



INSTITUTO TECNOLÓGICO DE CELAYA

---

---

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

“Distribución óptima de facilidades industriales con emisión  
de gases tóxicos usando sistemas de mitigación”

POR

CHRISTIAN OLIVER DÍAZ OVALLE

**TESIS PRESENTADA AL DEPARTAMENTO DE  
INGENIERÍA QUÍMICA COMO REQUISITO  
PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO DE**

**DOCTOR EN CIENCIAS  
EN INGENIERÍA QUÍMICA**

CELAYA, GTO., AGOSTO DE 2011

# **Distribución óptima de facilidades industriales con emisión de gases tóxicos usando sistemas de mitigación**

Presentado por  
Christian Oliver Díaz Ovalle

## **RESUMEN**

En este trabajo se propone un modelo de mitigación capaz de definir las características de la nube una vez mitigada al aplicar una cortina de aire, agua o vapor de agua. El modelo requiere las condiciones de la nube antes de la mitigación, por lo cual se utiliza el modelo de dispersión *SLAB*. Los fundamentos del modelo son los balances de materia, especies, energía y momentum de forma puntual y en estado estacionario entre la nube en dispersión y el fluido mitigante. El modelo está formulado por ecuaciones algebraicas no-lineales cuya solución es posible usando el método de Newton; en cambio, el modelo *SLAB* es un conjunto de ecuaciones diferenciales cuya solución se obtiene usando el método de Runge-Kutta de 4to orden. Un análisis de sensibilidad se aplica a este modelo para determinar los parámetros de mayor afectación. Asimismo, los resultados obtenidos de un caso de estudio son comparados con los obtenidos con simulador de *CFD*.

La aplicación de sistemas de mitigación en la distribución de facilidades evita la obtención de distribuciones con separación extremadamente altas y asegura una reducción del daño a través de la reducción en la concentración. El modelo propuesto incluye restricciones geométricas y restricciones de riesgo. Las primeras evitan el traslape entre facilidades y logran una ubicación de estas dentro de la planta. Las segundas están basadas en determinar el costo de daño al personal y utilizan una función *probit*. Esta función determina la probabilidad de muerte bajo una concentración específica. La función objetivo es la suma de los costos de interconexión, terreno, daño al personal y mitigación. Este problema es formulado como mixto entero no-lineal, *MINLP*.

Un producto de este trabajo es el paquete *TROL*, el cual es una interfaz gráfica para determinar la distribución de facilidades a través de la interacción con GAMS y la solución numérica del modelo de mitigación. *TROL* fue desarrollado en *Visual C++ 2008* y en él fueron realizados los casos de estudio de este trabajo. Los resultados obtenidos por *TROL* han demostrado que los sistemas de mitigación aplicados al problema de distribución de facilidades industriales reducen notoriamente el costo y el riesgo.

**Dirigido por: Dr. Richart Vázquez Román.**

**Dedicada a:**

*Mi madre*

*Mi esposa*

*Mi abuela*

## **AGRADECIMIENTOS**

A Erika por todo...

Al Dr. Richart Vázquez por su gran apoyo, comprensión y enseñanza; en verdad que aprendí mucho de usted.

Al Dr. M. Sam Mannan por su apoyo durante mi estancia doctoral.

A doña Laura, profe Emilio, Mary y Laura.

A los doctores Francisco Javier Alvarado, Vicente Rico Ramírez y Gustavo Iglesias Silva por haber aceptado ser parte de este comité, lo cual es un honor para mí.

A los doctores Jesús Alberto Ochoa Tapia y Obet Marroquín de la Rosa por su apoyo técnico sobre el desarrollo del modelo de mitigación.

A los doctores Hans Pasma y Morshed Rana por su orientación sobre tópicos de riesgo y el desarrollo de mitigación en forma experimental.

Al ingeniero Raúl Lesso Arroyo por su apoyo en lo referente a *CFD*.

Al CONACyT y a la Universidad de Texas A&M por la ayuda recibida.

## Indice

Lista de Figuras .....	iii
Lista de Tablas .....	iv
Capítulo 1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. Nociones de seguridad de procesos .....	1
1.2. Antecedentes de distribución de equipos y facilidades industriales .....	6
1.3. Justificación.....	10
1.4. Hipótesis.....	10
1.5. Objetivo general .....	10
1.6. Objetivos particulares .....	10
1.7. Descripción de este trabajo.....	11
Capítulo 2. DISPERSION Y MITIGACIÓN DE GASES TÓXICOS .....	13
2.1. Fundamentos de micrometeorología.....	13
2.1.1. Perfil vertical de temperatura.....	14
2.1.2. Perfil de velocidad y el efecto del terreno .....	16
2.1.3. Condición atmosférica.....	20
2.1.4. Definición del peor escenario atmosférico .....	22
2.2. Modelos de dispersión .....	23
2.2.1. Dispersión pasiva .....	24
2.2.2. Dispersión densa .....	27
2.2.3. Fundamentos de <i>CFD</i> y su aplicación en la dispersión de gases .....	29
2.3. Modelo de dispersión <i>SLAB</i> .....	32
2.4. Mitigación como herramienta en la reducción del impacto de accidentes .....	39
2.4.1. Mitigación con efecto de supresión.....	39
2.4.2. Mitigación con efecto de dilución.....	40
2.4.3. Mitigación con efecto de absorción .....	42
Capítulo 3. MODELADO DE LA MITIGACIÓN DE GASES TÓXICOS .....	44
3.1. Modelos en la mitigación de gases tóxicos .....	44
3.2. Consideraciones y suposiciones en el desarrollo de los modelos de mitigación .....	47
3.3. Modelado de una cortina de aire.....	51
3.4. Modelado de una cortina de agua .....	57
3.5. Modelado de una cortina de vapor.....	63

3.6. Caso de estudio de los modelos de mitigación .....	64
3.8. Análisis de sensibilidad de modelos de mitigación .....	66
3.7. Comparación de resultados en los modelos de mitigación con CFX.....	71
Capítulo 4. DISTRIBUCIÓN DE FACILIDADES INDUSTRIALES .....	76
4.1. Distribución de facilidades para reducir el riesgo de accidentes .....	76
4.2. Definición del problema.....	77
4.3. Modelado Geométrico.....	79
4.3.1. Restricciones del terreno .....	80
4.3.2. Restricciones de traslape .....	81
4.4. Restricción por distancias Mecklenburgh .....	82
4.5. Restricción del riesgo por dispersión de gases tóxicos .....	83
4.6. Restricción al aplicar sistemas de mitigación en la distribución de facilidades .....	86
4.6.1 Restricciones cuando una facilidad instalada tiene emisión y una facilidad nueva personal ....	91
4.6.2 Restricciones cuando una facilidad nueva tiene emisión y una facilidad instalada personal ....	93
4.6.3 Restricciones cuando una facilidad nueva tiene emisión y otra facilidad nueva personal .....	95
4.7. Función objetivo .....	98
Capítulo 5. CASOS DE ESTUDIO: PROGRAMA <i>TROL</i> .....	101
5.1. Programas referentes a la distribución de equipos y facilidades .....	101
5.2. Arquitectura del programa <i>TROL</i> .....	103
5.3. Caso de estudio 1 .....	106
5.4. Caso de estudio 2 .....	111
5.5. Caso de estudio 3 .....	114
Capítulo 6. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO .....	118
6.1. Conclusiones .....	118
6.2. Trabajo futuro.....	120
Referencias.....	122

## Lista de Figuras

Figura 1.1	Árbol de fallas para un sistema de bombeo. ....	4
Figura.1.2	Árbol de eventos para una emisión de un gas. ....	4
Figura 1.3	Definición de las distancias geométricas entre unidades. ....	8
Figura 2.1	Perfil vertical de temperatura. ....	14
Figura 2.2	Perfil de velocidad vertical y esfuerzo cortante en la capa límite atmosférica. ....	17
Figura 2.3	Perfiles aproximados de temperatura en la capa límite terrestre para la determinación de la condición atmosférica. (1) Perfil adiabático. (2) Perfil subadiabático, condición atmosférica inestable. (3) Perfil superadiabático, condición atmosférica estable. (4) Perfil isotérmico, condición atmosférica neutra. (5) Perfil de inmersión térmica. ....	21
Figura 2.4	Cualidades de dispersión pasiva. A. Sinuosidad. B. Ángulo de apertura. C. Inmersión. ....	25
Figura 2.5	Comportamiento de una dispersión densa. (1) Turbulencia por la emisión. (2) Efectos por la aceleración de la emisión. (3) Efecto de la densidad. (4) Dispersión densa a baja altura. (5) Comportamiento pasivo. ....	27
Figura 2.6	Descripción de la nube de dispersión planteada para el modelo <i>SLAB</i> . ....	33
Figura 2.7.	Cortina de vapor para mitigar gases inflamables, tomada de Mecklenburgh (1985). ....	41
Figura 3.1	Sistema para el modelado de mitigación planteado por Moore y Rees (1981). ....	45
Figura 3.2	Sistema para el modelado de mitigación propuesto por Favari <i>et al.</i> (1984) ....	46
Figura 3.3	Área transversal al flujo del fluido mitigante propuesta. ....	48
Figura 3.4	Resultados obtenidos por los modelos de mitigación sobre un caso de estudio específico. ....	66
Figura 3.5.	Simulación en <i>CFD</i> de la forma cónica de aire al salir de la boquilla de la parte inferior. ....	72
Figura 3.6.	Comparación de los resultados del caso de estudio y el <i>CFD</i> para la mitigación con aire. ....	73
Figura 3.7.	Comparación de los resultados del caso de estudio y el <i>CFD</i> para la mitigación con agua. ....	74
Figura 3.8.	Comparación de los resultados del caso de estudio y el <i>CFD</i> para la mitigación con vapor. ..	75
Figura 4.1	Descripción de la restricción del terreno. ....	80
Figura 4.2	Regiones de posible ubicación de una nueva facilidad <i>s</i> alrededor de otra facilidad <i>k</i> . Imagen tomada de (Vázquez-Román et al., 2010). ....	81
Figura 4.3	Representación de las distancias usadas en la reducción de concentración entre facilidades. ..	87
Figura 4.4.	Isopleta de concentración de 3ppm para una emisión de gas cloro que demuestra mayor precisión al incluir la distancia de mitigación para cada dirección. ....	88
Figura 5.1	Interfaz del programa <i>TROL</i> . ....	104
Figura 5.2	Diagrama de flujo del funcionamiento del programa <i>TROL</i> . ....	105
Figura 5.3	Comparación de resultados al aplicar o no distancias Mecklenburgh en Caso de Estudio 1. .	108
Figura 5.4	Comparación de la omisión y aplicación de mitigación para el Caso de Estudio 1. ....	110
Figura 5.5	Comparación de la omisión y aplicación de mitigación para el Caso de Estudio 2. ....	114
Figura 5.6	Comparación de la omisión y aplicación de mitigación para el Caso de Estudio 3. ....	117

## Lista de Tablas

Tabla 2.1 Valores de la longitud de rugosidad en distintos terrenos (McRae <i>et al.</i> , 1982). .....	20
Tabla 2.2 Relación del número de Richardson, índice $p$ y las condiciones atmosféricas. ....	22
Tabla 2.3 Parámetros de dispersión ( $\sigma_z$ y $\sigma_y$ ) a una distancia $x$ tomados de Crowl y Louvar (2002). ....	26
Tabla 3.1 Propiedades para algunos gases densos considerados tóxicos. ....	52
Tabla 3.2 Valores de significancia para la cortina de aire. ....	69
Tabla 3.3 Valores de diferencias para la cortina de agua. ....	70
Tabla 3.4 Valores de diferencias para la cortina de vapor. ....	71
Tabla 4.1 Distancias mínimas entre facilidades tomada de Mecklenburgh (1985). ....	82
Tabla 5.1 Características de las facilidades para el Caso de Estudio 1. ....	107
Tabla 5.2 Resultados de las distribuciones geométricas en el Caso de Estudio 1. ....	109
Tabla 5.3 Resultados de aplicar y omitir los sistemas de mitigación en el Caso de Estudio 1. ....	110
Tabla 5.4 Características de las facilidades instaladas para el Caso de Estudio 2. ....	111
Tabla 5.5 Características de las facilidades nuevas para el Caso de Estudio 2. ....	111
Tabla 5.6 Resultados de aplicar y omitir los sistemas de mitigación en el Caso de Estudio 2. ....	113
Tabla 5.7 Características de las facilidades instaladas para el Caso de Estudio 3. ....	115
Tabla 5.8 Características de las facilidades nuevas para el Caso de Estudio 3. ....	115
Tabla 5.9 Resultados de aplicar y omitir los sistemas de mitigación en el Caso de Estudio 3. ....	117



## **Capítulo 1. INTRODUCCIÓN**

El capítulo presente inicia con una breve descripción sobre la seguridad de procesos químicos, considerando algunos conceptos, casos históricos y metodologías. Adicionalmente, los fundamentos de la distribución de facilidades y algunos trabajos representativos son enunciados como parte de esta introducción. Finalmente, los objetivos, la justificación y la descripción de este trabajo son definidos.

### **1.1. Nociones de seguridad de procesos**

La evolución de los procesos químicos aumentó su susceptibilidad a accidentes industriales. En esta evolución es notorio el aumento en la complejidad de los procesos. Esto se debe al manejo de altas presiones y temperaturas con el fin de incrementar la pureza del producto. Un factor adicional a esta evolución es el crecimiento de las plantas, ya que se aumenta el almacenaje de compuestos químicos y por ende la susceptibilidad a accidentes de alto impacto. La reducción de este tipo de accidentes ha sido posible al aplicar metodologías que reduzcan la frecuencia de ocurrencia y la severidad del impacto. Lamentablemente, la cantidad de accidentes industriales es un indicador de la insuficiente aplicación de dichas metodologías (Kletz, 2009).

Los accidentes industriales indican la necesidad de mejorar la seguridad en las plantas químicas. Algunos accidentes han sido tragedias industriales y su enseñanza modifica la percepción sobre la industria química. Un caso que no debe ser olvidado ocurrió en Bhopal, India, el 3 de diciembre de 1984, donde 2500 personas murieron mientras dormían por una emisión de metil-isocianato (Mannan, 2005). Otro ejemplo es el ocurrido en San Juan Ixhuatepec al norte de la ciudad de México, el 19 de noviembre de

1984, donde ocurrió una serie de explosiones en tanques de almacenamiento. Las consecuencias de este accidente fueron 400 personas fallecidas, la destrucción de la planta de almacenamiento y daños totales a viviendas cercanas a la planta (Mannan, 2005). Ambos accidentes muestran muchas de las deficiencias en seguridad que una planta química puede tener: mal administración, baja cultura de seguridad, desconocimiento de las condiciones de los equipos, problemas de comunicación y una mala ubicación de la planta y sus equipos (Bowonder, 1987, Crowl y Louvar, 2002).

La ocurrencia de distintos tipos de accidentes ha generado datos estadísticos suficientes para ser considerados en su prevención. La aplicación más importante de esos datos es la definición cuantitativa del riesgo del accidente; es decir, la medida de accidentes potenciales que cuentan con un escenario determinado (CCPS, 2000). Esta definición puede ser representada matemáticamente como:

$$R = \sum_i f_i \cdot C_i \quad (1.1)$$

donde  $R$  es la cuantificación del riesgo de tener un accidente con distintos causales  $i$ ,  $f_i$  es la frecuencia de ocurrencia del escenario  $i$ , mientras que  $C_i$  se refiere a las consecuencias de tal accidente en un escenario  $i$  (Modarres, 2006).

La obtención de la forma cuantitativa de riesgo es sumamente complicada ya que incluye toda la información existente de la planta, datos históricos y posibles consecuencias de los accidentes potenciales. Sin embargo, la obtención de una expresión rigurosa ayuda a tener una idea clara de la situación de la planta química y puede ser tomada en cuenta para modificaciones, toma de decisiones e inclusive para la creación de legislaciones y estándares.

La determinación de los posibles efectos de un escenario de accidente requiere el uso de modelos de consecuencias. Es decir, las características de las causas del accidente son consideradas para obtener el impacto del accidente expresado en daños al personal y a la propiedad. La cuantificación del impacto es obtenido a través de variables causales del escenario como lo son concentración de compuestos químicos

tóxicos, radiación térmica y sobrepresión (CPR, 2009).

El cálculo de las variables causales es totalmente independiente entre cada uno de los tipos de accidentes. La concentración de compuestos químicos tóxicos es medible espacialmente con modelos de dispersión de los cuales existe una cantidad considerable (Morawska, 2006). Estos modelos requieren el conocimiento de la cantidad del compuesto emitido, las condiciones atmosféricas y del gas durante su dispersión. A su vez, la cantidad de compuesto emitido requiere la aplicación de modelos de emisión que consideran las condiciones de almacenaje y fuga o ruptura en las que se desarrolla el escenario. Por otra parte, la radiación térmica mide el impacto de los accidentes industriales que presenten fuego y su cálculo depende de la cantidad de compuesto, calor de combustión y límites de flamabilidad. El modelado de fuego está basado en las dimensiones de la zona donde este ocurre, como lo representa el modelo de Roberts (CCPS, 1996). Los accidentes por explosión tienen a la sobrepresión como variable causal, cuya cuantificación es demasiado compleja debido a la influencia de la obstrucción que presentan obstáculos físicos. En este caso, la presión depende de la energía liberada en la reacción de combustión del compuesto en cuestión y su valor puede determinarse por el modelo de *TNT* (Crowl y Louvar, 2002), o el método semiempírico desarrollado por *TNO* (*Nederlandse Organisatie voor Toegepast Natuurwetenschappelijk Onderzoek*, Organización Holandesa de Investigación Científica Aplicada) descrito en el Libro Púrpura (CPR, 2005).

La frecuencia de ocurrencia de accidentes es definida como el producto de la frecuencia de falla de los equipos y la probabilidad de ocurrencia de eventos potenciales. El cálculo de la frecuencia inicia con identificar los equipos que puedan fallar como válvulas, bombas, indicadores, etc. Posteriormente, la técnica de árbol de fallas permite obtener la frecuencia del sistema usando álgebra booleana a partir de la secuencia lógica del sistema (Modarres, 2006). Una gran cantidad de datos sobre la frecuencia de falla de equipos han sido compilados en bases de datos disponibles comercialmente como el caso de *OREDA* (*Offshore RELiability DATA*, Datos de confiabilidad en plataformas). Adicionalmente, factores como mantenimiento, tiempo de uso y robustez pueden ser agregados para modificar la frecuencia de falla (CCPS,

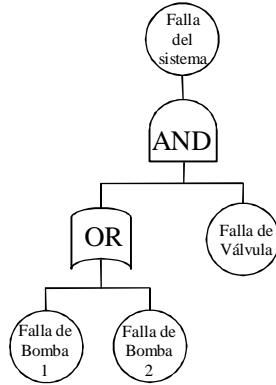


Figura 1.1 Árbol de fallas para un sistema de bombeo.

1989b). La Figura 1.1 muestra un ejemplo de un árbol de fallas que incluye el uso de operadores lógicos requeridos en el álgebra booleana, principalmente *OR* y *AND*.

El cálculo de la probabilidad de ocurrencia de eventos potenciales considera el tipo de accidente y sus consecuencias. La metodología usada es un árbol de eventos sobre el que se plantean los distintos escenarios potenciales (CCPS, 2000). La Figura.1.2 muestra el caso en que un charco de líquido inflamable genera varios escenarios potenciales. Entre estos escenarios está la posibilidad de formar una nube de gas y la generación de fuego. Además, la Figura.1.2 incluye la formulación del cálculo de las probabilidades en los distintos escenarios donde la probabilidad total es la suma de las probabilidades.

