo con la tabla siguiente:

Nubosidad	Ángulo de elevación del sol mayor que 60°	Ángulo de elevación del sol entre 35 y 60°	Ángulo de elevación del sol entre 15 y 35°	
Menor que 4/8, o cualquier nivel de nubosidad con nubes altas y poco espesas	Fuerte	Moderada	Ligera	
De 5/8 a 7/8, nubes de altura media (2.100 a 4.900 metros)	Moderada	Ligera	Ligera	
De 5/8 a 7/8, nubes bajas Ligera Ligera (menos de 2.100 metros)		Ligera	Ligera	

aire seco) en torno a 0,01° C/m, es decir, se esperaría en condiciones adiabáticas un enfriamiento de aproximadamente un grado centígrado cada 100 metros. En ausencia de otro tipo de fenómenos, a medida que se asciende en la atmósfera se encuentran capas de aire con temperatura cada vez menor. Las diferencias de temperatura provocan diferencias de densidad, por lo que el aire caliente (capas inferiores) tendería a ascender y el frío a descender, produciéndose la mezcla en sentido vertical.

La máxima inestabilidad (clases A y B) se favorece con vientos ligeros e insolaciones altas o moderadas. Por tanto, en un día despejado con una insolación fuerte cabe esperar una mezcla intensa, es decir, alta inestabilidad. La inestabilidad moderada (C) ocurre con las mismas condiciones de insolación, pero con vientos más altos, o bien con vientos ligeros si el calentamiento solar es ligero. Un caso típico en el que suelen darse estas condiciones sería, por ejemplo, una tarde soleada de otoño. La clase D (neutra) prevalece en condiciones de nublado completo, tanto de noche como de día, ya que en este caso el calentamiento solar está atenuado. Las clases estables E y F tienden a ocurrir de noche, con vientos moderados y cielos claros o poco nubosos, en cuyo caso las pérdidas de calor por radiación disminuyen rápidamente la temperatura del terreno, que a su vez enfría las capas bajas de aire, con lo que se inhibe la convección natural y aumenta la estabilidad.

El fenómeno de aparición de temperaturas crecientes al ascender en la atmósfera se denomina inversión térmica, y tiene gran importancia desde el punto de vista de la dispersión de sustancias en la atmósfera, ya que inhibe el movimiento vertical convectivo. La inversión térmica ocurre frecuentemente por la noche, como se ha señalado en el párrafo precedente. En la figura 4.8 se representa el gradiente de temperatura típico a nivel del suelo en función de la hora del día, para campo abierto (14). Puede observarse que el gradiente negativo de temperaturas crece en las horas centrales del día, para invertirse durante la noche. En la costa, el efecto de amortiguación térmica que ejerce el mar disminuye las variaciones observadas, y puede llegar a inhibir la inversión térmica. Se han citado (14) otras causas de inversión térmica, como, por ejemplo, el movimiento descendente de masas de aire que pueden provocar la compresión y calentamiento de capas inferiores, o la presencia de brisa marina (fría, a causa de la evaporación de agua de mar) que puede introducir una capa de aire frío en los niveles más bajos de la atmósfera.



Figura 4.8. Ejemplo de variación diurna del gradiente de temperatura vertical (de la referencia 14).

#### Viento

Ya se ha señalado la influencia del viento en la clase de estabilidad. Además, el viento es obviamente importante a la hora de determinar el comportamiento de una emisión a la atmósfera. Las tres características más importantes desde este punto de vista son:

Dirección: Determina la dirección principal de propagación de la emisión, y, por tanto, las áreas con mayor probabilidad de sufrir las consecuencias de la misma. Por lo general es necesario considerar más de una dirección del viento en el ánalisis de riesgos, incluso en áreas con vientos dominantes de una orientación determinada.

Velocidad: A medida que la velocidad del viento aumenta, la sustancia emitida llega antes al receptor situado en la dirección del viento, aunque también experimenta una mayor dilución al estar involucrada una mayor cantidad de aire y una mayor turbulencia. La velocidad del viento varía con la altura, existiendo una capa límite cuyo espesor depende de la rugosidad del terreno. La figura 4.9 representa de una manera esquemática los efectos de la rugosidad del terreno en la variación de la velocidad del viento con la altura. Puede observarse que la extensión de la capa límite es máxima (unos 500 metros) en el caso de edificios altos, como rascacielos o instalaciones industriales elevadas, pasando a una extensión de unos 400 metros sobre terrenos con edificaciones de poca altura (casas bajas, árboles) y a unos 250 metros en terrenos muy abiertos y llanos, como puede ser la superficie del mar. Por encima de la capa límite está el viento de gradiente, así llamado porque su velocidad puede determinarse con bastante precisión considerando sólo los gradientes de presión.

La variación de la velocidad del viento en la región en la que el terreno ejerce efectos apreciables suele expresarse con una relación exponencial (16):

$$U_{w, z} = U_{w, 10} \left(\frac{z}{10}\right)^n$$
 [4.26]

donde  $U_{w,z}$  es la velocidad del viento a una altura z sobre el suelo,  $U_{w,10}$ es la velocidad del viento a la altura de 10 metros, habitualmente tomada como referencia, y el exponente *n* es función del tipo de terreno y la clase de estabilidad. La tabla 4.3 proporciona valores típicos para el exponente. Los principales efectos de la emisión de una sustancia peligrosa tienen lugar a ras de suelo, por lo que la ecuación anterior puede utilizarse para corregir los valores de velocidad del viento tomados a una altura determinada, especialmente cuando se consideran emisiones densas, que tienen una tendencia mayor a permanecer en cotas bajas durante tiempos prolongados.

La dirección del viento puede estar sujeta además a fuertes influencias locales que combinan efectos del terreno y la temperatura. Así, por ejemplo, es frecuente que en los valles exista una brisa nocturna descendente, debido al enfriamiento del terreno por radiación, y la transmisión de este enfriamiento a las capas de aire adyacentes. De manera semejante, en la costa el terreno suele estar más caliente de día, y el mar, durante la noche, lo que frecuentemente da lugar a brisas hacia el interior durante el día (el aire sobre el terreno, más caliente y de menor densidad se eleva, siendo sustituido por aire del mar), y en sentido contrario durante la noche.



Figura 4.9. Perfiles de velocidad del viento sobre distintos tipos de terreno. (Adaptado de la referencia 14.)

192

Tabla 4.3. Valores del exponente n para utilizar la ecuación [4.26]		
Clase de estabilidad	Terreno urbano	Terreno rural
A	0,15	0,07
В	0,15	0,07
C	0,20	0,10
D	0,25	0,15
E	0,40	0,35
F	0,60	0,55

# Frecuencia y persistencia

La frecuencia del viento en una dirección determinada indica el porcentaje de tiempo durante el cual el viento tiene esa orientación. La persistencia es la cualidad que se refiere a la constancia con que el viento sopla en una dirección determinada. El análisis de riesgos se complica de manera considerable si los cambios de dirección del viento son frecuentes, por lo que el dato de la persistencia debe ser conocido. La persistencia del viento no puede obtenerse de los datos de frecuencia, ya que una frecuencia determinada puede obtenerse con valores muy distintos de persistencia.