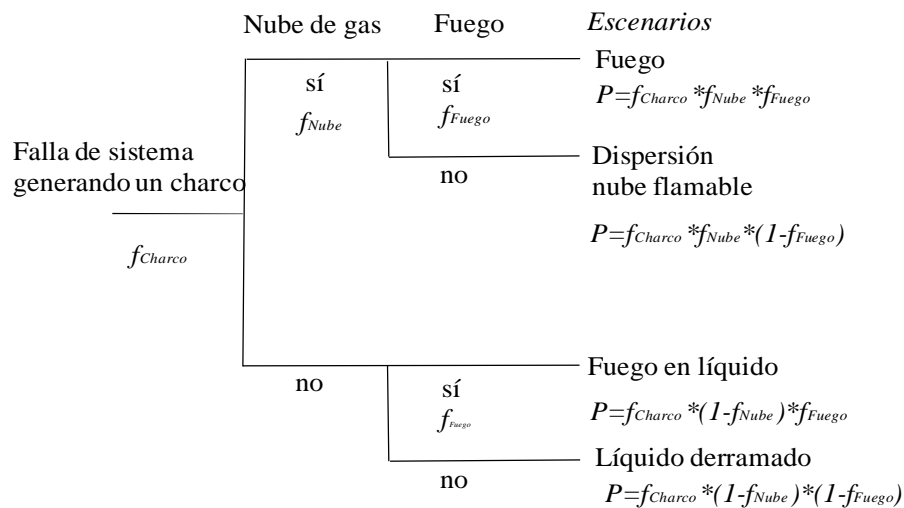


Figura.1.2 Árbol de eventos para una emisión de un gas.

El problema fundamental del análisis de riesgo en los procesos químicos es la determinación de los accidentes potenciales en una planta. Esto debe anteceder al desarrollo de un cálculo cuantitativo del riesgo. Muchas de las herramientas efectivas para llevar a cabo el conocimiento de accidentes potenciales están basadas en la experiencia previa sobre accidentes, aunque es necesario el conocimiento del proceso y su instrumentación, la dirección de la empresa y el comportamiento del personal (Crowl y Louvar, 2002). Entre las herramientas mencionadas se encuentra el estudio de riesgo y operatividad (*HAZOP* por sus siglas en inglés) el cual identifica los accidentes y fallas potenciales para proponer sistemas de prevención y mitigación. El *HAZOP* requiere del conocimiento de diagramas de flujo y diagramas de control e instrumentación de manera detallada, así como especificaciones de los equipos, materiales y balances de materia y energía. La aplicación del *HAZOP* requiere a un grupo de expertos en áreas de seguridad, proceso e instrumentación que analicen de manera sistemática todas las posibles fallas que pudieran ocurrir para proponer soluciones (CCPS, 1992). Otras herramientas similares son el análisis de fallas posibles en los equipos de proceso y el análisis de consecuencias el cual es aplicado para responder a la pregunta *¿qué pasa si...?* (Mannan, 2005).

Lo anterior describe brevemente la herramienta conveniente para determinar el riesgo potencial en una industria que se resume en un proceso para conocer las causas del accidente, obtener frecuencias de ocurrencia y calcular las consecuencias. Sin embargo, existen accidentes que demuestran particularidades para la reducción del riesgo, como aquellos que requieren mejoramiento en la dirección de la empresa y la cultura de seguridad en el trabajo. Por otra parte, un análisis sobre la aplicación de las herramientas para reducir el riesgo permite minimizar la frecuencia de los accidentes a través de su prevención, y la intensidad de las consecuencias en accidentes a través de la mitigación. En muchos de los casos la modificación del diseño de procesos y los sistemas de operación logran este objetivo a través de la seguridad inherente (Pietersen y van het Veld, 1992).

La aplicación de la mitigación se lleva a cabo durante el momento del accidente y es válida de diferentes maneras; por ejemplo, en industrias donde el fuego es su potencial accidente se utiliza un sistema de asperjado con agua como mitigante. Los sistemas de mitigación no son recomendables en acci-

dentos por explosión por lo cual es necesario aplicar sistemas de prevención. Sin embargo, en el caso de emisiones potenciales de gases tóxicos los sistemas de mitigación pueden proporcionar una reducción sobre el impacto a través de la reducción de la concentración. Tales sistemas se seleccionan en función del comportamiento entre el fluido mitigante y el mitigado (Meroney, 1993) y su diseño es formulado con el fin de aumentar la eficiencia para reducir la concentración (Molag *et al.*, 2001). Los sistemas pueden ser espumas mitigantes de alta o baja expansión para líquidos derramados altamente volátiles (Hiltz, 1982), y cortinas de aire o agua con efectos sobre la nube de gas denso como barrera física (McQuaid y Fitzpatrick, 1983), dilución (Faveri *et al.*, 1984, Dimbour *et al.*, 2003a) o absorción (Schatz y Fthenakis, 1994). Actualmente, el desarrollo de sistemas de mitigación ha sido basado en la experiencia y experimentación debido a que los efectos entre los fluidos complican el desarrollo de modelos que predigan el comportamiento del fenómeno con alta precisión (CCPS, 1997).

La prevención de accidentes está basada en diseñar con robustez los equipos y sistemas de control definido como seguridad inherente. Por otra parte, la experiencia ha mostrado que la distribución de equipos y facilidades industriales es una herramienta efectiva para este fin (Mecklenburgh, 1985). La distribución de equipos y facilidades toma en cuenta distancias de separación que ayudan a reducir el riesgo potencial las cuales provienen de la experiencia en accidentes (Mecklenburgh, 1985). Sin embargo, la mayoría de las compañías siguen sus propios estándares de separación entre los equipos y facilidades industriales. La distribución de facilidades toma en cuenta el costo de instalación, el terreno ocupado, la tubería de interconexión, el cableado y todos aquellos factores que impacten en el presupuesto de diseño. Desafortunadamente, las aproximaciones heurísticas no aseguran la obtención de un costo mínimo en el presupuesto de diseño y, algunas veces, han mostrado irregularidades a los requerimientos de seguridad (Dreux, 2005). Por tal motivo, una propuesta ha sido el uso de modelos matemáticos para resolver el problema de la distribución.

## **1.2. Antecedentes de distribución de equipos y facilidades industriales**

El problema de determinar la ubicación de puntos de suministro de materia prima y recepción fue

la base de la distribución de equipos y facilidades industriales. En un inicio la solución del problema solo tuvo interés en los tiempos de entrega y los costos de transporte (Francis y White, 1974). Una propuesta inicial de la distribución de equipos se basó en arreglos departamentales donde se definen valores de importancia entre la interconexión de las unidades de cada departamento. Así, un conjunto de unidades  $I$  con interconexiones entre sí tiene un valor peso,  $c_{ij}$ , asociado a cada una de estas unidades.

La solución de la distribución de facilidades requiere como objetivo la reducción del terreno a ocupar, la tubería y la estructura sobre la que se instalarán los equipos. Una propuesta a esto es definir una función objetivo como la suma del costo de cada uno de estos rublos para poder minimizarla (Schmidt-Traub et al., 1999). Sin embargo, los primeros planteamientos sobre la distribución de equipos no consideraron esta propuesta, y solo están basados en el uso de valores peso entre los equipos que muestren interconexión. Así, las interconexiones son elegidas por una variable binaria,  $B_{ij}$ , la cual valdrá 0 si las unidades  $i$  y  $j$  no muestran conexión (Armour y Buffa, 1963). Así, la función objetivo es:

$$\min \sum_i \sum_{j \neq i} c_{ij} B_{ij}, \forall i, j \in I \quad (1.2)$$

El primer problema de la distribución fue extendido para obtener soluciones realistas lo cual incluyó las restricciones de distancia entre las unidades y del terreno. Sin embargo, algunas formulaciones mantuvieron las aproximaciones heurísticas, como lo indican Gunn y Al-Asadi (1987) para una planta de poliestireno. Las restricciones de la distancia mostraron una precisión mayor en la solución y la disminución del número de iteraciones. Esto dependió del tipo de distancia considerada, pues la distancia rectilínea es una función lineal a diferencia de la euclidiana. Además, esto es un factor importante en la existencia de problemas de convexidad en el problema. La Figura 1.3 muestra gráficamente la diferencia entre estas distancias consideradas de centro a centro en las unidades. La sencillez del problema lineal hizo que las propuestas iniciales lo consideraran (Heragu y Kusiak, 1991). Por otra parte, las restricciones del terreno están enfocadas a ubicar unidades dentro de este y fueron aplicadas al problema lineal (Heragu,

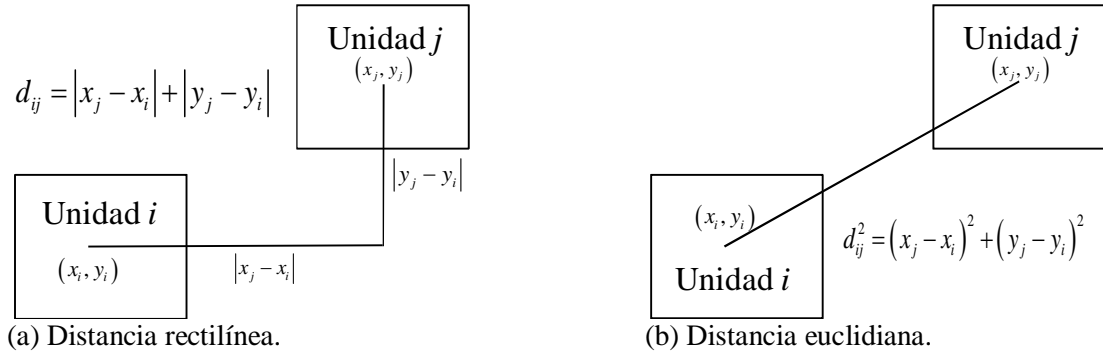


Figura 1.3 Definición de las distancias geométricas entre unidades.

1992). Así, una unidad no saldrá del terreno asignado y su coordenada será menor a la máxima distancia posible y mayor a cero, de tal forma que

$$\begin{aligned} u_i &\leq Lu \\ u_i &\geq 0 \end{aligned} \tag{1.3}$$

donde  $u$  indica una coordenada de una facilidad  $i$  dentro de terreno con longitud  $Lu$  en la coordenada  $u$ .

Las restricciones adicionales para el modelo están definidas para evitar que una unidad ocupe el mismo lugar que otra, esto es conocido como restricciones de traslape. La gran cantidad de posibilidades para ubicar una unidad respecto a otra produjo una complejidad en la formulación matemática del problema. Una formulación fue propuesta por Papageorgiou y Rotstein (1998) la cual evita el traslape de unidades y ubica una respecto a la otra en distintas posibles locaciones. La formulación considera a  $lx$  y  $ly$  como las dimensiones de cualquier unidad,  $i$  o  $j$ , en las coordenadas  $x$  y  $y$  tal que la restricción para evitar el traslape se formula como:

$$\left. \begin{aligned} |x_j - x_i| &\geq \frac{lx_i + lx_j}{2} \\ |y_j - y_i| &\geq \frac{ly_i + ly_j}{2} \end{aligned} \right\}, \forall i \neq j \tag{1.4}$$



La aplicación de estas restricciones inició a un solo nivel en que las unidades pueden ser ubicadas y presenta la desventaja del uso de la función del valor absoluto la cual introduce dificultades numéricas y algunos resolvedores numéricos no permiten su uso. Un modelo con las restricciones de traslape en dos dimensiones fue planteado por Barbosa-Póvoa, *et al.* (2001). Esta propuesta introduce una libertad de giro para las unidades pero el uso de la distancia rectilínea generó una dificultad que fue resuelta a través de la inclusión de variables binarias generándose un problema mixto entero.

La extensión del problema a varios niveles fue posible considerando interconexiones de forma vertical debido al bombeo y al costo de los niveles, puesto que cada nivel tiene un área definida (Patsiatzis y Papageorgiou, 2002). De manera similar los problemas para tres dimensiones fueron formulados al incluir la coordenada  $z$  en la Ecuación (1.4) (Barbosa-Póvoa *et al.*, 2002). Las evoluciones más recientes de este tipo de problemas se dan en las propuestas de solución para  $n$  dimensiones donde las restricciones son planteadas de forma vectorial e incluyen un vector de costo para cada dimensión (Westerlund *et al.*, 2007). Además, otras soluciones han sido aplicadas en la inclusión de elevadores que conecten las unidades en multiniveles (Goetschalckx y Irohara, 2007).

Una propuesta para resolver el problema en varios niveles en dos dimensiones fue formulada por Georgiadis y Macchietto (1997) usando un espacio discreto y tomando en cuenta las restricciones de ubicación ya mencionadas. El modelo es planteado como programación mixta entera lineal (*MILP* por sus siglas en inglés) e incluye el costo de bombeo entre los equipos de forma horizontal y vertical, usando una distancia rectilínea entre los equipos. Adicionalmente, el problema considera suposiciones heurísticas sobre los equipos que contienen mayor interconectividad o mayor flujo de materia. El espacio discreto fue extendido a tres dimensiones y varios niveles, donde una serie de secciones del mismo tamaño y forma son parte de equipos de distinto tamaño y geometría (Georgiadis *et al.*, 1999).

El problema de agrupar unidades en facilidades fue resuelto al aplicar consideraciones heurísticas basadas en las necesidades entre una unidad y otra por medio de priorización. Así, una matriz que jerarquiza la importancia de las unidades fue aplicada por Green y Al-Hakim (1985). Por otra parte, el uso de conjuntos para las unidades permitieron realizar una formulación matemática a la que se incluyeron con-

sideraciones heurísticas (Foulds, 1983). En particular, la agrupación de equipos ha incluido métodos meta-heurísticos en su solución como la teoría de partición para la agrupación en un solo nivel (Jayakumar y Reklaitis, 1994) y multinivel (Jayakumar y Reklaitis, 1996).

La solución de los problemas anteriores se basa en la naturaleza de cada uno e implica formulaciones matemáticas de tipo lineal y no-lineal. Una serie de soluciones meta-heurísticas adicionales ha sido propuesta para problemas de mayor complejidad que emplean sistemas lógicos y dinámicos y es definida por Drira (2007).

### **1.3. Justificación**

En la actualidad, la existencia de accidentes industriales, como se indicó previamente, justifica la investigación para reducir el riesgo. Una estrategia aceptable consiste en llevar a cabo la distribución de equipos y facilidades lo cual incluye el mejoramiento de los sistemas de prevención. La distribución de facilidades ha mostrado una reducción del riesgo por accidentes cuando existe emisión tóxica.

### **1.4. Hipótesis**

La no aplicación de sistemas de mitigación en la distribución de facilidades industriales no reduce el impacto de accidentes industriales por emisión de gases tóxicos y el costo de la distribución.

### **1.5. Objetivo general**

Obtener la distribución óptima de facilidades industriales con emisión de gases tóxicos sobre los que se apliquen sistemas de mitigación.

### **1.6. Objetivos particulares**

Desarrollar un modelo de mitigación cuyos resultados sean aplicados en la optimización de distribución de facilidades.

Plantear una formulación matemática que permita la obtención de la distribución de facilidades industriales con emisiones de gases tóxicos y que considere la mitigación de estos.

### **1.7. Descripción de este trabajo.**

La descripción detallada de los fundamentos teóricos y resultados numéricos de este trabajo se da a lo largo de seis capítulos. El Capítulo 1, ya definido, describe de manera general nociones básicas de seguridad de procesos químicos, así como los antecedentes de la distribución de equipos y facilidades industriales. Ambos temas son considerados conceptos fundamentales de este trabajo.

El Capítulo 2 define los conceptos requeridos para la comprensión de la dispersión y la mitigación de gases tóxicos. Los fundamentos de micrometeorología forman parte de este capítulo para describir el fenómeno de dispersión considerando los perfiles verticales de velocidad y temperatura. El fenómeno de dispersión es también incorporado en este capítulo e incluye un conjunto de modelos de dispersión ya sea de forma pasiva o densa. Asimismo, una breve descripción del uso de Dinámica de Fluidos Computacional (*CFD* por sus siglas en inglés) en dispersión de gases es añadida. En particular, el modelo *SLAB* es definido al punto de describir su obtención ya que este modelo ha sido seleccionado para realizar las dispersiones de este trabajo. Finalmente, este capítulo describe los fundamentos de la mitigación de gases a través de los tres efectos físicos de mitigación: supresión, dilución y absorción.

El Capítulo 3 está enfocado en describir los modelos de mitigación desarrollados en este trabajo. Primeramente, este capítulo menciona los modelos desarrollados sobre mitigación de gases tóxicos. Posteriormente, las condiciones y características de la mitigación sobre la que se realizarán los modelos son planteadas. Los modelos desarrollados en este trabajo son un conjunto de balances de materia, energía y momentum aplicados a diferentes fluidos mitigantes, que en este caso son aire, agua y vapor. Las diferentes secciones de este capítulo están enfocadas en la descripción de los modelos para cada fluido. Posteriormente, un caso de estudio es incluido para mostrar la aplicabilidad y solución que presentan estos modelos. Adicionalmente un análisis de sensibilidad sobre los modelos es aplicado. El capítulo concluye con

una comparación de los resultados del caso de estudio usando el modelo propuesto y los resultados al aplicar *CFD*.

El Capítulo 4 está enfocado al modelado de la distribución de facilidades industriales e incorpora los modelos de mitigación desarrollados en el Capítulo tercero. Este capítulo inicia con la descripción del estado del arte sobre la distribución de facilidades industriales a las que se incluye el riesgo por accidentes industriales. Posteriormente, la definición del problema y la nomenclatura matemática son declaradas para el modelo de optimización. Consecutivamente se plantean las restricciones en el modelo referentes al terreno, evitar el traslape, distancias Mecklenburgh, riesgo por dispersión y sistemas de mitigación. Esta sección propone la generación de un problema mixto entero no lineal para la selección de los sistemas de mitigación. Finalmente, el capítulo muestra detalladamente la función objetivo propuesta para este problema.

El Capítulo 5 engloba un conjunto de casos de estudio que demuestran la aplicabilidad del modelo desarrollado en este trabajo. Un paquete computacional fue desarrollado para la resolución de este tipo de problemas con el cual fueron resueltos los casos de estudio. Así, el capítulo inicia con una descripción de los paquetes computaciones existentes para la solución de distribución de equipos y facilidades industriales. El paquete desarrollado es descrito en este trabajo en base a su arquitectura y aplicabilidad. El trabajo culmina con una serie de conclusiones y propuestas para trabajo futuro planteados en el Capítulo 6.

## Capítulo 2. DISPERSION Y MITIGACIÓN DE GASES TÓXICOS

Este Capítulo inicia con una introducción sobre micrometeorología para describir el comportamiento de la capa límite atmosférica a través de los perfiles de temperatura y velocidad. Por otra parte, una serie de modelos de dispersión son enunciados y clasificados según el tipo de dispersión ya sea pasiva o densa. El capítulo cuenta con una subsección referente al uso de *CFD* en la dispersión de gases. En particular, el capítulo incluye una breve descripción de la deducción del modelo *SLAB* el cual ha sido seleccionado para el desarrollo de las dispersiones de este trabajo. Por otra parte, el capítulo incluye los fundamentos sobre el uso de sistema de mitigación los cuales son desglosados según el efecto que estos presenten.

### 2.1. Fundamentos de micrometeorología

La micrometeorología es una parte de la meteorología que estudia los procesos meteorológicos y su comportamiento a pequeña escala, tanto espacial como temporal. Por tal motivo, esta disciplina requiere un análisis de los fenómenos de transferencia de momentum, calor y masa en la capa límite atmosférica; es decir, entre el nivel del suelo y los primeros cien metros de altura (Sutton, 1953). La micrometeorología es imprescindible en el análisis y estudio de la dispersión de gases debido al efecto de la temperatura, el viento y la turbulencia generada por efecto del terreno.

La capa límite atmosférica es un espacio similar a la capa límite planteada por Prandtl (1905) en la mecánica de fluidos. Esto es motivo suficiente para formular perfiles verticales de velocidad y temperatura e incluir la generación de turbulencia y el efecto de fricción con el terreno. Por otra parte, un cambio simultáneo de estos perfiles genera distintos escenarios en la capa límite atmosférica, los cuales se clasifican de acuerdo a un cierto nivel de estabilidad. Este nivel de estabilidad depende del grado de turbulencia

y tipo de perfil de temperatura. Así, los perfiles deben ser calculados para analizar el comportamiento de la capa límite atmosférica.

### 2.1.1. Perfil vertical de temperatura

Las distintas capas de la atmósfera presentan perfiles de temperatura que son distintos entre cada capa. En la parte más alejada de la tierra, la termósfera es la primera capa y contiene oxígeno suficiente para absorber los rayos ultravioleta (UV) provenientes del sol a temperaturas próximas a los 1000 K. A lo largo de la termósfera la temperatura disminuye hasta 180 K lo cual representa el punto de inicio de la mesósfera. A diferencia de la termósfera, la mesósfera cuenta con una baja concentración de ozono lo cual es suficiente para absorber los rayos UV y aumentar gradualmente la temperatura hasta 270 K conforme disminuye la altura. En esta altura inicia la estratósfera donde el ozono es el único componente y es capaz de generar una gran cantidad de reacciones iónicas por efecto de la luz solar. En esta capa existe una disminución gradual de la temperatura conforme disminuye la altura hasta 223 K que es el punto donde inicia la tropósfera. La Figura 2.1 representa el perfil de temperatura en las distintas capas de la atmósfera.

La tropósfera cuenta con un perfil de temperatura vertical el cual es afectado por la superficie terrestre y la radiación solar. Inicialmente, la radiación solar no es absorbida por la capa de aire sobre la

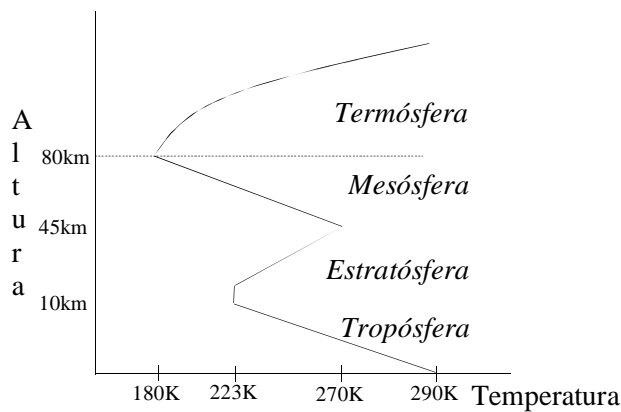


Figura 2.1 Perfil vertical de temperatura.

superficie terrestre ya que el aire es un fluido con baja conductividad térmica y no absorbe la radiación solar. Así, la radiación solar es absorbida únicamente por la superficie terrestre. Posteriormente, el contacto continuo entre el terreno y el aire genera una convección de calor donde el aire es calentado lo suficiente para disminuir su densidad. El producto de esta disminución de densidad es un movimiento vertical del volumen de aire. Este movimiento de flotación termina hasta una altura en que la presión sea lo suficientemente menor para permitir el enfriamiento del aire y lograr su expansión. Cabe señalar que la presión barométrica disminuye con la altura implicando un cambio en su volumen, densidad y en la temperatura de la masa de aire en flotación. De esta forma, el perfil vertical de temperatura es formado.

Lo anterior es una explicación suficiente para comprender la formación del perfil vertical de temperatura, pero su comprobación matemática es necesaria en el modelado de la dispersión de gases. El procedimiento de obtención del perfil vertical de temperatura inicia al considerar el aire como un gas perfecto y despreciando su energía potencial y cinética. Al definir un sistema adiabático para un volumen de aire, la primera ley de la termodinámica puede escribirse como:

$$C_V dT + PdV = 0 \quad (2.1)$$

donde  $C_V$  es la capacidad calorífica a volumen constante,  $T$  es la temperatura,  $P$  es la presión y  $V$  es el volumen.

Si se sustituye el segundo término de la expresión por su equivalente obtenido de diferenciar la ley de gas ideal, la expresión se modifica a:

$$C_V dT - VdP + RdT = 0 \quad (2.2)$$

donde  $R$  es la constante de los gases.

Reordenando e incluyendo la ley de gas ideal se tiene:

$$\frac{dT}{dP} = \frac{RT}{P} \frac{1}{C_V + R} \quad (2.3)$$

Al aplicar la expresión del cambio de la presión con la altura se obtiene finalmente:

$$\frac{dT}{dz} = \frac{-g}{C_V + R} = \frac{-g}{C_P} \quad (2.4)$$

donde  $g$  es la aceleración de la gravedad y  $C_P$  es la capacidad calorífica a presión constante.

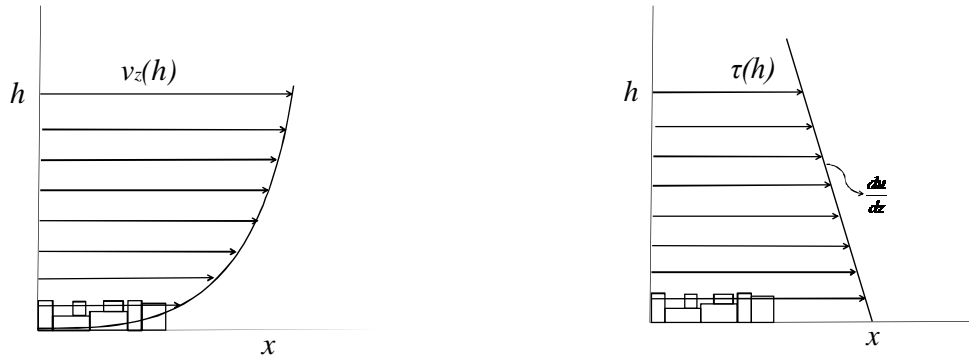
El valor del cambio de la temperatura con respecto a la altura indicado en la expresión (2.4) es aproximadamente  $-1$  °C/100 m. De esta manera, el perfil de temperatura puede cuantificarse de forma adiabática. El valor obtenido indica un descenso de temperatura de manera lineal. Esta expresión es fundamental para definir la condición atmosférica del ambiente y así predecir el comportamiento de la capa límite atmosférica.

### 2.1.2. Perfil de velocidad y el efecto del terreno

El perfil de velocidad en la capa límite atmosférica es formado por el movimiento de la tierra, la morfología del terreno y gradientes de presión y temperatura. El perfil de velocidad es semejante al producido en un fluido sobre una placa en movimiento. Esta semejanza ha sido considerada en la micrometeorología ya que se ha observado un perfil no-lineal en la velocidad del aire sobre la superficie terrestre (Sutton, 1953). La Figura 2.2 (a) muestra un ejemplo del perfil vertical de velocidad. Las observaciones sobre el perfil vertical de temperatura y su influencia sobre la velocidad del viento formularon una relación exponencial con la altura (Frost, 1947):

$$v = v_r \left( \frac{z}{z_r} \right)^p \quad (2.5)$$





(a) Perfil vertical de velocidad.  
 (b) Perfil de esfuerzo cortante.  
 Figura 2.2 Perfil de velocidad vertical y esfuerzo cortante en la capa límite atmosférica.

donde  $v_r$  es la velocidad del viento a una altura de referencia  $z_r$ ,  $v$  es la velocidad del viento a una altura  $z$ ,  $p$  es un índice de correlación cuyos valores dependen de la variación de la temperatura y la condición atmosférica.

La turbulencia en la capa límite atmosférica fue inicialmente observada en los trabajos de Richardson (1925) y Sutton (1953). Los experimentos de Nikuradse (1930) fortalecieron la idea del efecto del terreno sobre el perfil de velocidad en la capa límite atmosférica. Lo anterior indica la necesidad de formular una relación entre el terreno y el perfil de velocidad. La deducción matemática del perfil de velocidad inicia con la relación entre el esfuerzo cortante y el gradiente de velocidad. Además, en la capa límite atmosférica el aire se encuentra a condiciones que hacen posible el considerarlo como fluido incompresible y que permiten la aplicación de ecuaciones de Euler (Sutton, 1953).

El esfuerzo cortante es una fuerza constante por unidad de área transversal capaz de mantener invariable la velocidad del fluido respecto a la altura (Bird *et al.*, 1998). Así, el esfuerzo cortante es directamente proporcional al gradiente de la velocidad con la altura. La Figura 2.2 (b) representa el perfil del esfuerzo cortante en la capa límite atmosférica. Sin embargo, el efecto del terreno modifica el perfil de velocidad debido a la turbulencia producida. Por tal motivo, una expresión matemática sobre el perfil de velocidad debe incluir el efecto de la turbulencia. Así, la disipación de la energía cinética por medio de la viscosidad de turbulencia es incluida en el esfuerzo cortante como (Sutton, 1949):

$$\frac{\tau}{\rho} = (\nu + K_M) \frac{du}{dz} \tag{2.6}$$

donde  $\tau$  es el esfuerzo cortante del aire,  $\nu$  es la viscosidad cinemática,  $\rho$  es la densidad,  $u$  es la velocidad, la cual varía a una altura  $z$ , y  $K_M$  es la viscosidad de turbulencia. Un análisis de orden de magnitud demuestra que el escenario atmosférico considera la viscosidad de turbulencia mayor comparada con la viscosidad cinemática por lo que  $K_M \gg \nu$ .

La existencia de turbulencia genera problemas más complejos donde la velocidad tiene fluctuaciones respecto al tiempo. Al existir fluctuaciones, la velocidad en dirección  $x$  puede descomponerse en la suma de una velocidad constante al tiempo,  $\bar{u}$ , y una velocidad dada las fluctuaciones,  $u'$ . La velocidad constante es definida como un promedio de la velocidad. Aplicando lo anterior en las ecuaciones de Navier-Stokes se obtiene un producto de velocidad de fluctuaciones definido como estrés de Reynolds el cual es equivalente a la expresión (2.6). Así, la viscosidad de turbulencia puede expresarse como:

$$K_M = \frac{\overline{u'w'}}{\frac{du}{dz}} \quad (2.7)$$

donde  $\overline{u'w'}$  es el producto de las fluctuaciones de la velocidad horizontal,  $u$ , y vertical,  $w$ , lo cual representa al estrés de Reynolds equivalente a  $\tau/\rho$ .

La teoría de capa límite permite evaluar las velocidad de fluctuación a distintas alturas; es decir, una velocidad de fluctuación puede ser evaluada como (Sutton, 1953):

$$u' = u|_{z+\ell} - u|_z \cong \ell \frac{du}{dz} \quad (2.8)$$

donde  $\ell$  es la longitud de mezcla definida en la teoría de capa límite de Prandtl. Esta longitud es la distancia en que un fluido en movimiento conserva sus características antes de dispersarse en los alrededores (EAC, 2003).

Así, las definiciones anteriores logran una relación entre el gradiente de velocidad y la viscosidad de turbulencia tal que:

$$K_M = \ell^2 \frac{du}{dz}. \quad (2.9)$$

La longitud de mezcla en la capa límite atmosférica,  $\ell$ , es relacionada con la altura  $z$  por medio de la constante de von Kármán,  $k$  (Sheppard, 1947). Esta constante tiene un valor aproximado de 0.41. Por otra parte, la relación del esfuerzo cortante y la densidad ha sido definido como el cuadrado de la velocidad de fricción,  $u^*$  (Sutton, 1953). Esta velocidad es una velocidad auxiliar que permite evaluar al tensor de corte. Así, al aplicar la definición de velocidad de fricción y la Ecuación (2.9) en la expresión (2.6), se obtiene:

$$u^* = kz \frac{du}{dz} \quad (2.10)$$

La expresión (2.10) es conocida en micrometeorología como *ley de la pared*. La solución de la ecuación anterior produce el perfil de la velocidad que involucra el efecto del terreno:

$$u^* = \frac{uk}{\ln\left(\frac{z}{z_0}\right)} \quad (2.11)$$

donde  $z_0$  indica la altura equivalente del terreno cuyos valores son específicos a superficies suaves y rugosas. Una serie de estos valores ha sido reportada por Counihan (1975), Deacon (1949), Golder (1972) y McRae (1982), entre otros. La Tabla 2.1 describe los valores de rugosidad para distintos tipos de terreno.

Tabla 2.1 Valores de la longitud de rugosidad en distintos terrenos (McRae *et al.*, 1982).

Tipo de terreno	$z_0$ (m)
Hielo	0.00001
Agua	0.001
Pasto podado/Nieve	0.001
Pasto corto (10 cm)	0.01
Pasto largo (> 10 cm)	0.03
Terreno agrícola	0.2
Terreno boscoso	1
Zona habitada (urbana)	10

### 2.1.3. Condición atmosférica

La condición atmosférica es un patrón importante en meteorología pues define el estatus de la capa límite atmosférica en base al nivel de turbulencia del aire y el tipo de perfil de temperatura. En un inicio, la meteorología estuvo enfocada en el análisis de la condición atmosférica de forma experimental. Los trabajos de Richardson (1925) fueron los primeros en identificar un patrón que relaciona los efectos verticales térmicos y de turbulencia de manera simultánea.

La categorización de la condición atmosférica inició con la comparación del perfil de temperatura existente y el perfil de temperatura adiabático. Las observaciones obtenidas formularon dos clases de condiciones atmosféricas: inestable y estable (Sutton, 1953). La estable está definida cuando existe temperatura alta en los alrededores donde la masa de aire tiene una densidad baja generando flotación. En caso contrario, el volumen de aire tendrá una densidad mayor que lo mantendrá en una posición baja. Una ampliación de la clasificación de la condición atmosférica fue propuesto por Pasquill (1961) quien añadió los términos inestable, neutra y estable y los representó por las letras A, D y F respectivamente. La Figura 2.3 muestra los distintos perfiles de temperatura y su equivalencia a la condición atmosférica.

La cuantificación de la condición atmosférica se basa con los principios definidos por Richardson (1925). Estos principios están dados a considerar una supresión de turbulencia por un efecto térmico y una generación de turbulencia por efecto cinético. La relación de ambos principios fue definido como número de Richardson. Matemáticamente el número de Richardson relaciona el parámetro térmico y la energía cinética como:

$$Ri = \frac{g}{T} \frac{\left( \frac{dT}{dz} + \Gamma \right)}{\left( \frac{du}{dz} \right)^2} \quad (2.12)$$

donde  $\Gamma$  es la pendiente del perfil adiabático de la temperatura,  $-g/C_p$ , definido en la Sección 2.1.1.

El número de Richardson ha sido modificado para aplicarse en dispersión de gases tomando en cuenta la altura de la nube, de forma que:

$$Ri = g \frac{\rho_G - \rho_A}{\rho_A} \frac{l}{u^2} \quad (2.13)$$

donde  $\rho_G$  y  $\rho_A$  son las densidades del gas en dispersión y el aire respectivamente y  $l$  la altura de la mezcla del gas en dispersión (Mannan, 2005).

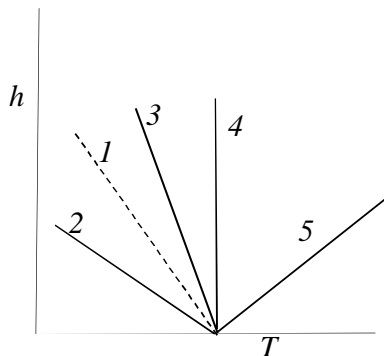


Figura 2.3 Perfiles aproximados de temperatura en la capa límite terrestre para la determinación de la condición atmosférica. (1) Perfil adiabático. (2) Perfil subadiabático, condición atmosférica inestable. (3) Perfil superadiabático, condición atmosférica estable. (4) Perfil isotérmico, condición atmosférica neutra. (5) Perfil de inmersión térmica.

Tabla 2.2 Relación del número de Richardson, índice  $p$  y las condiciones atmosféricas.

Condición atmosférica	Valor número del número de Richardson	Índice $p$ definido en la ecuación (2.5)
Inestable (A)	-1.0 a -0.7	0.1
Neutro (D)	0.0	0.38
Estable (F)	0.05 a 0.11	0.62

Tomada de (Mannan, 2005).

En la dispersión de gases, la condición atmosférica describe la capacidad de mezclado o difusión entre el gas que se dispersa y el aire. Los valores obtenidos por el número de Richardson son relacionados con las condiciones atmosféricas establecidas y permiten cuantificar la capacidad de mezclado. La Tabla 2.2 muestra el valor del índice  $p$  en relación a las condiciones atmosféricas para la ecuación (2.5).

#### 2.1.4. Definición del peor escenario atmosférico

Los perfiles verticales de temperatura y velocidad, así como la condición atmosférica han sido definidos como variables que rigen el comportamiento de la dispersión de gases. El peor escenario es definido cuando el daño por una emisión sea el máximo posible sobre el personal. Esto puede ser visto cuando una nube requiere mayor tiempo para lograr su dispersión aumentando el daño al personal. Lo anterior es posible cuando la dispersión y el mezclado son lentos.

Las altas velocidades del viento han sido el foco de atención para definir el peor escenario; sin embargo, a altas velocidades se genera la suficiente turbulencia para aumentar el mezclado y dispersión de la nube. Así, una baja velocidad del viento crea un efecto opuesto pues la nube se mantiene en una misma posición durante un lapso de tiempo mayor.

La condición atmosférica está bajo un efecto ya sea térmico o de turbulencia como se analizó en la sección anterior. Así, una condición atmosférica inestable es dominada por la turbulencia lo cual propicia la dispersión. De manera contraria, una condición atmosférica muy estable (F) es dominada por efec-

tos térmicos que limitan la dispersión de la nube del gas. Así, una condición atmosférica estable aumenta el tiempo de permanencia de la nube.

La demostración numérica del peor escenario fue obtenida a partir de modelos de dispersión (Díaz-Ovalle *et al.*, 2009). Asimismo, algunas pruebas de campo han sido realizadas definiendo conclusiones similares a lo obtenido por los modelos (Woodward, 1998). En conclusión, el peor escenario atmosférico es aquel que corresponde a una velocidad del viento baja o en calma, entre 1 y 2m/s, a una condición atmosférica inestable o tipo F (Lines *et al.*, 1997, Deaves y Lines, 1998).

## 2.2. Modelos de dispersión

Los modelos matemáticos de dispersión tienen como propósito describir la concentración de los componentes gaseosos en dispersión en el tiempo y el espacio. Lo anterior proviene de un modelo que considera convección y difusión de masa que, al incluir la Ley de Fick de la difusión, es planteado como:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{v}C_i = \nabla \cdot D_{ij}\nabla C_i \quad (2.14)$$

donde  $C_i$  es la concentración del gas en dispersión  $i$ ,  $t$  es el tiempo,  $\mathbf{v}$  es el vector de la velocidad del gas en dispersión  $i$ , y  $D_{ij}$  el coeficiente de difusividad molecular del gas  $i$  en el gas  $j$  con  $i \neq j$ . Las condiciones fronteras y los valores iniciales son dados por las características de la emisión como lo son su ubicación y el tipo de emisión ya sea instantánea o continua.