Los datos de dirección y velocidad del viento para una localización determinada suelen presentarse como el clásico diagrama de rosa de los vientos, con la estación meteorológica situada en el centro de la esfera y direcciones radiales en las que se representa la frecuencia y velocidad del viento. Es necesario que los valores de dirección, velocidad, frecuencia y persistencia del viento (junto con otros datos relevantes como la insolación, temperatura y humedad del aire, precipitaciones, etc.) se recojan durante un período de tiempo prolongado, a fin de tener en cuenta variaciones estacionales, así como para disponer de un número de datos suficiente que permita establecer la fiabilidad estadística de los parámetros seleccionados como representativos a la hora de llevar a cabo un análisis de riesgos.

# Modelos de dispersión

El desarrollo de nuevos modelos de dispersión y la ampliación de los ya existentes es un campo de gran actividad, por lo que aquí sólo se proporciona una visión superficial del tema, concentrando la discusión en modelos simples, que, sin embargo, son de aplicación frecuente. Para una revisión crítica de los principales modelos existentes puede consultarse la bibliografía específica del tema (8), (17).

En la emisión de un compuesto peligroso a la atmósfera existen varias etapas, con distintas posibilidades de evolución. Así, en la figura 4.7 se ha mostrado el comportamiento que puede esperarse de la emisión de vapores con flotación positiva. En la figura 4.10 se muestra un gráfico similar para la emisión de un compuesto inicialmente más denso que el aire. Durante la fase inicial de aceleración y dilución predomina el momento que lleva consigo la emisión, y la descarga puede realizarse como se indica en la figura. Durante esta fase ocurre una expansión rápida que puede diluir la concentración de la emisión en uno o dos órdenes de magnitud (8). Tras la fase inicial se entra en una segunda etapa en la que aún existe flotación negativa, por lo que la nube tiende a hundirse hacia el terreno. Puesto que la dilución con el aire circundante sigue teniendo lugar, llega un momento en el que los efectos de flotación son insignificantes con respecto a la turbulencia atmosférica, y se produce la transición entre las etapas 2 y 4. El momento de la transición es difícil de determinar, y constituye uno de los puntos de diferenciación de los distintos modelos para emisiones de gases densos. A partir del paso 4 la nube puede considerarse como una emisión de flotación neutra.



Figura 4.10. Etapas en una emisión más densa que el aire.

Análisis de consecuencias: escape de sustancias peligrosas

Emisiones de flotación neutra o positiva: Modelo gaussiano de dispersión

En ausencia de influencias gravitatorias importantes (flotación negativa), la dispersión en la atmósfera de una emisión es un proceso gobernado por la turbulencia atmosférica, que facilita la mezcla de la sustancia emitida con el aire circundante.

Sea una emisión instantánea de Q kg de gas, realizada en el momento en que sopla un viento con velocidad U (m/s), que sólo tiene componente en la dirección x. Consideremos un origen de coordenadas coincidente con el punto en que se origina la emisión. Si se supone un coeficiente de difusión turbulenta para la sustancia emitida en el aire igual a D(m<sup>2</sup>/s), constante en todas direcciones, la dispersión en la atmósfera viene dada, en coordenadas rectangulares, por

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right)$$
[4.27]

donde C es la concentración de la sustancia emitida  $(kg/m^3)$  en un punto del espacio, en un instante determinado. En ausencia de viento, la ecuación [4.27] se convierte en

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C \qquad [4.28]$$

Una emisión instantánea, en ausencia de otras influencias externas, adopta aproximadamente la forma de una esfera, por lo que las coordenadas esféricas pueden utilizarse ventajosamente para describir el sistema. La ecuación anterior puede resolverse imponiendo las siguientes condiciones de contorno:

$$C = 0$$
 cuando  $t = 0$ , para  $r > 0$   
 $C = 0$  cuando  $t = infinito, para cualquier valor de r$  [4.29]

Además debe satisfacerse la condición de conservación de la masa emitida:

$$\int_{V} CdV = Q$$

$$[4.30]$$

La solución de las ecuaciones [4.28] a [4.30] (emisión instantánea sin viento) resulta (2):

$$C = \frac{Q}{8(\pi Dt)^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{4Dt}\right)$$
 [4.31]

La solución en coordenadas rectangulares se obtiene sin más que sustituir  $r^2$  por  $x^2 + y^2 + z^2$ . Cuando ocurre una dispersión anisotrópica la difusividad turbulenta depende de la dirección del espacio, y la ecuación [4.31] se convierte en

$$C = \frac{Q}{8(\pi t)^{3/2} (D_x D_y D_z)^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{4t} \left(\frac{x^2}{D_x} + \frac{y^2}{D_y} + \frac{z^2}{D_z}\right)\right] \quad [4.32a]$$

En el caso de que exista viento se aplican las mismas ecuaciones, con la salvedad de que el centro de la emisión instantánea se desplaza sobre el eje x, a distancias dadas por x = Ut. La ecuación a emplear es

$$C = \frac{Q}{8(\pi t)^{3/2}(D_x D_y D_z)^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{4t} \left(\frac{(x - Ut)^2}{D_x} + \frac{y^2}{D_y} + \frac{z^2}{D_z}\right)\right] [4.32b]$$

En cuanto a las *emisiones continuas*, habitualmente pueden considerarse como tales, a efectos de cálculo de concentraciones, aquellas en las que la duración de la emisión es superior al tiempo ideal de llegada de la emisión al receptor, expresado como x/U. Con un desarrollo análogo al realizado para las emisiones instantáneas, y añadiendo la condición de estado estacionario ( $\partial C/\partial t = 0$ ), a la ecuación [4.27], para un caudal constante de emisión igual a  $Q^*$  (kg/s), se obtiene, en condiciones isotrópicas (2):

$$C = \frac{Q^*}{4\pi D\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \exp\left[-\frac{U}{2D}(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} - x)\right] \quad [4.33]$$

En la mayoría de los casos interesa conocer la concentración a distancias relativamente próximas al eje de la emisión, con lo que  $(y^2 + z^2)/x^2 \ll 1$ , y utilizando la simplificación  $(1 + \delta)^{1/2} \approx 1 + \delta/2$ , válida para valores pequeños de  $\delta$ , la ecuación anterior puede simplificarse a Análisis de consecuencias: escape de sustancias peligrosas

$$C = \frac{Q^*}{4\pi Dx} \exp\left[-\frac{U}{4Dx} (y^2 + z^2)\right]$$
 [4.34]

A una distancia x determinada nos interesa a menudo conocer la concentración máxima. Ésta se encuentra sobre el eje de la emisión (y = z = 0), y viene dada por

$$C = Q^*/(4\pi Dx)$$
 [4.35]

En el caso de que haya anisotropía, la ecuación equivalente a la [4.34] es:

$$C = \frac{Q^*}{4\pi x \sqrt{D_y D_z}} \exp\left[-\frac{U}{4x} \left(\frac{y^2}{D_y} + \frac{z^2}{D_z}\right)\right]$$
[4.36]