El coeficiente de difusividad varía respecto a las coordenadas espaciales,  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , y el tiempo,  $t$ . Esto hace al problema sumamente complejo. Para aproximar la solución algunos experimentos han sido aplicados para obtener valores aceptables del coeficiente de difusión. Así, diferentes condiciones de emisión para diferentes gases han mostrado una variación enorme en el valor del coeficiente de difusividad concluyendo que los valores posibles oscilan de 2 a  $10^8 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$  (Richardson, 1926). Por esta razón, los modelos de dispersión existentes han sido resueltos por métodos que evitan el uso directo del coeficiente

de difusividad. Estos métodos aproximan este coeficiente a una parametrización de datos observados. Los modelos de dispersión han sido planteados a través de distintas consideraciones matemáticas de las que proviene la siguiente clasificación (Markiewicz, 2006):

- Modelos de caja: Consideran la capa atmosférica límite como un cubo en el cual los gases de dispersión están distribuidos homogéneamente. Estos modelos permiten la obtención de concentraciones promedio del gas en cualquier punto dentro de este cubo.
- Modelos Gaussianos: Están basados en una posible distribución normal de la concentración del gas que varía en las coordenadas  $x$ ,  $y$  y  $z$ . Además, las condiciones atmosféricas son consideradas funciones de la posición.
- Modelos Lagrangianos: Analizan el movimiento de las partículas, seleccionadas al azar, para obtener su trayectoria en coordenadas Lagrangianas. La trayectoria de la dispersión es definida para cada una de las partículas del análisis.
- Modelos Eulerianos: Describen el movimiento del flujo de la dispersión para cada componente del vector velocidad. Las soluciones analíticas de estos modelos se proponen incluso como modelos de caja.

Las características de los gases en dispersión generan dos tipos de dispersión cuyas diferencias son físicamente notorias. Una diferencia física importante es la flotabilidad que la nube representa. La nube con flotabilidad alta presenta una dispersión pasiva y es formada por gases cuya densidad y peso molecular son menores al aire. En caso contrario la nube presenta una dispersión densa. La siguiente sección describe algunos de los principales modelos usados actualmente para cada uno de los casos.

### **2.2.1. Dispersión pasiva**

Un claro ejemplo de esta dispersión es el humo de las chimeneas sobre el cual se aplicó por primera vez una formulación matemática de dispersión. Así, los gases de chimenea mostraron las cualidades que la dispersión presenta en su interacción con el viento y la condición atmosférica (Roberts, 1923). La



Figura 2.4 ilustra gráficamente las cualidades de una dispersión pasiva.

Los primeros modelos de dispersión estuvieron enfocados en obtener aproximaciones del coeficiente de difusión. Estas aproximaciones permitieron obtener soluciones aceptables sobre la Ecuación (2.14). El primer modelo fue propuesto por Roberts (1923) y analiza el comportamiento de chimeneas respecto al tiempo. El modelo es una solución analítica de la Ecuación (2.14) y es generalizado para las coordenadas espaciales y la ubicación del punto de emisión.

La propuesta de solución de Roberts fue modificada por Sutton (1953) quien planteó un modelo matemático que aproxima el comportamiento de la dispersión de forma Gaussiana. En el modelo de Sutton los coeficientes de difusividad consideran un índice de difusión,  $n_D$ , y un parámetro de difusión generalizada,  $C$ . Este parámetro de difusión asume un valor próximo al propuesto experimentalmente para distintas condiciones climáticas. Por otra parte, el modelo propuesto por Sutton proviene de forma similar al propuesto por Roberts. En ambos modelos el índice de difusión depende de la condición atmosférica y está relacionado con el índice  $p$  de la ecuación (2.5):

$$p = \frac{n_D}{2 - n_D} \quad (2.15)$$

El modelo de Sutton fue modificado a un modelo con valores de difusión aproximados a parámetros de dispersión. Este modelo resultante fue propuesto por Pasquill (1961). La representación matemática del modelo Pasquill-Gifford para una emisión en una fuente elevada de forma continua en tres dimensiones es:

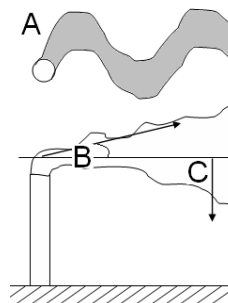


Figura 2.4 Cualidades de dispersión pasiva. A. Sinuosidad. B. Ángulo de apertura. C. Inmersión.

Tabla 2.3 Parámetros de dispersión ( $\sigma_z$  y  $\sigma_y$ ) a una distancia  $x$  tomados de Crowl y Louvar (2002).

	Condición atmosférica	$\sigma_z$	$\sigma_y$
Urbano	A	$0.24x(1 + 0.0001x)^{0.5}$	$0.32x(1 + 0.0004x)^{-0.5}$
	D	$0.14x(1 + 0.0003x)^{-0.5}$	$0.16x(1 + 0.0004x)^{-0.5}$
	F	$0.08x(1 + 0.0015x)^{-0.5}$	$0.11x(1 + 0.0004x)^{-0.5}$
Rural	A	$0.20x$	$0.22x(1 + 0.0001x)^{-0.5}$
	D	$0.06x(1 + 0.0015x)^{-0.5}$	$0.08x(1 + 0.0001x)^{-0.5}$
	F	$0.016x(1 + 0.0003x)^{-1.0}$	$0.04x(1 + 0.0001x)^{-0.5}$

$$C_{<x,y,z>} = \frac{Q}{2\pi v \sigma_z \sigma_y} \cdot \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) \cdot \left[ \exp\left(-\frac{(z-H)^2}{2\sigma_z^2}\right) + \exp\left(-\frac{(z+H)^2}{2\sigma_z^2}\right) \right] \quad (2.16)$$

donde  $C_{<x,y,z>}$  es la concentración del gas en dispersión a una coordenada específica  $x$ ,  $y$ , y  $z$ ,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$  son los parámetros de dispersión para distintas coordenadas y  $H$  es la altura de la fuente de emisión.

Los parámetros de dispersión son calculados analíticamente y dependen de las condiciones atmosféricas y el tipo de terreno. Los efectos del terreno sobre estos parámetros fueron definidos por Gifford (1961). Sin embargo, experimentalmente se ha demostrado la imprecisión de algunos de estos parámetros y algunas correcciones han sido propuestas por Griffiths (1994) y Ulke (2000). La Tabla 2.3 muestra los parámetros de dispersión obtenidos por Gifford (1961) a distintas coordenadas espaciales.

El modelo de Pasquill-Gifford es muy usado en cálculos de concentración para dispersiones que no requieren mucha precisión, puesto que está limitado a su cualidad de sobre-predicción. Inclusive, el uso de este modelo se realiza de manera indistinta al tipo de emisión. La extensión y modificación de este modelo pueden llevarse a cabo en dispersiones específicas (Rege y Tock, 1996). Sin embargo, la mayoría de los gases industriales no muestran un comportamiento pasivo debido a su densidad y peso molecular. Por tal motivo, la dispersión densa es planteada de manera distinta respecto a la dispersión pasiva.

### 2.2.2. Dispersión densa

La dispersión densa ha sido definida para gases con mayor densidad y peso molecular al aire. Inclusive, algunos gases con menor peso molecular al aire tienen un comportamiento denso debido a las condiciones de almacenamiento, presión, temperatura y humedad, que influyen sobre su densidad

El comportamiento de la dispersión de gases densos fue analizado por van Ulden (1974) cuyos experimentos describen varias etapas en el proceso de dispersión. La primera etapa es la liberación del gas denso que genera un efecto de turbulencia. Posteriormente, el efecto de gravedad es notorio al igual que su cambio paulatino en la densidad conforme la concentración disminuye. Finalmente, el comportamiento de la nube en dispersión es similar a un gas ligero. La Figura 2.5 describe detalladamente el comportamiento de la dispersión densa.

El modelado de dispersión de gases densos fue en un inicio formulado como una dispersión pasiva por la simplicidad matemática que presenta. Este tipo de modelos fueron planteados de manera Gaussiana como el modelo de Germeles (Germeles y Drake, 1975). En estos modelos el tiempo y el tamaño de la fuente de emisión son variables consideradas y los parámetros de dispersión propuestos por Gifford son incluidos.

Los modelos de caja son planteados para dispersiones instantáneas donde la masa liberada está cambiando con el tiempo en un volumen específico. Van Ulden (1978) propuso un modelo que considera la nube de forma cilíndrica la cual presenta un cambio en su radio respecto al tiempo. Además, este mode-

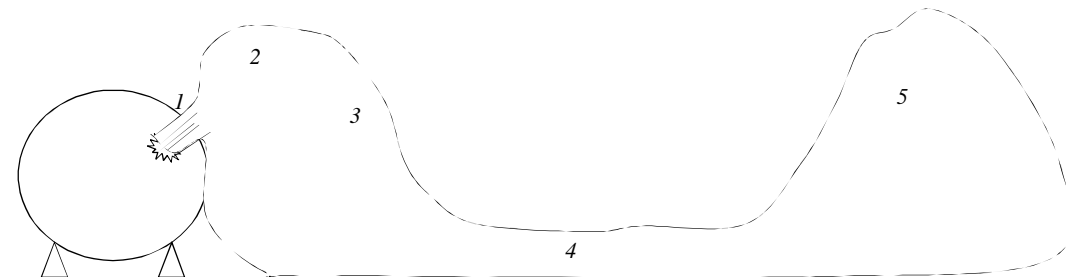


Figura 2.5 Comportamiento de una dispersión densa. (1) Turbulencia por la emisión. (2) Efectos por la aceleración de la emisión. (3) Efecto de la densidad. (4) Dispersión densa a baja altura. (5) Comportamiento pasivo.

lo cuenta con el efecto del cambio de densidad en la nube. Asimismo, Cox y Roe (1977) desarrollaron un modelo de caja aplicable a emisiones continuas que incluye el cambio de temperatura. La validación de este modelo fue realizada con los resultados de las pruebas de gas natural en Matagordo Bay, 1980.

Los modelos de caja aumentaron su complejidad matemática al incluir los efectos atmosféricos sobre la nube en dispersión. Un ejemplo es el modelo *DENZ* desarrollado por Kaiser y Walker (1978). Este modelo es capaz de incluir los efectos atmosféricos en el cálculo de la densidad y la altura de la nube. Sin embargo, el modelo *CRUNCH*, desarrollado por Jagger (1983) superó al modelo *DENZ* en la capacidad de predecir un comportamiento pasivo posterior a la dispersión densa. Sin embargo, la interacción entre el ambiente y la nube en dispersión no fueron considerados en estos modelos.

Los modelos de capa superficial consideran la dispersión del gas como una película de agua en movimiento e incluyen la interacción del ambiente con la dispersión. Un modelo de capa superficial es el modelo *SLAB* propuesto por Zeman (1982). Este modelo proviene de aplicar un promedio de área en las ecuaciones de momentum, calor y masa. El modelo es unidireccional por lo que las variables son función de la dirección del viento.

El modelado de la dispersión de gases densos es definido de manera estricta cuando se usan las ecuaciones de conservación, materia, momentum y calor. Por tal motivo, la solución de estas puede predecir cada variable en 3 dimensiones. Además, el modelado debe incluir el efecto climático a través de los perfiles verticales de temperatura y velocidad. De lo anterior se puede obtener un modelo cuyos resultados sean aceptables en la predicción de dispersión. Sin embargo, la solución de las ecuaciones de transporte es demasiado complicada y los modelos existentes han aplicado muchas suposiciones. Un par de ejemplos sobre lo anterior son los modelos *FEM3* y *SIGMET*. Este último incluye ecuaciones de hidrodinámica para representar el efecto de presión sobre la nube y el efecto de turbulencia (Havens, 1982)

Un cálculo preciso de la dispersión se ha logrado al fusionar varios modelos como el caso del modelo *HEGADAS* que es la fusión del modelo desarrollado por Colenbrander (1980) y el modelo de Riele (1977). En principio, *HEGADAS* utiliza las ecuaciones de transporte y cuenta con funciones de similitud en la aplicación de los efectos atmosféricos sobre todo en el cálculo del número de Richardson y la

velocidad de fricción (Witlox, 1994a, 1994b). Los fundamentos del modelo *HEGADAS* fueron reformulados para incluir la transferencia de calor con los alrededores de lo cual se produjo al modelo *DEGADIS* (Spicer *et al.*, 1986).

La validación de los modelos de dispersión es sumamente importante para la confiabilidad de los resultados que podrían variar por consideraciones físicas o en errores numéricos. Entre los experimentos a gran escala destacan los experimentos realizados en las islas Thorney, Inglaterra (1982-1984). Estos experimentos fueron desarrollados en tres fases. En la primera fase el Freón 12 fue utilizado para generar datos suficientes sobre las velocidades, concentraciones de una nube en dispersión y la variación del número de Richardson (McQuaid, 1985, Puttock y Colenbrander, 1985, McQuaid, 1987, Puttock, 1987). Las fases II y III fueron aplicadas a dispersiones con obstrucción y barreras (Brighton y Prince, 1987). Otros experimentos similares se llevaron a cabo en el lago China, California (1982) por el *Lawrence Livermore National Laboratory* donde la dispersión de gas natural permitió validar los modelos de gases densos *SLAB*, *FEM3* y el propuesto por Germeles (Ermak *et al.*, 1982, Morgan *et al.*, 1983).

Los modelos de dispersión más sofisticados han considerado las condiciones físicas de los alrededores como condiciones de frontera. Sin embargo, estos modelos de dispersión aún están limitados en el conocimiento de parámetros de dispersión, los cuales son altamente estocásticos lo que hace al problema altamente complejo (Sullivan *et al.*, 2004, Marx y Cornwell, 2008). Actualmente, los modelos de dispersión de gases densos son utilizados para simular el comportamiento de nubes de gases tóxicos y así reducir el impacto de dichas dispersiones (Yegnan *et al.*, 2002, Sklavounos y Rigas, 2004, Dandrieux-Bony *et al.*, 2005, Jonsson *et al.*, 2005). Por otra parte, las predicciones son más precisas como se observa en la aplicación de Dinámica de Fluidos Computacional (Blocken *et al.*, 2007, Hanna *et al.*, 2009). La siguiente sección está enfocada en una descripción básica de la aplicación de *CFD* en la dispersión de gases.

### **2.2.3. Fundamentos de *CFD* y su aplicación en la dispersión de gases**

La ingeniería asistida por computadora permite la solución de las ecuaciones de fenómenos de transporte: momentum, calor y masa. En particular, la transferencia de momentum fue un problema de

resolución necesaria al incluir el flujo de fluidos. Así, la aplicación de los avances computacionales a este problema ha producido una metodología numérica específica para su solución, la cual es conocida como dinámica de fluidos computacional (*CFD* por sus siglas en inglés). Esta herramienta ha sido aplicada para resolver problemas aeroacústicos, electromagnéticos y de mecánica estructural (Hirsch, 2007). En general, el uso de *CFD* tiene la ventaja de evitar experimentos a gran escala, y puede reproducir experimentos que no pueden ser desarrollados de forma física (Tu *et al.*, 2008).

La simulación de un problema usando *CFD* se logra a través de varios pasos, los cuales son la definición del sistema, solución del problema y representación de los resultados. Generalmente, estos pasos han sido adaptados en la mayoría de los softwares comerciales. El primero de estos es la transformación del problema desde el mundo físico al mundo computacional; es decir, la representación del sistema por medio de una geometría creada por herramientas computacionales. Esto permite una simulación muy cercana a la realidad reduciendo suposiciones espaciales (Tu *et al.*, 2008).

El segundo paso está enfocado en preparar la geometría para la solución del problema a través de la discretización de las variables. La discretización permite obtener el valor de una variable en un punto específico para lo cual se divide el sistema en elementos geométricos cuyos puntos son definidos como nodos. Así, en cada nodo las variables cuentan con un valor específico. La realización de la discretización se logra con la creación de una malla adaptada a la geometría, la cual define la forma de los elementos y la cantidad de los nodos. La generación de la malla no es un simple paso sino que es todo un proceso que influye notoriamente en la precisión de la solución y la adaptación de la solución a la geometría (Bathe y Zhang, 2009). La refinación de la malla genera una mayor precisión pero aumenta el número de elementos y nodos, lo cual se ve reflejado en el aumento del tiempo de cómputo y de los requerimientos computacionales.

El tercer paso está enfocado en determinar las condiciones del sistema, es decir las propiedades de los fluidos, condiciones de frontera e iniciales, y las ecuaciones que rigen al problema. Este último está enfocado en seleccionar los modelos matemáticos que representen el sistema como son turbulencia, dos fases, lechos porosos, radiación térmica, convección en turbulencia, etc. El cuarto paso, solución del pro-

blema, relaciona los dos pasos anteriores a través de la discretización de las variables sobre la malla propuesta, es decir el modelo definido en el tercer paso se somete al método de solución (Rizzi y Engquist, 1987). Entre los métodos de solución se enlistan los de fundamento finito: Diferencias, Elemento y Volumen. Los fundamentos de cada método están dados por:

- Diferencias finitas: La discretización está basada en aplicar series de Taylor sobre el modelo matemático cuyos puntos están representados por los nodos. Este método es muy usado por su relativa sencillez matemática, aunque el truncamiento de las series de Taylor genera un error de cálculo. El método se vuelve complicado para problemas en tres dimensiones y en coordenadas no cartesianas (Gerald y Wheatley, 1992).
- Elemento finito: La aplicación de un funcional permite minimizar el error de aproximación a la solución. Además, la discretización se hace en base a funciones matemáticas de interpolación geométrica de los nodos. El método es complicado para elementos de varios lados en tres dimensiones (Tong y Rossettos, 1977).
- Volumen finito: La discretización se hace sobre la forma integral de las ecuaciones de conservación. Así, el dominio es subdividido en un finito número de volúmenes de control y sobre el centroide de cada volumen las variables son calculadas. La aproximación del valor de la variable a la superficie se logra por medio de interpolación. La desventaja del método radica en resolver diferenciales de orden superior en tres dimensiones (Tu *et al.*, 2008).

Los métodos que aplican discretización concluyen que la variable buscada tiene un valor específico en un punto en el espacio. La gran cantidad de nodos y variables crea matrices de alto orden cuyas soluciones se pueden obtener con métodos iterativos con relajación como Gauss-Seidel y *SOR* (Successive Over-Relaxation). El último paso está enfocado en mostrar gráficamente los resultados obtenidos, es decir el valor de las variables en el espacio. En este paso, los softwares comerciales llaman la atención por su originalidad en lograr este propósito de una forma muy visual (Tu *et al.*, 2008).

El uso de *CFD* en dispersión de gases es fundamental para el análisis de riesgo y su enfoque ma-

yor está dado en la predicción de contingencias. La predicción a accidentes genera mejores decisiones y planeaciones sobre emisiones, en algunos casos la simulación se realiza en casos extremos como se demostró por una emisión de gas cloro sobre la ciudad de Chicago (Hanna *et al.*, 2009). Además, el comportamiento de las dispersiones ha sido analizado cuando existen obstáculos que pudieran modificar la trayectoria (Tauseef *et al.*, 2011). Algunos trabajos han extendido el diseño de la geometría a muy buena similitud con lo mostrado en campo abierto a través de diseños topográficos (Scargiali *et al.*, 2005). Sin embargo, la aplicación del CFD ha sido extendida para fuego y explosiones cuyas validaciones han mostrado un alto apego a la realidad y han permitido una alta aceptación (Tauseef *et al.*, Woodburn y Britter, 1996, Naamansen *et al.*, 2002).

### 2.3. Modelo de dispersión *SLAB*

El modelo *SLAB* fue desarrollado para predecir las variables de concentración, velocidades, temperatura, altura y ancho de la nube. Estas variables son promediadas en el área transversal a la dirección del viento que generalmente es la coordenada  $x$ . Cabe señalar que el modelo *SLAB* considera funciones de similitud para incluir los efectos atmosféricos y una de estas funciones es el número de Richardson.

El planteamiento matemático del promedio para una función  $\varphi(x,y,z,t)$  ha sido propuesto como:

$$\varphi(x,t) = \frac{1}{B \cdot h} \int_{-B/2}^{B/2} \int_0^h \varphi(x,y,z,t) dz dy \quad (2.17)$$

donde  $\varphi(x,t)$  es la función promediada a lo ancho,  $B$ , y alto de la nube,  $h$ .

La aplicación de un promedio en las ecuaciones tiene como objeto incluir los valores de la función en los límites donde el promedio es aplicado. En el caso de que la función sea una derivada se aplica la regla de Leibniz que indica:



$$\int_{a(h)}^{b(h)} \frac{\partial f(x)}{\partial x} dz = \frac{\partial}{\partial x} \int_{a(h)}^{b(h)} f(x) dz - f(x)_{b(h)} \frac{\partial b(h)}{\partial x} + f(x)_{a(h)} \frac{\partial a(h)}{\partial x}. \quad (2.18)$$

donde los subíndices indican el punto donde  $f(x)$  es evaluada.

El promedio es aplicado para obtener el ancho de la nube,  $B$ , alto de la nube,  $h$ , velocidad de la nube en dirección  $x$ ,  $U$ , concentración,  $C$ , composición,  $\omega$ , y temperatura,  $T$ , velocidad que desplaza al aire en dirección  $y$ ,  $V$ , y en dirección  $z$ ,  $W$ . Los valores considerados en los límites del promedio son las velocidades de arrastre de forma vertical y horizontal,  $w_e$  y  $v_e$  respectivamente; las propiedades del aire como temperatura,  $T_A$ , velocidad,  $U_A$ , y densidad,  $\rho_A$ ; y, las características de la emisión tales como temperatura,  $T_0$ , velocidad,  $U_0$ , y densidad,  $\rho_0$ . La Figura 2.6 representa el comportamiento de la nube de dispersión considerada en el modelo de capa superficial o *SLAB* y hace notar la dirección de las velocidades.

El cálculo de presión en un punto de la nube,  $P(x)$ , está basado en el uso del teorema de Bernoulli en un fluido de capa superficial. Teóricamente, esto concuerda con lo formulado en la aproximación de Boussinesq sobre la diferencia de densidades entre fluidos y la definición de corrientes por gravedad o corrientes por densidad. Sin embargo, la aplicación del teorema de Bernoulli requiere dos puntos de aplicación que en un inicio fueron difíciles de determinar en una nube de capa superficial. Theodore von Kármán propuso dos puntos que fueron definidos a la altura de la capa superficial, el primero en la zona de estancamiento de la capa superficial y el segundo en la línea horizontal de flujo de la capa límite entre

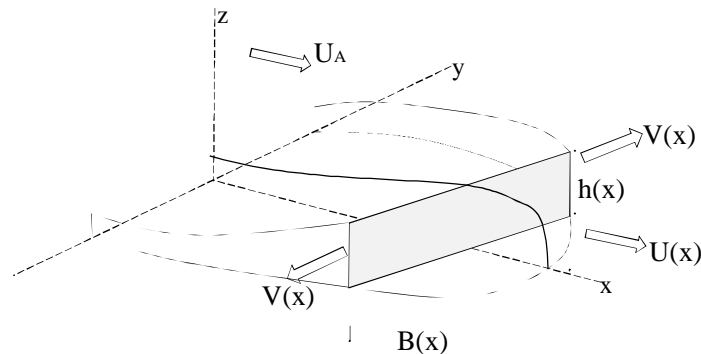


Figura 2.6 Descripción de la nube de dispersión planteada para el modelo *SLAB*. Modifica de Zeman (1982).

el fluido y el aire. Este último punto es ubicado a una distancia considerable de la parte frontal del fluido (Benjamin, 1968). La presión  $P(x)$  debe ser obtenida al nivel del suelo donde la velocidad es cero por lo que se obtiene:

$$P(x) + \int_0^h g \rho_{Nube} dz = P_{Bar} + \int_0^h g \rho_A dz \quad (2.19)$$

Promediando ambas partes en la dirección  $z$  y despejando la diferencia de presiones se llega a la expresión:

$$\overline{P(x)} - P_{Bar} = \frac{gh}{2} (\bar{\rho} - \rho_A). \quad (2.20)$$

La primera deducción, como parte del modelo *SLAB*, es aplicada a la ecuación de conservación de masa. Esta ecuación es definida para un volumen de control dentro de la nube en dispersión con densidad variable tal que:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U}{\partial x} + \frac{\partial \rho V}{\partial y} + \frac{\partial \rho W}{\partial z} = 0 \quad (2.21)$$

El promediado de área es aplicado en esta expresión para evaluar las variables con sus condiciones fronteras de la nube. Además, las dos funciones bases son incluidas para llegar a la expresión:

$$\frac{\partial \overline{\rho U} B h}{\partial x} + \frac{\partial \bar{\rho} B h}{\partial t} = \rho_0 U_0 B_0 + h v_e \rho_A + \rho_A B w_e \quad (2.22)$$

La ecuación de energía para un volumen de control dentro de la nube en dispersión con densidad variable, donde el flujo de calor es en las tres direcciones y existe calor suministrado por los alrededores es definida como:

$$\frac{\partial \rho C_p T}{\partial t} + \frac{\partial \rho C_p T U}{\partial x} + \frac{\partial \rho C_p T V}{\partial y} + \frac{\partial \rho C_p T W}{\partial z} = Q \quad (2.23)$$

El promediado para esta ecuación es:

$$Bh \overline{\rho C_p} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x} + Bh \overline{\rho C_p} \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} = (T_A - \bar{T})(w_e B + v_e h) \rho_A C_{p_A} + U_0 B_0 \rho_0 C_{p_0} (T_0 - \bar{T}) + Q \quad (2.24)$$

La ecuación de momentum en la coordenada  $x$  para un volumen de control dentro de la nube en dispersión con densidad variable y considerando deformación en coordenada  $x$  es:

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \frac{\partial \rho U U}{\partial x} + \frac{\partial \rho U V}{\partial y} + \frac{\partial \rho U W}{\partial z} + \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} = 0 \quad (2.25)$$

Obteniendo:

$$Bh \overline{\rho U} \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} + Bh \bar{\rho} \frac{\partial \bar{U}}{\partial t} = -\frac{g}{2} \frac{\partial (Bh^2 (\bar{\rho} - \rho_A))}{\partial x} + \rho_A (v_e h + w_e B)(U_A - \bar{U}) - \rho_0 U_0 B_0 \bar{U} \quad (2.26)$$

La ecuación de momentum en la coordenada  $y$  para un volumen de control dentro de la nube en dispersión con densidad variable y considerando deformación en coordenada  $x$  es:

$$\frac{\partial \rho V}{\partial t} + \frac{\partial \rho V U}{\partial x} + \frac{\partial \rho V V}{\partial y} + \frac{\partial \rho V W}{\partial z} + \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} = 0 \quad (2.27)$$

Obteniendo:

$$Bh\bar{\rho}U\frac{\partial\bar{V}}{\partial x} + Bh\bar{\rho}\frac{\partial\bar{V}}{\partial t} = gh^2(\bar{\rho} - \rho_A) - \rho_A\bar{V}(v_e h + w_e B) - \rho_0 U_0 B_0 \bar{V} \quad (2.28)$$

El balance de materia para cada especie es tomada de manera convectiva. Así, la ecuación para la composición de la especie gas se define como:

$$\frac{\partial\omega}{\partial t} + \frac{\partial\omega U}{\partial x} + \frac{\partial\omega V}{\partial y} + \frac{\partial\omega W}{\partial z} = 0 \quad (2.29)$$

Obteniendo:

$$Bh\bar{\rho}U\frac{\partial\bar{\omega}}{\partial x} + Bh\bar{\rho}\frac{\partial\bar{\omega}}{\partial t} = -\rho_A\bar{\omega}(w_e B + v_e h) + \rho_0 U_0 B_0 (1 - \bar{\omega}) \quad (2.30)$$

Además, la variación del ancho de la nube durante la dispersión es incluida como:

$$\bar{U}\frac{dB}{dx} = \bar{V} + v_e \quad (2.31)$$

La densidad de la nube es calculada en función de la temperatura y composición de la nube utilizando la ecuación de gas ideal. Por lo cual, la densidad de la nube es calculada como:

$$\bar{\rho} = \frac{T_A \rho_A M_G}{\bar{T} [\bar{\omega}(M_A - M_G) + M_G]} \quad (2.32)$$

donde  $M_A$  y  $M_G$  son el peso molecular del aire y gas respectivamente.

El ancho de la nube tiene efecto total sobre la forma de la nube, por lo cual se ha agregado un

parámetro  $\beta$  que relaciona matemáticamente al factor de forma de la nube,  $b$ , con el ancho de la nube por medio de la expresión:

$$B^2 = b^2 + 3\beta^2 \quad (2.33)$$

El factor de forma,  $b$ , se considera variable en  $x$ , por tal motivo se ha incluido en el modelo una expresión de dicha variación como (Ooms y Tennekes, 1984):

$$\frac{db}{dx} = b \frac{V}{U} \quad (2.34)$$

El cálculo de la concentración de la nube,  $C$ , ha sido planteado utilizando los parámetros de dispersión de Pasquill (1961). La concentración del gas en emisión dentro de la nube, en unidades %V/%V, está dada por:

$$C_{(x,y,z)} = C_x C_y C_z \quad (2.35)$$

donde:

$$C_x = \frac{M_A \omega}{M_G + (M_A - M_G) \omega} \quad (2.36)$$

$$C_y = \frac{1}{4b} \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{y+b}{\beta\sqrt{2}} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{y-b}{\beta\sqrt{2}} \right) \right] \quad (2.37)$$

$$C_z = \frac{1}{h} \sqrt{\frac{6}{h}} \exp\left(-\frac{3z^2}{2h^3}\right) \quad (2.38)$$

y y z son las coordenadas de la posición de la concentración.

Lo descrito anteriormente es el planteamiento del modelo *SLAB*. Sin embargo, es necesario incluir los parámetros atmosféricos que modifican las velocidad de arrastre en la dirección z,  $w_e$ , y en la dirección y,  $v_e$ . Primeramente, la velocidad de arrastre en la dirección y,  $v_e$ , debe ser calculada como:

$$v_e = 1.8^2 w_e \left(\frac{h}{B}\right) \quad (2.39)$$

La velocidad de arrastre en la dirección z,  $w_e$ , proviene de las observaciones planteadas por Zeman (1982). Estas observaciones utilizan el concepto de velocidad de fricción que es incluido en la expresión:

$$w_e = \frac{ku^*(\rho_0 - \rho)\sqrt{\pi}}{\phi(\rho_0 - \rho_A)} + \frac{2.5\rho_A(u^*)^3}{g(\rho_0 - \rho_A)h} \quad (2.40)$$

donde  $k$  es la constante de von Kármán con valor de 0.41 y  $\phi$  es una función que depende del perfil de temperaturas de forma vertical y se obtiene como:

$$\begin{aligned} Ri \geq 0; \phi &= 1 + 5Ri \\ Ri < 0; \phi &= (1 - 16Ri)^{-p} \end{aligned} \quad (2.41)$$

donde  $p$  es un parámetro con valor 0.25 para las ecuaciones de momentum y 0.5 para las ecuaciones de materia y energía y  $Ri$  es el número de Richardson local que depende del perfil de temperatura y turbulen-

cia y se calcula con la Ecuación (2.13). Todas las ecuaciones planteadas en esta sección son suficientes para predecir una dispersión de gas denso. Sin embargo, requieren un análisis diferente para usarse en la mitigación de gases densos. Las siguientes secciones están enfocadas a la descripción de la mitigación de gases densos.

## **2.4. Mitigación como herramienta en la reducción del impacto de accidentes**

La conservación de la integridad física de una planta industrial durante toda su vida productiva ha sido un tópico importante en los sistemas de diseño y seguridad industrial como se discutió en la Sección 1.1. Así, estrategias en el diseño de procesos han sido generadas para lograr la obtención de dicha conservación. Algunas estrategias incluyen la selección adecuada de materiales de construcción, la ubicación de los equipos, el uso de sistemas de mitigación, etc. En particular, los sistemas de mitigación son propios para cada uno de los distintos tipos de accidentes industriales como son explosión, fuego o emisión de gases tóxicos.

La mitigación de gases tóxicos depende en gran parte de las circunstancias en la formación de la nube. El tipo de emisión del que proviene la nube, las condiciones atmosféricas y sobre todo las características del gas emitido son factores fundamentales para seleccionar un sistema de mitigación. Los sistemas de mitigación están enfocados en tres principales efectos sobre el fluido mitigado los cuales son supresión, dilución y absorción (CCPS, 1997).

### **2.4.1. Mitigación con efecto de supresión**

La mitigación por supresión es aplicada con el objeto de reducir la evaporación de líquidos derramados por medio del aislamiento térmico para evitar el calentamiento por la temperatura ambiente o la radiación solar. La capacidad de aislamiento del líquido derramado depende de cualidades particulares de los medios aislantes o supresantes los cuales son en su mayoría espumas. Las cualidades de las espumas son la insolubilidad en el líquido y la expansión al ser aplicadas. En algunos casos los sistemas de supresión cuentan con la capacidad de reacción sobre el líquido derramado para evitar generación de vapores

(CCPS, 1997). Sin embargo, el tiempo de respuesta de la aplicación de sistemas de supresión es un factor crítico en la reducción de la cantidad de líquido vaporizado y que no depende del supresante.

La aplicación de los sistemas de supresión inicialmente fue sobre líquidos volátiles explosivos, donde las espumas de proteínas mostraron inmiscibilidad y estabilidad con el líquido derramado. Actualmente, el uso de los sistemas de supresión ha sido extendido a líquidos que pueden generar emisiones tóxicas. Por otra parte, el desarrollo tecnológico de los medios de supresión inició con el uso de surfactantes para aumentar la efectividad de la supresión por su inmiscibilidad con el líquido. En particular, el flúor fue utilizado para generar fluoroproteínas cuya baja expansión logra generar una capa de separación entre el líquido derramado y la espuma. El objetivo de esta capa es proteger la espuma del efecto destructivo que presentan líquidos altamente polares (Martinsen, 1992). En la actualidad, el diseño de sistemas de supresión requiere un análisis de la expansión, efectividad y estabilidad que estos muestren al ser aplicados.

La expansión que presenta una espuma es su capacidad de cubrir la mayor área posible y una altura considerable sobre el líquido derramado la cual puede ser cuantificable por una relación entre el volumen de la espuma y el peso de esta. La efectividad de la mitigación está basada en la cantidad de vapor que no es suprimido al aplicar el sistema de supresión respecto al vapor total que no recibe aplicación de espumas. La estabilidad está dada en la densidad que presente la espuma y depende de los materiales que conforman dicha espuma. Las observaciones sobre estabilidad de espumas demostraron que los materiales con mayor densidad y expansión, en particular acrilatos, cloruro de alilo y vinilidieno, logran una buena estabilidad durante un tiempo determinado superior a los demás casos (Scheffler *et al.*, 1993). Otros experimentos demostraron que las espumas alcalinas y las ácidas reducen notoriamente la vaporización de líquidos con los que tienen reacción (DiMaio y Norman, 1988).

#### **2.4.2. Mitigación con efecto de dilución**

El fenómeno de dilución está definido como la reducción de la concentración del fluido en dispersión a través de la modificación de su volumen por la aplicación de un fluido diluyente. La dilución de



nubes de gases tóxicos considera que no ocurre reacción o absorción entre el fluido mitigado y el mitigante (CCPS, 1997). Inicialmente, la aplicación de los sistemas de mitigación con dilución ha sido en la mitigación de nubes de dispersión de gases altamente inflamables (Mannan, 2005), aunque posteriormente se evitó el uso de aire para evitar explosiones. La Figura 2.7 muestra la aplicación de una cortina de vapor en la mitigación de la dispersión de gases inflamables. En dispersiones de gases tóxicos no inflamables el sistema de dilución puede utilizar fluidos como el aire, el vapor y el agua.

Los fluidos mitigantes en este tipo de mitigación crean un efecto de cortina o barrera física que depende de las características del sistema. Estas características son definidas por el flujo, temperatura, y todo lo concerniente con las boquillas u orificios como lo es la distancia de separación, el tipo de boquilla, y el diámetro (CCPS, 1997, Mannan, 2005, Rana et al., 2008). Además, la obstrucción al flujo del gas debido a la barrera producida por el fluido mitigante tiene gran efecto en la dilución por la generación de turbulencia.

La experimentación en este tipo de mitigación ha sido muy limitada por la cantidad de gases industriales que pueden presentar una dilución ya que la mayoría de estos muestran una gran capacidad de ser absorbidos. Entre algunos estudios para cortinas de aire se encuentra el realizado por Rulkens (1983) quien identifica al flujo de gas diluyente como un factor crítico, ver CCPS (1997). Sin embargo, los experimentos de van Zele y Diener (1990) demuestran que se puede reducir la concentración de materiales

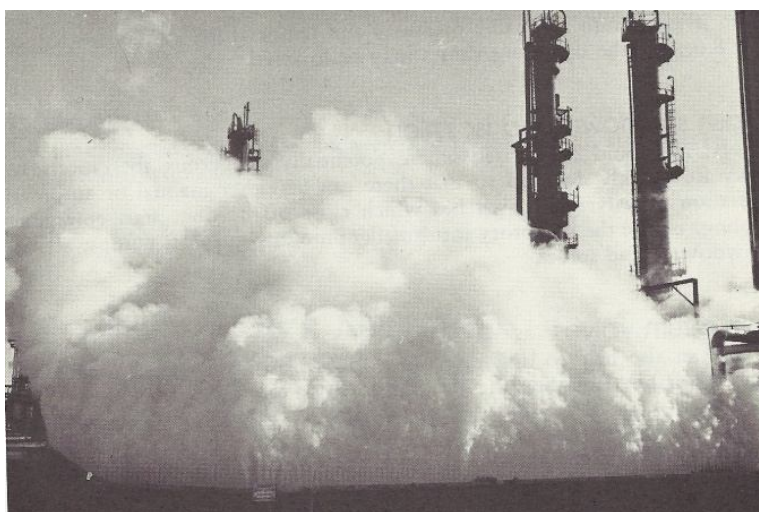


Figura 2.7. Cortina de vapor para mitigar gases inflamables, tomada de Mecklenburgh (1985).

altamente tóxicos por medio de cortinas de aire, ver CCPS (1997). En estos experimentos se observó que las concentraciones incrementan con la distancia después de mitigar la nube (CCPS, 1997). Por otra parte, los efectos de las cortinas de vapor son poco notorios cuando la nube en dispersión se aleja considerablemente del punto de emisión (Steidle et al., 1990, Meroney, 1993). Además, se ha detectado que un descenso en la velocidad del viento genera la posibilidad de que la nube de gas pase sobre la barrera si su altura es mayor a la altura de la nube (Steidle *et al.*, 1990).