El desarrollo anterior se ha realizado para fuentes a gran altura, esto es, no se ha considerado la influencia del terreno. Si una emisión, instantánea o continua, se encuentra a ras de suelo y el terreno es impermeable a la emisión, las concentraciones reales serían el doble de las obtenidas con las ecuaciones anteriores, debido al efecto de reflexión introducido por el terreno. Así, para una emisión continua a nivel del suelo la distribución de concentraciones sería

$$C = \frac{Q^*}{2\pi x \sqrt{D_y D_z}} \exp\left[-\frac{U}{4x} \left(\frac{y^2}{D_y} + \frac{z^2}{D_z}\right)\right]$$
[4.36b]

Una situación intermedia aparece cuando la fuente es elevada, con una altura efectiva H como la que se muestra en la figura 4.7. En este caso la reflexión sobre el terreno ocurre, pero no inmediatamente, sino a cierta distancia del punto en que ocurre la emisión, cuando ésta ya ha alcanzado el suelo. Las ecuaciones a utilizar en este caso (para *emisión continua*) son (14):

$$C = \frac{Q^*}{4\pi Dx} \exp\left[-\frac{Uy^2}{4Dx}\right] \left\{ \exp\left[-\frac{U(z-H)^2}{4Dx}\right] + \exp\left[-\frac{U(z+H)^2}{4Dx}\right] \right\} [4.37]$$

En el caso de una emisión a ras de suelo (H = 0), la ecuación anterior predice concentraciones iguales a las obtenidas con la ecuación

[4.36b], considerando isotropía en los coeficientes de difusión. El término que contiene (z + H) en la ecuación [4.37] representa lo que se conoce como la «emisión por reflexión», que corresponde a la contribución del gas que habría «desaparecido» bajo la superficie y que es «reflejado» (1).

Una característica de las ecuaciones como la [4.36b] es que, para una distancia x determinada, la variación de concentraciones que predicen en sentido horizontal (y), o vertical (z), corresponde a una distribución normal o gaussiana. Las observaciones experimentales de dispersión de sustancias de flotación neutra o positiva en la atmósfera han corroborado esta predicción. Los parámetros de la distribución se muestran en la figura 4.11a. En el caso de emisiones atmosféricas el efecto de la dilución de la emisión por el aire se puede tener en cuenta utilizando un valor cada vez más alto de la desviación típica a medida que aumenta la distancia al punto de emisión. Esto produce una curva cada vez más achatada, como se ilustra en la figura 4.11b. A partir de aquí, distintos autores han desarrollado métodos para obtener los parámetros de la distribución.

Sutton (11) encontró experimentalmente que, aunque en efecto la distribución de concentraciones a una distancia dada podía representarse por una distribución normal, la predicción de la variación de concentraciones a lo largo del eje x no se ajustaba a las ecuaciones anteriores. Así, encontró que la concentración en el eje de la emisión (y = z = 0) para emisiones continuas a ras de suelo era proporcional a  $x^{-1,76}$  cuando, según la ecuación [4.36b], debería haber sido inversamente proporcional a x. Esta y otras anomalías le impulsaron a proponer un conjunto de ecuaciones modificado. Sutton utilizó una expresión empírica para calcular la desviación típica de la dispersión, que aumentaba con la distancia:

$$\sigma_i^2 = 0.5 \ C_i^2 \ x^{2-n}$$
 [4.38]

donde  $\sigma_i$  es la desviación típica en la dirección *i*, y  $C_i$  y *n* son constantes empíricas. Las ecuaciones de Sutton fueron desarrolladas posteriormente, calculándose nuevos coeficientes empíricos, en lo que se conoce como el modelo de Pasquill-Gifford (2), (7), (14), o de pluma gaussiana (13). En este modelo, la ecuación que proporciona las concentraciones en función de la distancia y del tiempo para una emisión instantánea resulta





Figura 4.11. a) Curva de distribución normal para una desviación típica igual
 a 0,5. b) Variación de la forma de la distribución de concentraciones en la dirección y, a medida que aumenta la distancia al punto de emisión.

$$C = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{(x - Ut)^2}{2(\sigma_x)^2} - \frac{y^2}{2(\sigma_y)^2}\right] \left\{ \exp\left[-\frac{(z - H)^2}{2(\sigma_z)^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z + H)^2}{2(\sigma_z)^2}\right] \right\}$$

$$(4.39)$$

donde H es la altura efectiva de emisión (H = 0 para una emisión a ras de suelo), y el origen de coordenadas coincide con el punto inicial donde se produce la emisión. Para una emisión continua,

$$C = \frac{Q^*}{2\pi U \sigma_y \sigma_z} \exp\left[-\frac{y^2}{2(\sigma_y)^2}\right] \left\{ \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{2(\sigma_z)^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+H)^2}{2(\sigma_z)^2}\right] \right\}$$
[4.40]

En la ecuación [4.40] están implícitas las siguientes suposiciones (18):

- Los perfiles de concentración en las direcciones z e y pueden describirse adecuadamente por una distribución gaussiana, cuyos parámetros dependen de la distancia x al punto de emisión.
- La velocidad del viento U y el caudal de emisión Q son constantes.
- La dispersión en dirección x es despreciable comparada con el transporte másico debido al viento.
- El producto emitido es un gas, vapor o aerosol estable, que no reacciona ni sedimenta.

En el caso de emisiones desde una chimenea, o en situaciones en las que el material descargado tiene una cantidad de movimiento suficiente como para proyectarse significativamente a alturas por encima del punto de emisión es necesario calcular la altura efectiva de la fuente, H, que como se indica en la figura 4.7, puede ser distinta de la altura del punto de descarga. Para el cálculo de H existen diversas expresiones (19), siendo el método de Briggs (20), (21) el más utilizado.

Para poder aplicar las ecuaciones correspondientes al modelo gaussiano de dispersión atmosférica se requiere conocer el valor de la desviación típica en función de la distancia. Existen distintas ecuaciones (8), (13), (14) que expresan la variación de  $\sigma_i$  con la distancia, para cada clase de estabilidad. Los valores de  $\sigma_i$  estimados por los distintos méAnálisis de consecuencias: escape de sustancias peligrosas

todos difieren ligeramente. Aquí se presenta el desarrollo de Van Buijtenen (13), basado en las ecuaciones que se muestran a continuación, ajustadas para distancias entre 100 metros y 10 kilómetros:

$$\sigma_v = a \ x^b \tag{4.41a}$$

$$\sigma_z = c \ x^d \tag{4.41b}$$

donde los valores de los cuatro coeficientes para el caso de una emisión continua se obtienen del cuadro siguiente:

CLASE DE ESTABILIDAD	a	b	C	d
A: Muy inestable	0,527	0,865	0,28	0,90
B: Inestable	0,371	0,866	0,23	0,85
C: Ligeramente inestable	0,209	0,897	0,22	0,80
D: Neutra	0,128	0,905	0,20	0,76
E: Estable	0,098	0,902	0,15	0,73
F: Muy estable	0,065	0,902	0,12	0,67

En las ecuaciones anteriores, los valores de x,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  vienen dados en metros. Los valores de la desviación típica en la dirección horizontal  $\sigma_y$  deben interpretarse como promedios sobre un intervalo de diez minutos, y los valores de  $\sigma_z$  se entienden para una altura inferior a 20 metros y un valor del parámetro de rugosidad del terreno  $z_o$  (definido más adelante) igual a 0,1 metros.