El estudio de la mitigación por dilución utilizando agua como fluido mitigante ha mostrado una reducción súbita de la concentración en la dispersión y un cambio notorio en la forma de la nube (McQuaid y Fitzpatrick, 1983). Además, las velocidades de viento bajas generan poca turbulencia en la cortina de agua y aumentan la efectividad de la mitigación (Moodie, 1985). Cuando se usan boquillas, se ha observado que una orientación vertical en flujo ascendente solo es efectiva cuando el punto de mitigación es cercano al punto de emisión (Dimbour *et al.*, 2003a). Inclusive, la forma plana del esparado genera mayor resistencia al paso de la nube del gas y su turbulencia es menor favoreciendo la reducción de la concentración (Dimbour *et al.*, 2003a).

#### **2.4.3. Mitigación con efecto de absorción**

El fenómeno de mitigación por absorción es similar al proceso de absorción presente en la industria. La diferencia que presenta la absorción con el fenómeno de dilución es la retención del gas en el líquido (CCPS, 1997). Además, la mitigación por absorción incluye el efecto de las gotas del líquido mitigante y la posibilidad de reacción química con el gas mitigado (Schatz y Fthenakis, 1994). Por otra parte, el efecto de las condiciones ambientales es notorio como se observó en pruebas a campo abierto.

La aplicación de experimentos al fenómeno de mitigación por absorción ha sido particularizada por el comportamiento en cada gas en presencia de agua, como se observa con los gases cloro, amoníaco y ácido fluorhídrico. En el caso de gas cloro, los experimentos han concluido que el mayor tiempo de contacto y las boquillas de forma plana son más efectivos en la mitigación (Dimbour *et al.*, 2003b). Además, la velocidad de viento baja aumenta la eficiencia de la mitigación (Dimbour *et al.*, 2003a). Por otra parte,

el incremento de la absorción de gas cloro es posible al aplicar compuestos químicos al agua asperjada para realizar reacciones químicas como el tiosulfato de sodio y el yoduro de potasio (Puls *et al.*, 2001).

El amoníaco presenta saturación en agua lo cual genera dispersión densa y favorece la absorción. La efectividad en la absorción de amoníaco depende de los mismos factores observados en el gas cloro. Sin embargo, al aplicar la mitigación a una distancia mayor de 50 m no se obtiene un efecto considerable en la concentración (Bara y Dusserre, 1997). Por tal motivo, es recomendable mitigar a distancias cercanas del punto de emisión.

Las pruebas con ácido fluorhídrico concluyeron que el tamaño menor de la gota de agua, un espaciado mayor entre las boquillas y el uso de químicos como el carbonato de sodio aumentaron la eficiencia de la absorción (Schatz y Koopman, 1990). La mitigación de ácido fluorhídrico genera una reacción de disociación cuyas constantes de reacción han sido reportadas (Schatz y Fthenakis, 1994). La aplicación de agua en sistemas de mitigación requiere el uso de boquillas capaces de lograr una alta eficiencia en la mitigación.

Los sistemas de esparcido o asperjado son aplicados en procesos que presenten transferencia de masa y calor. El proceso de esparcido consiste en pasar un líquido a través de una boquilla. Esto incrementa la presión en el líquido y permite obtener ligamentos del líquido que posteriormente son rotos en pequeñas piezas denominadas gotas o partículas del líquido (Schick, 2006). Técnicamente el uso de aspersión permite el aprovechamiento del líquido por la gran cantidad de gotas formadas y un aumento del área total de transferencia.

La experiencia industrial ha mostrado un aumento de la efectividad de mitigación con el uso de gotas pequeñas. Asimismo, la colocación de espreas ascendentes contrarresta los vientos de altas velocidades y aumenta la eficiencia. La formación de las gotas se hace a diferentes rangos de tamaño debido a los efectos de la boquilla sobre el líquido presurizado como lo son la forma, tipo de esparcido y tamaño del orificio. También los efectos de las propiedades del líquido como tensión superficial, viscosidad y densidad son notorios en la distribución del tamaño de gota.

## Capítulo 3. MODELADO DE LA MITIGACIÓN DE GASES TÓXICOS

En este trabajo un modelo de mitigación de gases tóxicos ha sido formulado y su planteamiento y descripción se presentan en este capítulo. El capítulo inicia con la descripción de una serie de modelos matemáticos existentes sobre la mitigación de gases tóxicos. Posteriormente, se incluye la descripción de las consideraciones y restricciones del modelo planteado en este trabajo. Así, la formulación matemática del modelo es mostrada para tres distintos fluidos de mitigación: aire, agua y vapor. El capítulo incluye un caso de estudio que prueba la aplicación de los modelos de mitigación. Adicionalmente, el análisis del comportamiento de los fluidos es dado usando la técnica de *CFD*. El capítulo concluye con un análisis de sensibilidad del modelo desarrollado en los distintos fluidos.

### 3.1. Modelos en la mitigación de gases tóxicos

El modelado de mitigación de nubes de gases tóxicos calcula las características de la nube después de pasar por un sistema mitigante. Así, el modelo para representar este fenómeno requiere definir las condiciones de la nube al punto de mitigación, las condiciones atmosféricas y las características del sistema de mitigación. Estas últimas comprenden el flujo de fluido mitigante, temperatura, densidad, diámetro de la boquilla, ángulo de apertura de la boquilla, distancia de separación entre boquillas, y ubicación espacial de las boquillas. Además, algunas otras consideraciones vienen dadas por la existencia de turbulencia, la transferencia de calor y reacción entre el fluido mitigado y el mitigante, y la distribución del tamaño de las gotas del líquido mitigante. Desafortunadamente estas últimas consideraciones formulan modelos extremadamente complejos cuya solución representa acertadamente el fenómeno de mitigación.

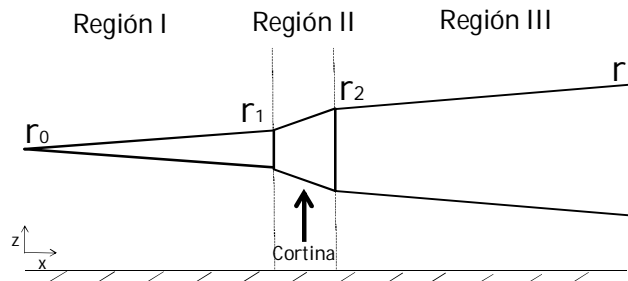


Figura 3.1 Sistema para el modelado de mitigación planteado por Moore y Rees (1981).

Los modelos de mitigación fueron planteados inicialmente para representar barreras sobre nubes de gases en dispersión. El modelo de McQuaid y Fitzpatrick (1981) fue desarrollado en forma de caja con un efecto notorio de la gravedad. Los resultados de este modelo demuestran un cambio en la forma de la nube y un decremento súbito en la concentración. La validación del modelo fue propuesta para una cortina de aire como sistema mitigante que actúa sobre una nube de dióxido de carbono donde se observó un incremento en la altura de la nube. Sin embargo, el modelo no considera la existencia de turbulencia y transferencia de calor, y está basado en una mezcla instantánea entre el aire y el gas lo cual lo hace matemáticamente sencillo.

La formulación de modelos más precisos inició con la propuesta de Moore y Rees (1981) donde se obtienen resultados semi-empíricos. La idea básica radica en una nube en forma de jet a la que se realiza la mitigación. La Figura 3.1 representa el sistema para el modelo de mitigación de Moore y Rees. La nube es seccionada en tres regiones sobre las que se desarrolla el modelo: región pre-mitigada (I), región de mitigación (II) y región post-mitigada (III). El modelo es formulado para obtener volumen, velocidad y dimensiones de la nube. La validación del modelo fue llevada a cabo para argón,  $\text{SF}_6$  y propano obteniendo una reducción de la concentración. Sin embargo, este planteamiento no considera el efecto térmico en la nube y la forma de jet es muy inadecuada para la mayoría de las dispersiones.

La consideración de las propiedades de los sistemas de mitigación en el cálculo de concentraciones de gases mitigados fue formulada inicialmente en el modelo de Meroney y Neff (1985). El cálculo de la velocidad de arrastre de la nube de dispersión después de la mitigación,  $w_e$ , fue necesaria para la obten-

ción de la concentración. Sin embargo, esta velocidad no fue planteada en función de las propiedades de la nube sino como función de la separación entre boquillas, número de boquillas y el ángulo de apertura de la boquilla.

El modelo propuesto por Favari *et al.* (1984) se caracteriza por el desarrollo de balances de materia de los flujos existentes en el sistema de mitigación. Básicamente el modelo consideró variación de la concentración en estado transitorio con mezcla perfecta y flujos de recirculación cercanos a la barrera de agua. La parte experimental se desarrolló en un túnel de viento cuyos resultados fueron cercanos a los determinados teóricamente. Sin embargo, el efecto de la temperatura no fue tomado en cuenta. La Figura 3.2 muestra el esquema de los posibles flujos en el modelo propuesto por Favari *et al.* (1984). Asimismo, Zonato *et al.* (1993) modificó la propuesta de Favari *et al.* (1984) al incluir una cinética de reacción entre el gas cloro y el agua. Un modelo similar fue propuesto y validado por Palazzi *et al.* (2007).

El uso de ecuaciones de conservación y transferencia de masa, momentum y energía ha sido un reto en el modelado de sistemas de mitigación. Fthenakis y Zakkay (1990) desarrollaron un modelo que describe el comportamiento de una nube de gas al ser mitigada. La variación de las propiedades de la nube se planteó para las 3 direcciones aplicando las ecuaciones de conservación y transferencia inclusive involucra a la turbulencia. El modelo incluye una reacción de pseudo-primer orden para la absorción del gas con el agua. Además, la distribución del tamaño de las gotas del agua fue incorporada para realizar balances de transferencia de calor y masa para cada tamaño de gota. La validación del modelo fue realizada con HF al pasar por una cortina de agua. Este modelo es el más completo definido en la literatura y sobre éste fue creado el programa HGSPRAY (Fthenakis, 1993).

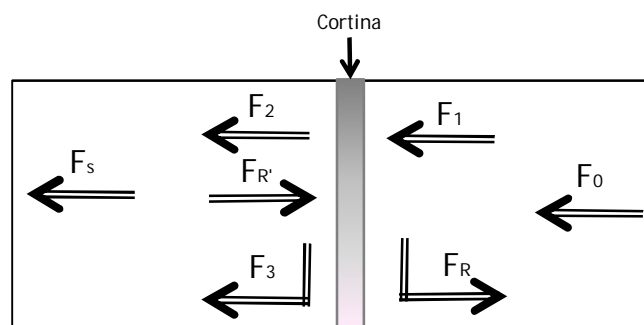


Figura 3.2 Sistema para el modelado de mitigación propuesto por Favari *et al.* (1984)

Es relevante aclarar que el desarrollo de ecuaciones de transferencia, conservación y de hidrodinámica que representan al fenómeno de mitigación no es el objetivo de este trabajo. Por tal motivo, los modelos de mitigación que se presentan en las siguientes secciones son suficientemente aceptables para el enfoque de este trabajo que se centra en la distribución óptima de facilidades industriales.

### **3.2. Consideraciones y suposiciones en el desarrollo de los modelos de mitigación**

Los modelos de sistemas de mitigación desarrollados en este trabajo están basados en balances de coraza para materia, especies, energía y momentum en las direcciones  $x$  y  $z$ . El planteamiento de las ecuaciones es de forma macroscópica y selecciona la zona de mitigación puntualmente en estado estacionario. Los modelos no consideran el efecto de la turbulencia durante la mitigación. El cálculo de los valores de concentración a la entrada de la mitigación es provisto por el modelo *SLAB*. Estos valores son considerados como valores de entrada en el sistema de mitigación. Por otra parte, el ancho de la nube,  $B$ , es el mismo antes y después de la aplicación del sistema de mitigación.

La nomenclatura en estos modelos está dada para las variables velocidad en la dirección del viento,  $U$ , velocidad perpendicular al flujo,  $V$ , velocidad vertical de la nube,  $W$ , densidad,  $\rho$ , temperatura,  $T$ , alto de la nube,  $h$ , composición de la nube,  $\omega$ , humedad,  $Y$ , y entalpía,  $H$ . Los subíndices utilizados son  $S$  para referirse a la nube mitigada o bien a la salida del sistema de mitigación,  $C$  para referirse a la nube sin mitigar o bien a la entrada al sistema de mitigación, y  $M$  para el sistema de mitigación.

Entre las consideraciones importantes se encuentra la definición de parámetros exclusivos de la mitigación. El primer parámetro a calcular es el área transversal del fluido mitigante. La forma del área es circular puesto que se considera que el flujo de las boquillas genera una forma cónica en el fluido. La Figura 3.3 ejemplifica la formación de un área transversal de mitigación con traslape. El cálculo del área está definido por la dimensión del círculo formado en el cono a una altura específica, el número de círculos y la existencia del traslape. El cálculo del área para un caso donde no exista traslape equivale a la suma del área de todos los círculos, es decir:

$$A_M = n \frac{\pi D_e^2}{4} \quad (3.1)$$

donde  $A_M$  es el área de mitigación,  $n$  es el número de círculos y  $D_e$  es el diámetro del círculo.

El área de mitigación para el caso de traslape es definida como la suma del área de un círculo completo y la porción restante. El área para  $n$  círculos sobrepuestos se define como:

$$A_M = \frac{\pi D_e^2}{4} + \left( \frac{B_S}{d_S} - 1 \right) \left[ \frac{d_S}{2} \sqrt{D_e^2 - d_S^2} + \frac{D_e^2}{2} \arcsen \frac{d_S}{D_e} \right] \quad (3.2)$$

donde  $d_S$  es la distancia de separación entre las boquillas.

El diámetro del círculo puede ser aproximado al diámetro equivalente de la aspersión, el cual ha sido definido por una alta transferencia de momentum en sistemas de espray. Matemáticamente, el diámetro equivalente puede ser expresado como (Ratcliff *et al.*, 1993):

$$D_e = \frac{\phi_M}{2} \sqrt{\frac{1}{\cos \frac{\alpha}{2}}} \quad (3.3)$$

donde  $\phi_M$  es diámetro de la boquilla y  $\alpha$  es el ángulo de apertura de la boquilla.

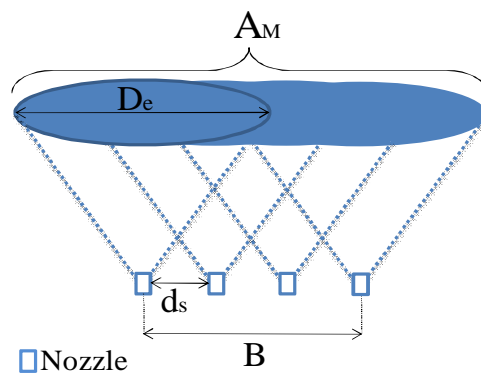


Figura 3.3 Área transversal al flujo del fluido mitigante propuesta.



Los parámetros para calcular el diámetro pueden ser obtenidos a través de la ecuación del cálculo del diámetro de manera geométrica. Esto es planteado para obtener el diámetro en el cono del fluido a una altura igual a la de la nube antes de ser mitigada,  $h_C$ , cuya definición es:

$$D_e = h_C \tan \frac{\alpha}{2} \quad (3.4)$$

Los modelos planteados para una cortina de aire o vapor desconocen el valor del ángulo de apertura de la boquilla y requieren la solución simultánea de las ecuaciones (3.3) y (3.4). Por otra parte, la cortina de agua considera un valor del ángulo de apertura definido por el tipo de boquilla, por lo cual el diámetro equivalente es obtenido por cualquiera de las dos expresiones anteriores.

La velocidad del sistema de mitigación,  $U_M$ , es otro parámetro a calcular. Esta velocidad es dada a una altura donde exista el diámetro equivalente. El cálculo de la velocidad depende de la fase del fluido mitigante. En el caso de fluido gaseoso la velocidad es obtenida a partir del flujo másico como:

$$U_M = \frac{Q_M}{A_M \rho_M} \quad (3.5)$$

donde  $\rho_M$  es la densidad del gas a condiciones ambiente y  $Q_M$  es el flujo másico total considerado como el producto del número de boquillas y el flujo másico de cada boquilla,  $Q_m$ .

El flujo másico por boquilla es obtenido de un balance de energía realizado en el punto de descarga. En este punto el gas experimenta una expansión isentrópica. Esta suposición permite calcular el flujo como (Crowl y Louvar, 2002):

$$Q_m = C_0 A_D P_0 \sqrt{\frac{2g_c P M_{Gas}}{RT_0} \frac{\gamma}{\gamma-1} \left[ \left( \frac{P}{P_0} \right)^{\frac{2}{\gamma}} - \left( \frac{P}{P_0} \right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma}} \right]} \quad (3.6)$$

donde  $g_C$  es una constante gravitacional,  $C_0$  es el coeficiente de descarga, considerado 1,  $R$  es la constante de los gases,  $T_0$  es la temperatura del fluido,  $PM_{Gas}$  es el peso molecular del fluido,  $\gamma$  es la relación de capacidades caloríficas del fluido,  $C_p/C_v$ ,  $P_0$  es la presión del fluido y  $P$  es la presión en el ambiente.

En el caso de un fluido mitigante líquido la velocidad es obtenida a partir de suposiciones realizadas sobre una cortina de agua. Heskestad *et al.* (1981) realizaron el cálculo de la variación de velocidad de descarga respecto a la altura para aire y gotas de agua. La obtención de la velocidad de descarga para las gotas de agua se obtiene al resolver las ecuaciones diferenciales:

$$\frac{d\hat{U}_G}{d\hat{z}} = \frac{A}{\hat{U}_G} - B \frac{(\hat{U}_G - \hat{U}_A)^{\frac{3}{2}}}{\hat{U}_G} \quad (3.7)$$

$$\frac{d\hat{U}_A}{d\hat{z}} = -\frac{\hat{U}_A}{\hat{z}} + BC \frac{1}{\hat{z}^2} \frac{(\hat{U}_G - \hat{U}_A)^{\frac{3}{2}}}{\hat{U}_G \hat{U}_A} \quad (3.8)$$

donde:

$$\hat{U}_G = \frac{U_G}{U_{G0}}$$

$$\hat{U}_A = \frac{U_A}{U_{G0}}$$

$$\hat{z} = \frac{z}{D_e}$$

$$A = g \frac{D_e}{U_{G0}}$$

$$B = \frac{3}{4} \xi v^{\frac{1}{2}} \frac{D_e}{D_G \sqrt{D_G U_{G0}}} \frac{\rho_A}{\rho_w}$$

$$C = \frac{1}{8} \frac{\rho_w}{\rho_A} \frac{1}{(\tan \alpha)^2}$$

$z$ , es la distancia recorrida en la dirección  $z$  por el flujo de las gotas,  $U_G$  y  $U_A$  son la velocidad de la gota y del aire, respectivamente;  $U_{G0}$  es la velocidad del agua en la descarga,  $\xi$  una constante con valor de 12.6,  $\rho_w$  es la densidad del agua,  $\rho_A$  es la densidad del aire y  $\nu$  es la viscosidad cinemática del aire. La velocidad de la gota es aquella calculada cuando  $z$  iguala a la altura de la nube.

Los modelos planteados en este trabajo requieren la definición de propiedades termodinámicas y de transporte del fluido a mitigar, por lo que las propiedades requeridas son incluidas en la Tabla 3.1.

### 3.3. Modelado de una cortina de aire

El modelado inicia con el desarrollo del balance de materia el cual está basado en los flujos de la nube de gas que entra al sistema de mitigación,  $U_C B_C h_C \rho_C$ , del aire mitigante que entra al sistema de mitigación,  $U_M A_M \rho_M$ , y de la nube de gas que sale del sistema de mitigación,  $U_S B_S h_S \rho_S$ . De esto se obtiene el balance de materia:

$$U_C B_C h_C \rho_C + U_M \rho_M A_M = U_S B_S h_S \rho_S \quad (3.9)$$

El balance para las especies es realizado sobre la cantidad de aire, el gas y la humedad. Inicialmente, el balance para el aire incluye la cantidad de aire en la nube de gas que entra al sistema de mitigación sin humedad,  $U_C B_C h_C \rho_C (1 - \omega_C)$ , el aire mitigante que entra al sistema de mitigación,  $U_M A_M \rho_M (1 - Y_M)$  y el aire que sale del sistema de mitigación,  $U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S)(1 - Y_S)$ . Así, el balance de materia para el aire es:

$$U_C B_C h_C \rho_C (1 - \omega_C) + U_M \rho_M A_M (1 - Y_M) = U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S)(1 - Y_S) \quad (3.10)$$

Tabla 3.1 Propiedades para algunos gases densos considerados tóxicos.

Parámetro	Cl <sub>2</sub>	Br <sub>2</sub>	HCN	CCl <sub>4</sub>	NH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> S	COCl <sub>2</sub>
Peso molecular (Kg/Kg mol)	70.906	159.808	27.023	153.823	17.031	34.08	98.916
Temp. ebullición (K)	240	332	280	350	240	212	280
Densidad <sup>1</sup> (Kg/m <sup>3</sup> )	3.21	3.1	0.94	5.3	0.86	1.93	4.35
Cp <sup>2</sup> : Ax10 <sup>-10</sup>	2.653	1.098	12.57	173.446	-274.02	-15.931	79.004
Cp <sup>2</sup> : Bx10 <sup>-7</sup>	-12.1	-5.053	-31.24	-257.6	3.525	23.885	-122.7
Cp <sup>2</sup> : Cx10 <sup>-4</sup>	18.901	8.334	52.68	193.28	39	9.869	109.37
Cp <sup>2</sup> : D	7.973	8.552	8.195	18.361	8.277	8.031	13.768
Viscosidad <sup>1</sup> x10 <sup>-5</sup> (Kg/m*s)	1.245	1.229	0.258	1	1.012	1.26	1.162
Conductividad <sup>1</sup> x10 <sup>-3</sup> (J/s*m*K)	8.9	6.97	11.87	6.48	24.66	13.71	8.71
Henry <sup>3</sup> (Kg/m <sup>3</sup> de agua)	6.37	126.248	202.673	5.538	952	3.34	0.124
Lennard-Jones <sup>4</sup> : ε/K	357	448.17	149.7	376.86	200	277.2	342.3
Lennard-Jones <sup>4</sup> : σ	4.115	4.055	3.796	6.241	3.294	3.68	4.548
Probit <sup>5</sup> : A	-8.29	-9.04	-29.42	-6.29	-35.9	-31.42	-19.27
Probit <sup>5</sup> : B	0.92	0.92	3.008	0.408	1.85	3.008	3.686
Probit <sup>5</sup> : n	2	2	1.43	2.5	2	1.43	1

1. (Yaws, 1978).

2. (Henly y Seader, 1999).

3. (Sander, 1999).

4. (Cuadros et al., 1996, Churakov y Gottschalk, 2003).

5. (CCPS, 1989a).

Cp=AT<sup>3</sup>+BT<sup>2</sup>+CT+D, T[=]°F, Cp[=]BTU/°F-lbmol, T<sub>ref</sub>= 0°F.

Y=A+Bln(C<sup>n</sup>t), t[=]s, C[=]ppm.

El balance de materia para el gas considera los flujos de materia para gas en la nube que entra al sistema de mitigación,  $U_C B_C h_C \rho_C \omega_C$ , y el gas que sale del sistema de mitigación,  $U_S B_S h_S \rho_S \omega_S$ . Así, el balance de materia para el gas es:

$$U_C B_C h_C \rho_C \omega_C = U_S B_S h_S \rho_S \omega_S \quad (3.11)$$

Finalmente, el balance para la humedad considera la humedad en los flujos, iniciando con la humedad que entra al sistema de mitigación en el aire mitigante,  $U_M \rho_M A_M Y_M$  y la humedad que sale del sistema de mitigación,  $U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S) Y_S$ . De lo anterior, el balance de materia para la humedad es:

$$U_M \rho_M A_M Y_M = U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S) Y_S \quad (3.12)$$

El balance de energía está basado en el uso de entalpías a través de las capacidades caloríficas en función de la temperatura. El balance incluye la energía que entra al sistema de mitigación por la nube de gas,  $U_C B_C h_C \rho_C H_C$ , la energía que entra al sistema de mitigación por el aire mitigante,  $U_M A_M \rho_M H_M$  y la energía que sale del sistema de mitigación por la nube mitigada,  $U_S B_S h_S \rho_S H_S$ . Así, el balance de energía es:

$$U_C B_C h_C \rho_C H_C + U_M \rho_M A_M H_M = U_S B_S h_S \rho_S H_S \quad (3.13)$$

El balance de momentum en la dirección  $x$  es planteado por única vez en esta sección ya que es el mismo para los demás sistemas de mitigación planteados en este trabajo. Este balance parte de la ecuación de momentum:

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} = -\frac{\partial \rho U U}{\partial x} - \frac{\partial \rho U V}{\partial y} - \frac{\partial \rho U W}{\partial z} - \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} - \frac{\partial P}{\partial x} + \rho g_x$$

La expresión es reducida al considerar estado estacionario, sin efectos convectivos de  $U$  sobre  $V$  y  $U$  sobre  $W$  y esfuerzos cortantes despreciables; de tal forma que:

$$-\frac{\partial \rho U U}{\partial x} - \frac{\partial P}{\partial x} = 0.$$

Si se toma un punto inicial, el considerado antes de aplicar la mitigación, y final, el posterior a la mitigación, se replantea la ecuación como:

$$\rho U U|_1 - \rho U U|_2 + P|_1 - P|_2 = 0 \quad (3.14)$$

donde:

$$\rho U U|_1 = \rho_c U_c^2 B_c h_c$$

$$\rho U U|_2 = \rho_s U_s^2 B_s h_s$$

$$P|_1 = \frac{g}{2} h_c (\rho_c - \rho_A) \cdot B_c h_c$$

$$P|_2 = \frac{g}{2} h_s (\rho_s - \rho_A) \cdot B_s h_s$$

Los términos de presión provienen de la diferencia entre la presión ejercida por el aire y la presión de la flotación en la nube. La sustitución en la ecuación (3.14) genera la expresión:

$$\frac{g}{2} h_C^2 B_C (\rho_C - \rho_A) - \frac{g}{2} h_S^2 B_S (\rho_S - \rho_A) + \rho_C h_C B_C U_C^2 - \rho_S h_S B_S U_S^2 = 0 \quad (3.15)$$

El balance de momentum en la dirección  $z$  es similar para el resto de los sistemas de mitigación, excepto en el agua en el cual se agrega la fuerza generada por la gotas. De manera similar al balance anterior se parte de la ecuación de momentum pero ahora en la dirección  $z$ :

$$\frac{\partial \rho W}{\partial t} = -\frac{\partial \rho W W}{\partial z} - \frac{\partial \rho U W}{\partial x} - \frac{\partial \rho V W}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} - \frac{\partial P}{\partial z} + \rho g_z$$

La expresión se reduce al considerar el estado estacionario sin efectos convectivos de  $W$  sobre  $V$  y  $W$  sobre  $U$ , y despreciando los esfuerzos cortantes:

$$-\frac{\partial \rho W W}{\partial z} - \frac{\partial P}{\partial z} + \rho g_z = 0.$$

Tomando un punto inicial y uno final en el sistema de mitigación en forma similar al balance de momentum en  $x$  se obtiene:

$$\rho W W|_1 - \rho W W|_2 + P|_1 - P|_2 - \rho|_2^1 g_z \partial z = 0 \quad (3.16)$$

donde:

$$\rho WW|_1 = A_M V_M^2 \rho_M + B_C h_C W_C^2 \rho_C$$

$$\rho WW|_2 = B_S h_S W_S^2 \rho_S$$

$$P|_1 = \frac{g}{2} h_C (\rho_C - \rho_A) \cdot B_C h_C$$

$$P|_2 = \frac{g}{2} h_S (\rho_S - \rho_A) \cdot B_S h_S$$

$$\rho|_2 g_z \partial z = g_z (h_C - h_S) \rho|_2 = g_z (h_C - h_S) (B_C h_C \rho_C - B_S h_S \rho_S)$$

El primer término representa la suma de fuerzas en dirección  $z$  de la nube y el fluido mitigante.

Aplicando las expresiones anteriores en la ecuación (3.16) se tiene:

$$B_S h_S W_S^2 \rho_S - A_M U_M^2 \rho_M - B_C h_C W_C^2 \rho_C + \frac{g}{2} B_S h_S^2 (\rho_S - \rho_A) - \frac{g}{2} B_C h_C^2 (\rho_C - \rho_A) + g (B_C h_C \rho_C - B_S h_S \rho_S) (h_C - h_S) = 0 \quad (3.17)$$

Un análisis de grados de libertad muestra que este modelo tiene un total de 13 ecuaciones que son los balances del sistema, ecuaciones (3.10) - (3.17), el cálculo del área transversal del aire, ecuación (3.2), la densidad de la nube, ecuación (2.32), el diámetro equivalente, ecuaciones (3.3) - (3.4), la suposición que  $B_C = B_S$ , el cálculo de la velocidad del sistema de mitigación a partir del flujo y el diámetro del orificio, ecuación (3.5), y el flujo másico en la descarga de aire, ecuación (3.6). Por otra parte, el número de variables se agrupa en:



Propiedades de la nube que entra al sistema:  $B_C, h_C, T_C, \omega_C, \rho_C, U_C, W_C$

Sistema de mitigación:  $U_M, A_M, Y_M, T_M, \rho_M, n$

Nube mitigada:  $B_S, h_S, T_S, \omega_S, \rho_S, U_S, W_S, Y_S$

Área transversal:  $D_e, d_S$

Diámetro equivalente,  $\alpha$

Flujo de mitigación,  $\phi_M, Q_m, P_0$

El número de variables obtenidas es 27 en 13 ecuaciones por lo que se tienen 14 grados de libertad los cuales corresponden a 7 variables que reflejan a las propiedades de la nube que entra al sistema, el número de boquillas, la densidad del aire de mitigación y las variables manipulables:  $Y_M, P_0, \phi_M, T_M, d_S$ . Así, el sistema de ecuaciones se usa para determinar  $B_S, h_S, T_S, \omega_S, \rho_S, U_S, W_S, Y_S, D_e, U_M, A_M, \alpha, Q_m$ .

### 3.4. Modelado de una cortina de agua

El balance de materia considera los flujos definidos en la nube de gas que entra al sistema de mitigación,  $U_C B_C h_C \rho_C$ , el aire mitigante que entra al sistema de mitigación,  $U_A A_M \rho_A$ , el agua asperjada que entra al sistema de mitigación,  $V_L \rho_L$ , la nube de gas que sale del sistema de mitigación,  $U_S B_S h_S \rho_S$  y el agua que sale como líquido derramado,  $L_L \rho_L$ . De lo anterior, el balance de materia es:

$$U_C B_C h_C \rho_C + U_A \rho_A A_M + V_L \rho_L = U_S B_S h_S \rho_S + L_L \rho_L \quad (3.18)$$

El balance de las especies es definido similarmente al planteado en la sección anterior. En el caso del gas se incluye el efecto de absorción. Se plantea con los flujos de gas en la nube que entra al sistema de mitigación,  $U_C B_C h_C \rho_C \omega_C$ , el gas en la nube que sale del sistema de mitigación,  $U_S B_S h_S \rho_S \omega_S$  y el gas absorbido por el líquido derramado calculado por medio de la ley de Henry,  $L_L H_G$ . Así, el balance de materia para el gas es:

$$U_C B_C h_C \rho_C \omega_C = U_S B_S h_S \rho_S \omega_S + L_L H_G \quad (3.19)$$

El balance de materia para el aire considera la cantidad de aire en los distintos flujos; es decir, el aire en la nube de gas que entra al sistema de mitigación sin humedad,  $U_C B_C h_C \rho_C (1 - \omega_C)$ , el aire mitigante que entra al sistema de mitigación,  $U_A A_M \rho_A$ , y el aire que sale del sistema de mitigación,  $U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S)(1 - Y_S)$ . El balance de materia para el aire es:

$$U_C B_C h_C \rho_C (1 - \omega_C) + U_A \rho_A A_M = U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S)(1 - Y_S) \quad (3.20)$$

El balance de materia para la humedad considera la humedad que entra al sistema de mitigación por el aire mitigante,  $V_L \rho_L$ , la humedad que sale del sistema de mitigación en la nube mitigada,  $U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S) Y_S$  y el agua que sale como líquido derramado,  $L_L \rho_L$ . De lo anterior se formula el balance de materia para la humedad como:

$$V_L \rho_L = U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S) Y_S + L_L \rho_L \quad (3.21)$$

La cantidad de masa de agua evaporada desde la gota depende de la transferencia de masa y de calor en la gota. Las gotas son consideradas esferas de un mismo tamaño; es decir, no existe distribución de tamaños de las gotas. La transferencia de masa se propone como:

$$U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S) Y_S = K_G N_G A_G \rho_A ((1 - \omega_S) Y_S - X^{\circ}) \quad (3.22)$$

donde  $K_G$  es el coeficiente de transferencia de masa de la gota al aire y  $A_G$  es el área de la superficie de la gota.  $N_G$  es el número de gotas y es definido por:

$$N_G = \frac{V_L}{\frac{1}{6}\pi D_G^3} \quad (3.23)$$

Un término más por definir de la Ecuación (3.22) es la composición de agua en la nube de gas a la saturación,  $X^\circ$ , calculada por:

$$X^\circ = \frac{P_{H_2O}^*}{P_T - P_{H_2O}^*} \left( \frac{PM_{H_2O}}{PM_{Gas}} \right) \quad (3.24)$$

donde  $P_{H_2O}^*$  es la presión de vapor en el equilibrio para el agua.

El coeficiente de transferencia de masa del agua evaporada de la Ecuación (3.22) puede calcularse con la correlación (St-Georges y Buchlin, 1995):

$$\frac{K_G \frac{D_G}{D_{GW}} - 2}{\text{Re}^{1/2} \text{Sc}^{1/3}} = 0.562 + 0.1807 D_G^{1/2} + 0.0672 \lambda (\lambda + 0.05) \text{Re}^{1/2} \quad (3.25)$$

donde  $D_{GW}$  es el coeficiente de difusividad molecular entre el gas y el agua y se calcula con la expresión propuesta por Hirschfelder (Bird *et al.*, 1998). En tal expresión  $\lambda$  es un parámetro definido como:

$$\lambda = \frac{\sqrt{U_G U_A}}{|U_G - U_A|} \quad (3.26)$$

donde  $U_G$  es la velocidad de la gota obtenida de la solución de las Ecuaciones (3.7) y (3.8).

El número de Reynolds para la gota es planteado como:

$$\text{Re} = \frac{U_G D_G}{\nu_A} \quad (3.27)$$

donde  $\nu_A$  es la viscosidad cinemática del aire.

El número de Schmidt,  $Sc$ , es calculado como:

$$Sc = \frac{\mu_{gas}}{\rho_{gas} D_{GW}} \quad (3.28)$$

donde  $\mu_{gas}$  es la viscosidad dinámica del gas en dispersión, y  $\rho_{gas}$  es la densidad del gas en dispersión.

El balance de energía para el sistema de mitigación de agua considera la energía que entra al sistema de mitigación en la nube de gas,  $U_C B_C h_C \rho_C H_C$ , la energía que entra al sistema de mitigación en el aire mitigante,  $U_A \rho_A A_M H_M$ , la energía que entra al sistema de mitigación en el agua mitigante,  $V_L \rho_L H_{VL}$ , la energía que sale del sistema de mitigación en la nube mitigada,  $U_S B_S h_S \rho_S H_S$ , la energía que sale del sistema de mitigación en el agua derramada,  $L_L \rho_L H_L$  y la energía transferida por las gotas de agua,  $Q_V$ .

El balance de energía es:

$$U_C B_C h_C \rho_C H_C + U_A \rho_A A_M H_M + V_L \rho_L H_{VL} = U_S B_S h_S \rho_S H_S + L_L \rho_L H_L + Q_V \quad (3.29)$$

La energía transferida por las gotas de agua contempla la vaporización de las gotas y la transferencia de calor en la superficie de la gota. La suma de estas energías se representa por:

$$Q_V = N_G h A_G (T_S - T_M) + \lambda_L (V_L \rho_L - L_L \rho_L) \quad (3.30)$$

El primer término a la derecha de la igualdad corresponde a la transferencia de calor y el segundo a la vaporización de la gota. Cabe señalar que la gota evapora en su totalidad. El término  $h$  es el coeficiente de transferencia de calor calculado por la correlación (St-Georges y Buchlin, 1995):

$$\frac{h \frac{D_G}{k_{gas}} - 2}{\text{Re}^{\frac{1}{2}} \text{Pr}^{\frac{1}{3}}} = 0.562 + 0.1807 D_G^{\frac{1}{2}} + 0.0672 \lambda (\lambda + 0.05) \text{Re}^{\frac{1}{2}} \quad (3.31)$$

donde  $k_{gas}$  es la conductividad térmica del gas, y Pr es el número de Prandtl expresado como:

$$\text{Pr} = \frac{\mu_{gas} C_{p_{gas}} \Big|_{T=T_S}}{k_{gas}} \quad (3.32)$$

El balance de momentum en  $x$  es el mismo planteado en la sección anterior, Ecuación (3.15); y, el balance para  $z$  es similar al planteado para la cortina de aire, Ecuación (3.17), y solo difiere en la incorporación de la fuerza impulsora por las gotas de agua. La fuerza impulsora es positiva cuando se tengan boquillas acomodadas de forma ascendente, de lo contrario será descendente, para tener:

$$B_S h_S W_S^2 \rho_S - A_M U_A^2 \rho_A - B_C h_C W_C^2 \rho_C + \frac{g}{2} B_S h_S^2 (\rho_S - \rho_A) - \frac{g}{2} B_C h_C^2 (\rho_C - \rho_A) + g (B_C h_C \rho_C - B_S h_S \rho_S) (h_C - h_S) \pm F_G = 0 \quad (3.33)$$

donde  $F_G$  es la fuerza impulsora de las gotas y se calcula por la correlación (Heskestad *et al.*, 1981):

$$F_G = 4.95 \rho_A v_A^{\frac{1}{2}} D_G (U_G - U_A)^{\frac{3}{2}} \quad (3.34)$$

Un análisis de grados de libertad sobre este modelo muestra que existen un total de 25 ecuaciones que son los balances del sistema, ecuaciones (3.18), (3.19), (3.21), (3.15), (3.29), (3.33) - (3.34), el cálculo del área transversal del aire, ecuación (3.2), la densidad de la nube, ecuación (2.32), el diámetro equivalente, ecuación (3.4), la suposición que  $B_C=B_S$  y las referentes a la transferencia de calor y masa en las gotas, ecuaciones (3.22) - (3.25), (3.31), (3.30), incluyendo la ecuación de Hirschfelder para la difusividad, la obtención de la presión de saturación, el cálculo del área de la gota, el cálculo de los números de Reynolds, Schmidt y Prandtl, y las ecuaciones diferenciales para cálculo de la velocidad, ecuaciones (3.7) y (3.8). Por otra parte, el número de variables se agrupa en:

Propiedades de la nube que entra al sistema:  $B_C, h_C, T_C, \omega_C, \rho_C, U_C, W_C$

Sistema de mitigación:  $U_A, U_G, A_M, T_M, \rho_A, \rho_L, F_G, V_L, L_L, H_G$

Nube mitigada:  $B_S, h_S, T_S, \omega_S, \rho_S, U_S, W_S, Y_S$

Área transversal:  $D_e, d_S$

Diámetro equivalente,  $\alpha$

Velocidad de mitigación,  $\phi_M$

Transferencia de Masa:  $P_{H_2O}^*, X^\circ, D_{GW}, P_T, K_G, N_G, A_G, D_G, \rho_{gas}, \mu_{gas}, Re, Sc$

Transferencia de calor:  $Q_V, h, k_{gas}, Pr, Cp_{gas}, \lambda_L,$

El número de variables obtenidas es 47 en 25 ecuaciones por lo que se tienen 22 grados de libertad los cuales corresponden a 7 variables que reflejan a las propiedades de la nube que entra al sistema, densidad del aire de mitigación y del agua, presión barométrica, la constante de Henry, entalpía de vaporización del agua y la densidad, viscosidad, conductividad térmica y capacidad calorífica del gas, y las variables manipulables:  $V_L, \phi_M, T_M, d_S, \alpha, D_G$ . Así, el sistema de ecuaciones se usa para determinar  $B_S, h_S, T_S, \omega_S, \rho_S, U_S, W_S, Y_S, D_e, U_A, U_G, L_L, D_e, D_{GW}, A_G, N_G, K_G, F_G, A_M, Re, Sc, Pr, Q_V, P_{H_2O}^*, X^\circ$ .