Los valores de las desviaciones típicas calculados con las ecuaciones [4.41] y los coeficientes anteriores son válidos para fuentes continuas. En el caso de emisiones instantáneas se recomienda (13) en vista de los escasos datos disponibles, utilizar las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= 0.13 \ x \ (\text{para cualquier clase de estabilidad}) & [4.41c] \\ \sigma_y &= 0.5 \ \sigma_{yc} & [4.41d] \\ \sigma_z &= \sigma_{zc} & [4.41e] \end{aligned}$$

donde  $\sigma_{yc}$  y  $\sigma_{zc}$  son los valores para emisiones continuas en direcciones z e y, respectivamente, calculados con las ecuaciones [4.41a] y [4.41b]. Otros autores (7) sugieren tomar un valor de  $\sigma_x$  igual al calculado para  $\sigma_y$  con la ecuación [4.41d].

# Correcciones al modelo gaussiano de dispersión

# i) Corrección por la rugosidad del terreno

El parámetro de rugosidad del terreno  $z_o$  se introduce para poder cuantificar el efecto de los accidentes sobre la superficie de la tierra en la dispersión vertical de la emisión. Los valores de  $z_o$  para distintos terrenos pueden estimarse de la manera siguiente:

$z_o = 0,03$	Terreno muy llano, con pocos árboles.
$z_o = 0,10$	Terreno abierto (llano con árboles abundantes, tierra arable, etc.).
$z_o = 0,30$	Tierra cultivada o terreno con cierta abundancia de ac- cidentes como cultivos, invernaderos, casas aisladas, etc.
$z_o = 1,0$	Área residencial, con construcción densa pero de poca altura.
$z_o = 3,0$	Área urbana, edificios altos, edificios industriales con estructuras de gran tamaño.

Los valores de  $\sigma_z$  que se obtienen de los coeficientes c y d dados anteriormente pueden usarse como tales para un valor de  $z_o$  igual a 0,1. Para otros valores es necesario introducir una corrección de acuerdo con

$$\sigma_z = c \ x^d \ (10 \ z_o)^m \qquad [4.42a]$$

$$m = 0.53 \ x^{-0.22}$$
 [4.42b]

ii) Corrección por la duración de la exposición

La emisión continua de características constantes a lo largo del tiempo es una idealización. En realidad, como es lógico, los contornos de la emisión experimentan variaciones aleatorias en un punto determinado. La pluma producida en una emisión continua puede tener unos límites más o menos definidos en un instante dado, pero éstos presentan fluctuaciones con el tiempo que es necesario tener en cuenta. La situación puede visualizarse imaginando la emisión de humos en una chimenea. Si en un instante dado se toma una fotografía de la emisión, la nube que parte de la chimenea ocupa una región del espacio determinada (región correspondiente a  $t = t_1$  en la figura 4.12). Una nueva fotografía, unos

segundos más tarde, nos daría una región distinta. Superponiendo los contornos de la emisión obtenidos a lo largo de una serie infinita de instantáneas se obtiene la región del espacio afectada por la emisión, que correspondería a la envolvente de los distintos contornos. Las dimensiones de esta región son mayores que las de la pluma en un instante determinado, mientras que su concentración promedio es inferior.



Figura 4.12. Fluctuaciones de una emisión a la atmósfera.

Las fluctuaciones pueden tenerse en cuenta aproximadamente mediante la introducción de un factor para la corrección de  $\sigma_y$ :

$$C_t = (t/600)^{0,2}$$
 [4.43]

$$\sigma_{y} = C_{t} \sigma_{y,10} \qquad [4.44]$$

donde t es el tiempo de exposición de un receptor a la emisión en segundos, y  $\sigma_{y,10}$  representa la desviación típica para una exposición de diez minutos, que es la que se obtiene de la ecuación [4.41a].

# iii) Corrección por las dimensiones de la fuente

En lo expuesto anteriormente se ha supuesto de manera implícita que la fuente era puntual, o que las estimaciones de concentración se realizaban a una distancia lo suficientemente grande como para poder considerar despreciables frente a ella las dimensiones de la fuente. Sin embargo, puede ocurrir que la fuente tenga dimensiones considerables (considérese, por ejemplo, el derrame de un líquido volátil y la evaporación subsiguiente desde la superficie de un charco), en cuyo caso es necesario tenerlas en cuenta.

Un método utilizado con frecuencia es el de la fuente virtual, que se muestra en la figura 4.13 para una fuente de dimensiones rectangulares  $(2Ly) \times (2L_z)$ . Este procedimiento implica la selección de una *fuente puntual ficticia* A, situada a una distancia  $x_v$  de la fuente real, de tal manera que, tras recorrer la distancia  $x_v$ , la emisión virtual tiene las dimensiones reales de la fuente. Van Buijtenen (13) sugiere utilizar para la desviación típica en dirección horizontal el valor

$$\sigma_{\gamma} = L_{\gamma}/2,15$$
 [4.45]



Figura 4.13. Selección de una fuente virtual para una emisión de geometría rectangular  $2Ly \ge 2L_x$ 

La ecuación anterior implica considerar como límite de la fuente en dirección horizontal el punto en el cual la concentración es del 10 por 100 del valor máximo. Si la concentración sobre la fuente no sigue una

204

Análisis de consecuencias: escape de sustancias peligrosas

distribución gaussiana, sino que es relativamente homogénea, en lugar de la ecuación anterior puede utilizarse

$$\sigma_{\nu} = L_{\nu}/1,25$$
 [4.46]

Una vez estimado el valor de la desviación típica (utilizando las ecuaciones anteriores u otras que se consideren más adecuadas), la distancia virtual para la dirección y puede calcularse a partir de la ecuación [4.41a]. Así, utilizando la estimación de desviación típica dada por la ecuación [4.45],

$$x_{vy} = \left(\frac{L_y}{2,15a}\right)^{\frac{1}{b}}$$
[4.47]

Análogamente, para la distancia virtual correspondiente a la dirección z,

$$x_{vz} = \left(\frac{L_z}{2,15c}\right)^{\frac{1}{d}}$$
[4.48]

Si es necesario, los valores de  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  utilizados en las ecuaciones [4.47] y [4.48] pueden modificarse con las correcciones correspondientes por la rugosidad del terreno o la duración en la emisión.

# Corrección por la transmisión sobre terreno heterogéneo

Puede ocurrir que la naturaleza del terreno cambie dentro de la distancia a la cual se realizan cálculos de dispersión. Por ejemplo, una emisión procedente de un polígono en el que existen industrias con estructuras elevadas puede transmitirse a través de campo abierto de baja rugosidad, para llegar después a una extensa zona residencial. Si se quiere evaluar la posible exposición de un receptor en la zona residencial a una emisión del polígono industrial, será necesario tener en cuenta los cambios en las características del terreno. Los cálculos en este caso pueden realizarse con ayuda de fuentes virtuales, de manera semejante a lo indicado en el apartado anterior para fuentes de dimensiones finitas. Así, si una emisión atraviesa una extensión de terreno  $x_A$  con un valor del parámetro de rugosidad  $z_{oA}$ , seguida de una extensión  $x_B$  de rugosidad  $z_{oB}$ , al cabo del cual se encuentra el receptor, el método de cálculo consiste en usar la rugosidad  $z_{oA}$  para determinar la desviación típica  $\sigma_A$  tras la distancia  $x_A$ . Conocida la desviación típica en este punto se determina la distancia virtual  $x_{vB}$  que produciría ese mismo valor de la desviación típica con los parámetros de rugosidad de la zona B, con lo que puede calcularse la desviación típica para una zona homogénea ficticia, con las características de la zona B y con una extensión  $x_{vB} + x_B$ . En el ejemplo 4.5 se muestra un cálculo de este tipo.

# Contorno de la emisión para una concentración determinada

A partir de las ecuaciones anteriores puede obtenerse también la región del espacio sujeta a una determinada concentración. Esto es importante a la hora de evaluar vulnerabilidades, en que, por ejemplo, se requiere conocer la extensión de terreno afectada por una cierta concentración en la emisión de una sustancia tóxica, o la región del espacio dentro del rango de inflamabilidad en una emisión de vapores inflamables.

En el caso de una pluma nos interesa calcular la distancia horizontal (dirección y) a ambos lados del eje de la emisión que fija los límites en los que se alcanzan concentraciones mayores que un valor determinado. Para un punto situado a x metros sobre el eje de una emisión continua a ras de suelo, la distancia a la que se alcanza una concentración determinada  $C_i$  viene dada por (13):

$$y(x) = \sigma_y(x + x_v) \sqrt{\frac{2\ln C_{max}(x)}{C_i}}$$
[4.49]

donde  $C_{máx}(x)$  es la concentración sobre el eje de la emisión (x, 0, 0)a una distancia x. El término  $\sigma_y(x + x_v)$  indica que, aunque los límites de concentración se calculan para una distancia x de la fuente real en la dirección del viento, en el caso de que la emisión tenga características tales que hagan necesario el uso de una fuente virtual, la distancia  $x + x_v$  es la que debe tenerse en cuenta para el cálculo de la desviación típica. Análisis de consecuencias: escape de sustancias peligrosas

# Emisiones más densas que el aire

Como se ha indicado más arriba, los mecanismos de dispersión de emisiones más densas que el aire (ya sea debido al peso molecular de la sustancia emitida, a la temperatura de la emisión o a la presencia de aerosoles) incluyen una primera etapa de aceleración y/o dilución iniciales, seguida de un período en el que predomina la flotación negativa y finalmente, tras posterior dilución y/o intercambio de calor, la transición a la fase dominada por la turbulencia ambiental, o de flotación neutra. Los regímenes anteriores no están bien definidos y sin duda existen solapamientos entre las distintas etapas, cuya extensión difiere para distintos escenarios.

La dispersión de gases densos presenta numerosas características diferenciadoras con respecto a la de las emisiones de flotación neutra o positiva, lo que hace inapropiado el uso de los modelos derivados para éstas, mientras persista la característica de una densidad mayor que la del aire. En particular, tal y como se esquematiza en la figura 4.10, cerca de la fuente de la emisión ésta se extiende bajo la acción de la gravedad, de manera análoga a como lo haría un derrame de líquido. En estas condiciones la nube de gas adopta una forma aplanada, fluye sobre obstáculos en el terreno y puede extenderse parcialmente en dirección contraria al viento. La diferencia de densidades dificulta además la mezcla con el aire. Cuando ésta finalmente se produce, tiene lugar con un gradiente de densidades similar al descrito para una inversión térmica, lo que también reduce la mezcla en dirección vertical. Todos estos efectos reducen la dispersión, y tienden a aumentar las concentraciones a una distancia determinada de la fuente con respecto a las que se obtendrían en una emisión de flotación neutra o positiva.

Durante la etapa de dominio de la flotación negativa, la influencia relativa de la gravedad y de la turbulencia ambiental viene indicada por el número de Richardson,  $R_i$ , definido como el cociente entre la energía potencial de la nube y la energía de la turbulencia ambiental. Se han propuesto expresiones ligeramente distintas para  $R_i$ . Una de las formulaciones propuestas es (8):

$$R_i = g \frac{\rho_p - \rho_a}{\rho_a} \frac{(V_o)^{1/3}}{(u^*)^2} \quad \text{(para emisiones instantáneas)} \qquad [4.50]$$

$$R_i = g \frac{\rho_p - \rho_a}{\rho_a} \frac{V'_o}{(u^*)^2 u d} \quad \text{(para emisiones continuas)} \qquad [4.51]$$

donde  $\rho_p$  y  $\rho_a$  son, respectivamente, las densidades de la emisión densa y del aire circundante,  $V_o$  es el volumen inicial de la nube instantánea (m<sup>3</sup>),  $V'_o$  el flujo inicial en una emisión continua (m<sup>3</sup>/s), d el diámetro del orificio, u la velocidad del viento y  $u^*$  la denominada velocidad de fricción, que se calcula como la raíz cuadrada del flujo de cantidad de movimiento superficial dividido por la densidad (8). La relación entre los valores de u y  $u^*$  depende principalmente de la rugosidad del terreno. Un valor típico (11) es  $u^*/u = 0,1$ .

En el caso de que la nube contenga aerosol (lo que puede dar lugar al comportamiento denso en nubes formadas por gases más ligeros que el aire), el valor de la densidad de la nube puede obtenerse de manera aproximada, suponiendo que el aerosol ocupa una pequeña fracción del volumen total como

$$\rho_{p} = (P/R, T) + \rho_{aer} \qquad [4.52]$$

donde  $p_{der}$  es la masa de aerosol por unidad de volumen de la nube y R' está dada por

$$R^{3} = \Sigma \left( m_{i}/m \right) \left( R_{g}/M_{i} \right)$$
[4.52b]

donde el sumatorio se extiende a todos los componentes de la mezcla,  $m_j$  es la masa del componente gaseoso j en la nube, m la masa total de ésta,  $M_j$  el peso molecular del gas j y  $R_g$  la constante universal de los gases.

Las ecuaciones [4.50] y [4.51] son útiles para la predicción del régimen de dispersión de la nube densa. Aunque existe una incertidumbre considerable en cuanto al valor crítico del número de Richardson que separa el predominio de la turbulencia ambiental y el predominio de los efectos de la gravedad, suele aceptarse un valor del orden de 10. Un valor superior indica que es necesario utilizar modelos de gas denso.

#### Extensión inicial de la nube densa

Un modelo realista para emisiones densas requeriría, además de la dinámica intrínseca de dispersión de la nube densa, la consideración de la influencia de los fenómenos esquematizados en la figura 4.5, y en concreto, al menos, de los siguientes: evaporación y condensación de gotas en la nube, intercambio de calor y en su caso materia con el terreno, reacciones químicas e intercambio de calor por radiación. Aunque los modelos actuales están aún lejos de considerar estos fenómenos en toda su complejidad, y, por lo general, contemplan tan sólo casos simplificados, se remite al lector a la bibliografía especializada o a los simuladores comerciales específicos para el tratamiento más riguroso de la dispersión de nubes densas. El desarrollo sencillo que se expone a continuación se centrará en la dispersión de una nube densa para la cual se supone que los fenómenos anteriores no están presentes de manera significativa.

Una nube de gas denso tiene límites bien definidos en comparación con una de flotación neutra. Van Ulden (22) propuso describir la extensión de la nube densa con una ecuación análoga a la que describe el movimiento de un frente de agua tras la ruptura de un dique de contención. Suponiendo una nube densa con forma de cilindro vertical de radio R y altura  $h_F$ , la velocidad horizontal del borde de la nube viene dada por (8):

$$\frac{dR}{dt} = c \sqrt{\frac{gV^{1/3}(\rho_p - \rho_a)}{P_a}}$$
[4.53]

siendo V el volumen de la nube en un instante dado. Se ha encontrado experimentalmente que la constante de proporcionalidad c en la ecuación anterior está proxima a la unidad. En el caso de una emisión instantánea sin transferencia de calor significativa entre la nube y los alrededores, de la ecuación anterior puede obtenerse (8):

$$R^{2} = (R_{o})^{2} + 2t \sqrt{\frac{g(V_{o})^{1/3}(\rho_{p} - \rho_{a})_{o}}{\rho_{a}}}$$
[4.54]

La ecuación anterior ha mostrado una buena concordancia con los datos experimentales tras los instantes iniciales de formación del frente (25).

A medida que la emisión densa se extiende, su concentración va disminuyendo. La dilución está determinada por la velocidad de entrada de aire en la nube. Existen varios modelos semiteóricos que predicen la dilución y permiten el cálculo de la altura de la nube, pero su discusión está fuera del ámbito de este texto. Aquí se expone únicamente un resultado obtenido a partir del uso combinado del análisis dimensional y observaciones experimentales realizadas sobre emisiones instantáneas de Freón (8), que proporciona la dilución de la nube a medida que se desplaza:

$$\frac{V}{V_o} = \left[\frac{x}{V_o^{1/3}}\right]^{3/2}$$
[4.55]

Donde x es la distancia en la dirección del viento, medida a partir del punto en que se produce la emisión instantánea. La expresión anterior es válida sólo para la dilución de emisiones densas a distancias mayores que  $(V_o)^{1/3}$ . A pesar de su simplicidad, la ecuación [4.55] predice adecuadamente los resultados de muchas observaciones experimentales, siempre que se esté dentro de la etapa en la que predomina la flotación negativa de la nube sobre la turbulencia ambiental.

# Transición a flotación neutra o positiva

Tras un cierto tiempo (emisiones instantáneas), o a una cierta distancia del punto de descarga (emisiones continuas), la dilución de la emisión por el aire ambiente es tal que los efectos de densidad dejan de ser significativos y la nube se comporta como una emisión neutra, con lo que se pueden aplicar las ecuaciones vistas para este caso, seleccionando adecuadamente las condiciones iniciales.

El criterio para determinar el momento en que se produce la transición sigue siendo objeto de discusión en la actualidad. Por ejemplo, algunos modelos consideran que la transición tiene lugar cuando la perturbación de densidad ( $\rho_p - \rho_a$ )/ $\rho_a$  cae por debajo de un valor arbitrario, tal como 0,01 ó 0,001; en otros casos el criterio de transición es que el número de Richardson local caiga por debajo de un valor crítico que suele estar entre 1 y 10. Por último, otros modelos manejan comparaciones entre la velocidad del frente denso y la velocidad de fricción, siendo la igualación de ambas un criterio frecuentemente utilizado para la transición.

Cualquiera que sea el criterio elegido, tras la transición pueden emplearse las ecuaciones del modelo gaussiano de dispersión para describir la evolución posterior de la emisión. El modelo gaussiano se aplica utilizando una fuente virtual que sustituya la nube en estado de transición por una emisión gaussiana equivalente. Los parámetros de dispersión en el punto de transición se estiman como (8): Análisis de consecuencias: escape de sustancias peligrosas

$$\sigma_r = 0.707 \ h_F$$
 [4.56a]

$$\sigma_{v} = 0,707 R$$
 [4.56b]

En el caso de emisiones instantáneas, la desviación típica en la dirección del viento  $\sigma_x$  se obtiene también de la ecuación [4.56b]. Conocidas las desviaciones en el punto de transición se calcula una distancia virtual como se ha expuesto con anterioridad, con lo que las ecuaciones del modelo gaussiano pueden aplicarse sobre la distancia corregida.

#### Ejemplo 4.4:

Una fuga en una conducción de una planta química provoca la emisión de 0,20 kg/s de amoníaco en fase vapor, con una altura efectiva de 15 metros sobre el terreno circundante, que es un campo abierto. La velocidad del viento es de 7m/s y la fuga se produce de noche, con una temperatura de 15° C. a) Calcular la máxima concentración en un punto situado a 0,5 km de la fuente. b) Calcular la concentración en un punto a ras de suelo, con las coordenadas (500, 50, 0).

a) La emisión se produce en fase gas, y en vista de las condiciones atmosféricas no es de esperar condensación (punto de ebullición normal igual a -34° C). En el caso planteado y = 0, y z = H = 15, ya que la concentración máxima ocurre sobre el eje de la emisión. La clase de estabilidad es D (neutra), cualquiera que sea el cubrimiento (ver tabla 2), puesto que la emisión es nocturna y la velocidad del viento es mayor que 6 m/s. En estas condiciones a = 0,128, b = 0,905, c = 0,20, d = 0,76. No es necesario corregir por la rugosidad del terreno, ya que éste corresponde precisamente a z = 0,1. El caso planteado (perforación de una conducción), corresponde bastante bien a la emisión de una fuente puntual. A la distancia considerada, las desviaciones típicas se calculan con la ecuación [4,41] como:

 $\sigma_{v} = 0,128(500)^{0,905} = 35,5 \text{ m}; \sigma_{z} = 0,20(500)^{0,76} = 22,5 \text{ m}$ 

Sustituyendo en la ecuación [4.40] con H = 15 m,  $Q^* = 0.2$  kg/s y U = 7 m/s, se obtiene a 500 metros una concentración de 8.0 × 10<sup>-6</sup> kg/m<sup>3</sup>, es decir, unas 11 ppm.

#### Ejemplo 4.4 (continuación):

En la figura 4.14 se presentan los resultados de la aplicación de un modelo comercial relativamente simple (CHEMS-PLUS 2.0 de Arthur D. Little Inc.), en condiciones equivalentes a las del ejemplo planteado. La gráfica muestra la variación de la concentración en el eje de la emisión con la distancia. El modelo predice que dentro de un radio de 265 m se alcanzan concentraciones superiores al valor TLV para esta sustancia (ver capítulo 5). Para una concentración de 11 ppm la distancia calculada por el modelo es de 505 m, en muy buena concordancia con la estimada anteriormente.

b) z = 0, x = 500, y = 50. Sustituyendo valores en la ecuación [4.40], se obtiene un valor de concentración igual a  $3,38 \times 10^{-6} \text{ kg/m}^3$ .



Figura 4.14. Variación de la concentración en el eje de la emisión con la distancia para el ejemplo 4.4.

#### Ejemplo 4.5:

Repetir los cálculos del caso a) en el ejemplo 4.4 si el terreno es heterogéneo, distribuyéndose los 500 m de distancia de acuerdo con los siguientes parámetros de rugosidad relativa: 200 m con  $z_0 = 1,0, y$  300 m con  $z_0 = 0,1$ .

Se utiliza el método de la fuente virtual. Para los primeros 200 m se usa la rugosidad  $z_o = 1,0$ , lo que permite calcular la desviación típica al cabo de esa distancia tras la corrección por rugosidad del terreno distinta de 0,1, de acuerdo con las ecuaciones [4.42]:

 $m = 0.53(200)^{-0.22} = 0.165; \sigma_{z,200} = 0.20(200)^{0.76}(10)^{0.165} = 16.4 \text{ m}$ 

Ahora se puede calcular la distancia virtual  $x_v$  que proporcionaría una desviación típica de 16,4 m al cabo de una distancia de 200 m, utilizando los parámetros correspondientes a una rugosidad de 0,1:

 $16,4 = 0,20 (x_v)^{0,76}$  y, por tanto,  $x_v = 330$  m con  $z_o = 0,1$ . La utilización de una fuente virtual con un terreno de las mismas características que el siguiente tramo heterogéneo implica que, al cabo de los 500 m de terreno heterogéneo se obtiene la misma desviación típica que al cabo de 300 + 330 m de terreno homogéneo con rugosidad 0,1. De esta forma,

$$\sigma_{z,500} = 0,20(630)^{0,76} = 26,8 \text{ m}$$

Utilizando este valor en la ecuación [4.40] juntamente con y = 0 y z = H = 15, se obtiene un valor de concentración  $C = 7,3 \times 10^{-6}$  kg/m<sup>3</sup>, inferior al calculado en el caso anterior, como consecuencia de la dispersión adicional debida a la mayor rugosidad de los primeros 200 m de terreno.

# Ejemplo 4.6:

La ruptura de un contenedor de gas provoca la emisión instantánea a ras de suelo de 40 kg de etano que se encuentran a temperatura ambiente (20° C). Calcular la distancia a la que puede producirse la explosión de la nube formada sabiendo que la velocidad del viento es de 4 m/s y las condiciones atmosféricas son estables (clase de estabilidad E).

Puesto que la emisión se efectúa a temperatura ambiente y el etano es un gas de peso molecular próximo al del aire, no son previsibles efectos de densidad importantes. La nube mantendrá una forma aproximadamente semiesférica, con su centro desplazándose a distancias x = Ut.

La explosión de la nube no se producirá a partir del momento en que la dilución por el aire rebaje la concentración en todos sus puntos por debajo del límite inferior de inflamabilidad. Para el etano este valor corresponde a una concentración del 3 por 100 en volumen de etano en aire (ver tabla 3.2), o bien a una concentración de 0,0375 kg/m<sup>3</sup> tomando una densidad de 1,25 kg/m<sup>3</sup> para el etano a 20° C.

La concentración máxima se encuentra en el centro de la nube; por tanto, es suficiente que la concentración en ese punto haya caído por debajo del límite inferior de inflamabilidad para que no se produzca la explosión. La ecuación [4.39] puede utilizarse para calcular la distancia a la que el centro de la nube, de coordenadas (Ut, 0, 0) adquiere una concentración de 0,0375 kg/m<sup>3</sup>. La ecuación [4.39] se reduce a

$$C = \frac{Q}{(2\pi)^{3/2}\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \{2\}.$$

Los valores de las desviaciones típicas se calculan con las ecuaciones [4.41] para la clase de estabilidad aplicable. De esta manera,

$$\sigma_x = 0.13 \ x; \ \sigma_y = (0.5)0.098 \ x^{0.902}; \ \sigma_z = 0.15 \ x^{0.73}$$

Sustituyendo estos valores junto con  $C = 0,0375 \text{ kg/m}^3 \text{ y}$ Q = 40 kg en la ecuación anterior y resolviendo, se obtiene

# Ejemplo 4.6 (continuación):

x = 90,6 m. Por tanto, a distancias menores que 90,6 m puede producirse la explosión de la nube. Otra forma de visualizarlo es considerar que el centro de la nube recorre los 90,6 m en 90,6/4 = 22,65 s. La explosión no tiene lugar si durante aproximadamente 23 segundos la nube no encuentra una fuente de ignición en su camino.

# Cuestiones y problemas

4.1. La ruptura de una conducción da origen a un charco de líquido inflamable que se incendia. La radiación procedente del incendio no es demasiado importante, pero los gases que se originan en la combustión tienen una alta toxicidad. Discutir los datos necesarios para estimar la concentración de sustancias tóxicas en función del tiempo a una distancia determinada del incendio.

4.2. Un tanque contiene dimetilamina líquida en equilibrio con su vapor, a 25° C. Se produce una grieta en la pared del tanque con un área efectiva de 0,7 cm<sup>2</sup>. Calcular el estado físico de la emisión y el caudal de descarga en función del tiempo si la grieta está: a) 20 cm por encima y b) 20 cm por debajo del nivel de líquido inicial. Suponer una forma aproximadamente circular, con contorno de cantos vivos.

**4.3.** En un depósito conteniendo propano líquido se produce una perforación. Discutir el algoritmo de cálculo para obtener el caudal de descarga en función del tiempo, dependiendo de la posición de la perforación, de la temperatura del almacenamiento y de si el depósito puede considerarse isotermo durante la descarga o si, por el contrario, está bien aislado, con lo que la evaporación del propano produce un enfriamiento de la masa líquida remanente.

4.4. El CCPS (23) propone el siguiente problema: una bombona de gas contiene aire comprimido para utilizar en el detector FID de un cromatógrafo. Al cambiar la botella, el operario quita la cubierta de seguridad del cilindro y comienza a ajustar el regulador de presión cuando la bala de gases se le escapa cayendo al suelo. Durante la caída la válvula golpea el borde de la mesa, rompiéndose y exponiendo una abertura en la parte superior del cilindro de 5/8" de diámetro. El aire

almacenado se encuentra inicialmente a 75° F y 2.250 psi. Calcular el flujo inicial a través de la abertura. ¿Qué fuerza se ejerce sobre el cilindro a consecuencia del flujo? ¿Qué aceleración producirá? Calcular la velocidad y energía cinética cuando el cilindro alcanza la pared del laboratorio, a 20 m de distancia. La bala de gases pesa 140 lb y tiene un volumen interno de 1,5 ft<sup>3</sup>. Para simplificar, suponer que el empuje se mantiene constante mientras se mantenga flujo sónico, y que el aire se comporta como un gas ideal. Puede suponerse que la abertura da origen a una descarga en tobera con un coeficiente de descarga igual a 0,9.

4.5. Como consecuencia del colapso de un depósito de isobutano (p. eb. normal igual a  $-11,7^{\circ}$  C) se produce el vertido instantáneo de sus contenidos (80 m<sup>3</sup>), que se encontraban almacenados bajo presión a temperatura ambiente (20° C). Calcular la fracción de isobutano que sufre evaporación flash. Calcular la tasa de evaporación en función del tiempo si el derrame se produce sobre un suelo de cemento.

**4.6.** Una fuga en una conducción a 5 m de suelo provoca la emisión de 40 kg/min de cloro. Suponiendo que no existen efectos apreciables de densidad, calcular la concentración a distancias de 20, 80 y 200 m del punto de emisión en la dirección del viento para cada una de las distintas clases de estabilidad que pueden darse durante el día con una velocidad del viento de 3,2 m/s. Discutir la hipótesis de efectos de densidad despreciables. Estimar la región del espacio en la que predomina la flotación negativa.

4.7. Se produce la emisión instantánea de 12 kg de HCl gaseoso a ras de suelo. La velocidad del viento es de 3 m/s y la insolación moderada. Representar los contornos de la región del espacio dentro de la cual puede superarse el valor TLV-C (ver capítulo 5), que para la inhalación del HCl es de 5 ppm.

**4.8.** Representar la variación frente al tiempo de la concentración de HCl a la que se ve expuesta una persona de 1,70 m de altura situada en las coordenadas x = 100, y = 10, en las condiciones del problema anterior.

**4.9.** En este capítulo se han presentado modelos de dispersión simplificados, que no tienen en cuenta aspectos que frecuentemente se dan en la realidad. Discutir cómo se modificarían las concentraciones de una emisión continua: *i*) por la topografía del terreno (considerar tanto elevaciones montañosas como depresiones, en relación a emisiones de flotación positiva y negativa); *ii*) por la presencia de grandes masas de agua (lagos); *iii*) por la vegetación; *iv*) por precipitaciones de lluvia o nieve.

4.10. Un camión cisterna que transporta metanol sufre un accidente a consecuencia del cual se derrama la carga, extendiéndose hasta ocupar una superficie aproximadamente circular, de 55 m de diámetro. La temperatura ambiente es de 25° C, y la velocidad del viento de 2,7 m/s, con una clase de estabilidad tipo C. Utilizar el modelo de fuente virtual para calcular la concentración de metanol en un punto en la dirección del viento a 250 m del accidente.

# Bibliografia

- 1. PERRY, R. H., y GREEN, D. (Eds.): *Perry's Chemical Engineer's Handbook*, cap. 6, 6.<sup>a</sup> edición. Mc Graw-Hill. Nueva York (1984).
- 2. CROWL, D. A., y LOUVAR, J. F.: Chemical Process Safety, Fundamentals with Applications. Prentice Hall. Englewood Cliffs (1990).
- FAUSKE, H. K.; EPSTEIN, M., y GROLMES, M. A.: "Source Term Considerations in connection with Chemical Accidents and Vapor Cloud Modeling", *Proc. Int. Conf. on Vapor Cloud Modeling*, pp. 251-273. AIChE/CCPS. Nueva York (1987).
- 4. LEVENSPIEL, O.: Engineering Flow and Heat Exchange. Plenum Press. Nueva York (1984).
- 5. LEUNG, J. C.: AIChE Journal, 32, pp. 524-527 (1986).
- 6. FAUSKE, H. K.; EPSTEIN, M.; GROLMES, M. A. y LEUNG, J. C.: Plant Operation/Progress 5, pp. 205-208 (1986).
- 7. CCPS (CENTER FOR CHEMICAL PROCESS SAFETY): Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis. AIChE. Nueva York (1989).
- 8. HANNA, S. R., y DRIVAS, P. J.: Guidelines for use of vapor cloud dispersion models. AIChE/CCPS. Nueva York (1987).
- KLETZ, T.: «Unconfined Vapor Explosions», en Loss Prevention 11. Chemical Engineering Progress Technical Manual, AIChE. Nueva York (1977).
- OPSCHOOR, G.: Methods for the Calculation of the Physical Effects of the Escape of Dangerous Material (Liquid and Gases) (The Yellow Book). TNO, Directorate General of Labour. 2273 KH Vooburg, Holanda (1979).
- 11. SUTTON, O. G.: Micrometeorology. Mc Graw-Hill. Nueva York (1953).
- CHEMS-PLUS 2.0 Reference Manual. A. D. Little Inc. Cambridge, Massachussets (1991).
- VAN BUIJTENEN, C. J. P.: Methods for the Calculation of the Physical Effects of the Escape of Dangerous Material (Liquid and Gases) (The Yellow Book). TNO, Directorate General of Labour. 2273 KH Vooburg, Holanda (1979).

- LEES, F. P.: Loss Prevention in the Process Industries. Butterworth-Heinemann. Londres (1980).
- 15. TURNER, D. B.: Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates. U. S. Department of Health, Education and Welfare. Cincinaty (1970).
- HANNA, S. R.; BRIGGS, S. A., y HOSKER, R. P. (Jr.): Handbook on Atmospheric Diffusion. U. S. Department of Energy, Technical Information Center. Oak Ridge (1982).
- 17. AIChE/CCPS: Workbook of Test Cases for Vapor Cloud Source Dispersion Models. AIChE. Nueva York (1989).
- FINCH, R. N., y SERTH, R. W.: Hydrocarbon Processing, 69 (1), pp. 75-80 (1990).
- MINISTERIO DE INDUSTRIA Y ENERGÍA: Manual de Cálculo de Altura de Chimeneas Industriales. Centro de Publicaciones del Ministerio de Industria y Energía. Madrid (1987).
- 20. BRIGGS, G. A.: Plume Rise. AEC Critical Review Series, U. S. Atomic Energy Commission (1969).
- BRIGGS, G. A.: «Plume Rise Buoyancy Effects», en Atmospheric Science and Power Production. U. S. Departament of Energy, DOE/TIC-27601 (1984).
- 22. VAN ULDEN, P. A.: On the Spreading of a Heavy Gas Released Near the Ground. Proc. Int. Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries Symposium, pp. 221-226, (1974).
- 23. AIChE/CCPS: Safety, Health and Loss Prevention in Chemical Processes. Problems for Undergraduate Engineering Curricula. AIChE. Nueva York (1990).
- 24. PERRY, R. H., y GREEN, D. (Eds.): Perry's Chemical Engineer's Handbook, cap. 12, 6.ª edición. Mc Graw-Hill. Nueva York (1984).
- BRIGHTON, P. W.; PRINCE, A. J., y WEBBER, D. M.: Journal of Hazardous Materials 11, pp. 155-178 (1985).