### 3.5. Modelado de una cortina de vapor

El balance de materia considera la masa de la nube de gas que entra al sistema de mitigación,  $U_C B_C h_C \rho_C$ , la masa del vapor mitigante que entra al sistema de mitigación,  $V_M A_M \rho_M$ , y la masa que sale del sistema de mitigación,  $U_S B_S h_S \rho_S$ . Así, el balance de materia es:

$$U_C B_C h_C \rho_C + V_M \rho_M A_M = U_S B_S h_S \rho_S \quad (3.35)$$

El balances de especies considera al aire, el gas y el agua; esta última dada por la humedad de la nube y el vapor de tal forma que, para el aire, se incluye el aire seco en la nube de gas que entra al sistema de mitigación,  $U_C B_C h_C \rho_C (1 - \omega_C)$  y el aire húmedo que sale del sistema de mitigación,  $U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S) (1 - Y_S)$ . El balance de materia para el aire es:

$$U_C B_C h_C \rho_C (1 - \omega_C) = U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S) (1 - Y_S) \quad (3.36)$$

El balance para el agua considera el vapor que entra al sistema de mitigación por el aire mitigante,  $V_M \rho_M A_M$ , y la humedad que sale del sistema de mitigación,  $U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S) Y_S$ . Así, el balance de materia para el agua es:

$$U_M \rho_M A_M Y_M = U_S B_S h_S \rho_S (1 - \omega_S) Y_S \quad (3.37)$$

El balance de energía planteado para la cortina de vapor toma en cuenta la energía que entra al sistema de mitigación en la nube de gas,  $U_C B_C h_C \rho_C H_C$ , la energía que entra al sistema de mitigación en el vapor mitigante,  $V_M \rho_M A_M H_M$  y la energía que sale del sistema de mitigación en la nube mitigada,  $U_S B_S h_S \rho_S H_S$ . De lo anterior se obtiene el balance:

$$U_c B_c h_c \rho_c H_c + V_M \rho_M A_M H_M = U_s B_s h_s \rho_s H_s \quad (3.38)$$

Los balances de momentum son idénticos al sistema de aire. Por otra parte, un análisis de grados de libertad muestra que el modelo planteado para la cortina de vapor tiene un total de 15 ecuaciones que incluye a los balances del sistema, ecuaciones (3.36)- (3.38), (3.11), (3.15) (3.17), el cálculo del área transversal del aire, ecuación (3.2), la densidad de la nube, ecuación (2.32), la densidad y temperatura del vapor en función de la presión de mitigación así como el diámetro equivalente, ecuaciones (3.3) - (3.4), la obtención de la velocidad del vapor a partir del flujo másico, ecuación (3.5), la suposición  $B_c=B_s$ , y el cálculo del flujo másico en la descarga, ecuación (3.6). Por otra parte, el número de variables se agrupa en:

Propiedades de la nube que entra al sistema:  $B_c, h_c, T_c, \omega_c, \rho_c, U_c, W_c$

Sistema de mitigación:  $U_M, Q_m, A_M, T_M, \rho_M, n$

Nube mitigada:  $B_s, h_s, T_s, \omega_s, \rho_s, U_s, W_s, Y_s$

Área transversal:  $D_e, d_s$

Diámetro equivalente,  $\alpha$

Flujo de mitigación,  $\phi_M, P_0$

El número de variables obtenidas es 26 en 15 ecuaciones por lo que se tienen 11 grados de libertad los cuales corresponden a 7 variables que reflejan las propiedades de la nube que entra al sistema, el número de boquillas, y las variables manipulables  $P_0, \phi_M$  y  $d_s$ . Así, el sistema de ecuaciones se usa para determinar  $B_s, h_s, T_s, \omega_s, \rho_s, U_s, W_s, Y_s, D_e, U_M, A_M, \rho_M, \alpha, T_M$  y  $Q_m$ .

### 3.6. Caso de estudio de los modelos de mitigación

El caso de estudio aquí presente está enfocado a aplicar los modelos de mitigación sobre una emisión de gas. La emisión es dada para gas cloro que fluye a través de una tubería de 1 pulgada con veloci-



dad de 70 m/s, temperatura de 240 K y densidad de 3.21 Kg/m<sup>3</sup>. Este escenario de emisión es tomado de Hanna *et. al.* (2009). Por otra parte, los parámetros atmosféricos, velocidad del viento y clase atmosférica, son definidos para el peor escenario que fue definido en la subsección 2.1.4. Adicionalmente, las propiedades del aire ambiente son para una atmósfera estándar con temperatura de 298 K y humedad absoluta del 45%; la densidad para este aire es de 0.965 Kg/m<sup>3</sup>, obtenida por la ecuación de gas ideal.

Los sistemas de mitigación fueron definidos a una distancia de 5 m del punto de emisión. La mitigación con una cortina de aire fue considerada para una presión de 5 atm y temperatura de 280 K a través de una boquilla de 1¼ pulgada con distancia de separación entre orificios de 20 cm. Las propiedades del aire son tomadas para aire comprimido con una humedad absoluta de 40%, densidad a presión atmosférica de 1.04 Kg/m<sup>3</sup> obtenida por gas ideal. La cortina de agua fue se consideró con una producción de gotas de 300 µm a 298 K, un flujo de 20 gpm, orificio de ¾ de pulgada, ángulo de 120° y una distancia de separación entre orificios de 20 cm. El sistema de cortina de vapor consideró vapor a 7 bar a través de orificios de 1 ¼ de pulgada y distancia de separación de 20 cm.

La solución de los modelos de mitigación fue posible por un código desarrollado en *Microsoft Visual C++*. Los resultados muestran que para los tres sistemas de mitigación existe un descenso súbito en la concentración. Este resultado concuerda con los resultados experimentales presentados por McQuaid y Fitzpatrick (1983). Además, la cortina de agua fue el sistema de mitigación que logró una mayor reducción de la composición para este caso de estudio. Pero, resultados semejantes podrían obtenerse del sistema de aire y el sistema de vapor al aumentar el flujo de estos, lo cual incrementaría notoriamente el costo. La altura de la nube incrementó al contacto con los sistemas de mitigación como lo reportado experimentalmente por Meroney y Neff (1985). En esta variable se observó un aumento mayor por la cortina de aire debido al efecto de su velocidad vertical que supera al del agua. Por otra parte, los tres sistemas mostraron un efecto de pared sobre la nube al disminuir la velocidad de esta. El efecto mayor en la velocidad fue obtenido por la cortina de agua debido al efecto por el ángulo de apertura de las boquillas indicado anteriormente. Finalmente, la temperatura resultante de la mitigación estuvo ligada totalmente a la

temperatura del fluido mitigante. La cortina de vapor incrementó notoriamente la temperatura de la nube. Estos resultados son mostrados esquemáticamente en la Figura 3.4.

Los resultados discutidos en esta sección solo comparan los tres sistemas de mitigación y no concluyen sobre el efecto de las variables de estos. Por lo cual, un análisis de sensibilidad fue llevado a cabo para concluir sobre las variables de mayor afectación en el modelo para cada sistema de mitigación.

### 3.8. Análisis de sensibilidad de modelos de mitigación

En el análisis de sensibilidad es importante determinar la medición de la variación de las variables. Esto es definido como:

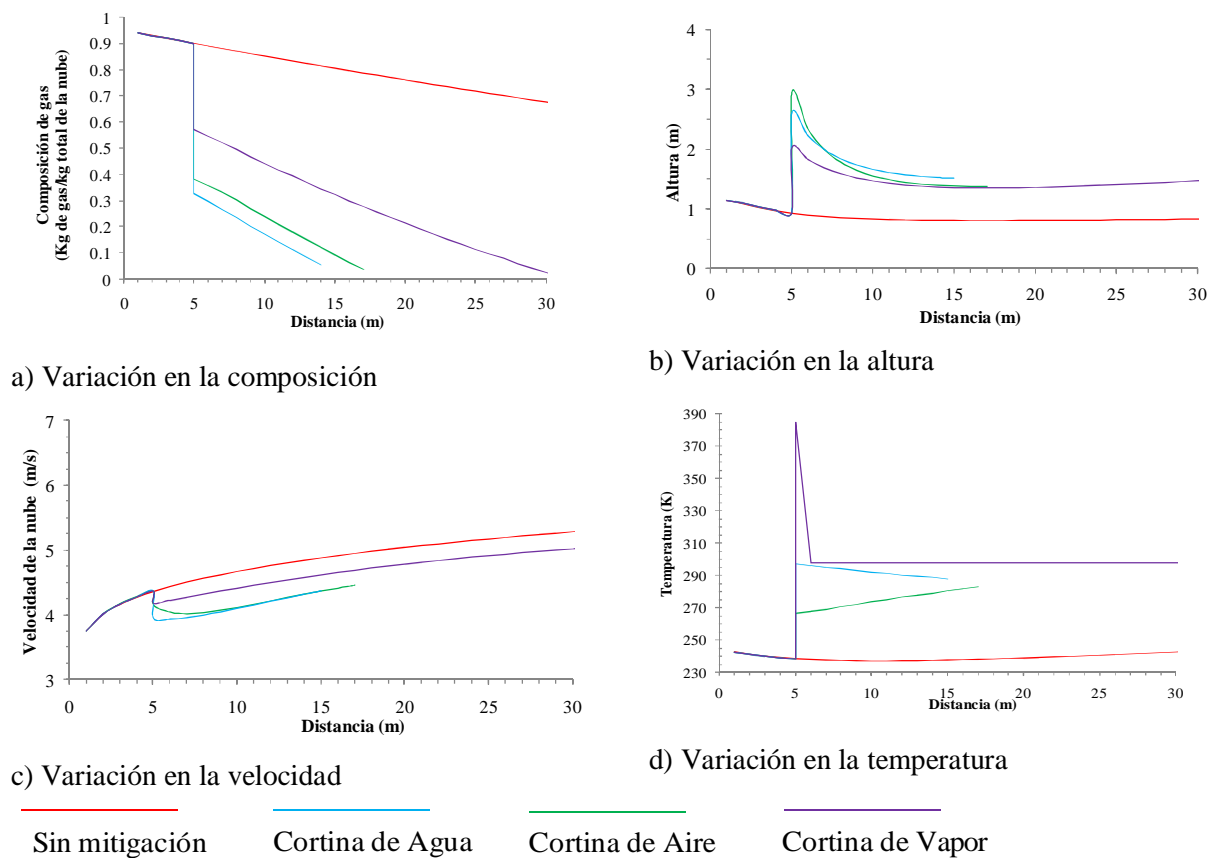


Figura 3.4 Resultados obtenidos por los modelos de mitigación sobre un caso de estudio específico.

$$S_i = \frac{\partial X}{\partial V_i} \Big|_{V_j, j \neq i, \forall j, i} \quad (3.39)$$

donde  $S_i$  es el valor de significancia o de variación de la variable de salida  $X$ , por efecto de un cambio en la variable de entrada  $V_i$ , manteniendo constantes el resto de las variables de entrada  $V_j$ . Sin embargo, el análisis de sensibilidad para modelos y experimentos presenta técnicas muy elaboradas que no solamente están basadas en una derivada sino que todas las variables permanecen constantes.

En la actualidad es difícil seleccionar un método de sensibilidad por las ventajas y desventajas que cada técnica representa sobre un problema en particular. Por lo cual, los métodos de análisis de sensibilidad han sido clasificados como globales y locales (Saltelli *et al.*, 2008). El análisis de sensibilidad global está enfocado en problemas que tratan de abarcar toda la gama de valores de las variables de entrada. La obtención de los valores puede ser de forma azarosa o siguiendo una distribución de probabilidad. En este tipo de análisis es aplicable el método Monte Carlo junto a un análisis de regresión o la descomposición de varianza que incluye los métodos ANOVA, FAST, Sobol, etc. Por otra parte, los métodos locales son aplicables preferentemente a modelos matemáticos. Estos métodos están enfocados en calcular la variación de una variable de salida usando el cálculo numérico de su derivada respecto a una variable de entrada, lo cual representa un cambio local de la variable de salida. Los métodos locales pueden ser dados sobre el manejo del modelo de forma indirecta o directa. Además, el uso de estos métodos no es recomendable en variables que presenten incertidumbre.

En el análisis de sensibilidad, la selección de las variables de entrada y el orden en que estas son usadas pueden ser definidos por un método de búsqueda. Los métodos de búsqueda son aplicables a variables que no pueden ser generadas de forma aleatoria. Además, estos métodos pueden ser aplicados a análisis de sensibilidad tanto local como global. Un método de búsqueda aplicado en el análisis de sensibilidad local es el llamado *uno a la vez* (*OAT* por sus siglas en inglés) cuyo empleo es sencillo, ya que una variable está cambiando mientras las demás permanecen constantes. Por otra parte, en el análisis de sen-

sibilidad global se requieren métodos más sofisticados como lo son el diseño de Morris, el diseño de Cotter y el diseño factorial de Andres.

El análisis de sensibilidad aplicado a los modelos de mitigación considera la emisión y condiciones atmosféricas descritas en el caso de estudio. Además, los modelos de mitigación cuentan con variables reales y positivas como son: presión, flujo, temperatura, distancia de separación entre orificios, etc., y la variable discreta del diámetro de orificio. Los valores de esta variable discreta son tomados de catálogos especializados en boquillas para sistemas de mitigación (BETE Fog Nozzle, 2007). Por lo anterior, se ha optado por un análisis de sensibilidad que emplee un método de búsqueda *OAT*. Sin embargo, un método Monte Carlo es una opción aceptable pero requiere la aplicación de un método de sensibilidad global. Así, un análisis de sensibilidad local es suficiente para determinar las variables de mayor afectación.

El cálculo de los valores de significancia es realizado al aplicar un método local indirecto, el cual no modifique el modelo y solo está enfocado al cálculo de las derivadas de forma numérica. La identificación de las variables de mayor afectación es posible al comparar el valor de sus derivadas en cada variable de entrada.

El análisis de sensibilidad para la cortina de aire retoma su análisis de grados de libertad donde las variables de entrada son la presión, temperatura y humedad del aire mitigante, el diámetro del orificio y la distancia de separación entre orificios son. Los valores usados en los experimentos numéricos fueron:

Presión de aire (atm): 2, 5, 9, 14, 20.

Humedad del aire (%): 5, 25, 65, 90.

Temperatura del aire (K): 280, 290, 300, 310.

Distancia de separación entre orificios (cm): 20, 40, 60, 90.

Diámetro de orificio (pulgadas):  $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{3}{4}$ , 1,  $1\frac{1}{2}$ , 2.

La cantidad total de experimentos numéricos fue de 1601.

Tabla 3.2 Valores de significancia para la cortina de aire.

Variables Salida \ Variables entrada	Velocidad	Altura	Temperatura	Humedad	Composición
Presión	-0.218	0.689	2.255	0.046	-0.045
Distancia separación	0.04	-0.254	-0.375	-7.72E-03	8.2E-3
Humedad	-6.06E-4	0.034	0.224	9.7E-03	0
Temperatura	1.8E-03	9.3E-03	0.835	-4E-04	4.2E-4
Diámetro orificio	-1.745	9.026	22.8	0.72	-0.4

El cálculo de los valores significativos por medio de la diferencia entre las variables reflejó que el diámetro del orificio es la variable de mayor significancia seguida de la presión del aire. La Tabla 3.2 resume los valores de significancia para las variables de entrada respecto a las de salida, los cuadros en gris indican el valor mayor de significancia para cada variable de salida.

El análisis de sensibilidad para la cortina de agua incorpora al diámetro de la gota de agua, diámetro de la boquilla, distancia de separación entre boquillas y ángulo formado por la boquilla, flujo volumétrico del agua y la temperatura del agua como variables manipulables. Los valores para las variables de entrada fueron:

Diámetro de gota ( $\mu\text{m}$ ): 110, 340, 780, 920, 1110, 1600.

Diámetro de la boquilla (pulgadas): 0.09, 0.17, 0.36, 0.9, 1.17 1.84.

Distancia de separación entre boquillas (cm): 20, 40, 60, 90.

Ángulo formado por la boquilla ( $^{\circ}$ ): 60, 90, 120, 150.

Flujo de agua en la boquilla (gpm): 2.7, 7.8, 11.4, 37, 60.

Temperatura del agua (K): 280, 290, 300, 310.

Lo anterior crea una cantidad de 9442 experimentos numéricos. Los experimentos numéricos consideraron una restricción en la altura de la nube formada la cual no debió sobrepasar de 250 m para evitar una dispersión pasiva. Los experimentos que no mostraron solución numérica aceptable fueron des-

cartados, como valores negativos y números imaginarios.

La Tabla 3.3 resume los valores obtenidos de la variación de variables, los cuales mostraron que el diámetro del orificio es la variable de mayor afectación en el modelo excepto para la temperatura; para ésta, la variable de mayor afectación es el flujo volumétrico. Lo anterior está fundamentado en que la velocidad del agua, la cantidad de agua y el número de gotas dependen del flujo volumétrico. Este a su vez determina la cantidad de materia de agua, por lo que la temperatura de la nube es afectada.

El análisis de sensibilidad para la cortina de vapor consideró las variables manipulables diámetro del orificio, distancia de separación, flujo volumétrico y presión de vapor; y sus valores fueron:

Diámetro de orificio (pulgadas):  $\frac{1}{2}$ ,  $\frac{3}{4}$ , 1,  $1\frac{1}{2}$  y 2.

Distancia de separación entre orificios (cm): 20, 40, 60 y 90.

Presión de vapor (atm): 2, 5, 10 y 15.

La cantidad de experimentos numéricos fue de 80. El cálculo de los valores significativos por medio de la diferencia entre las variables reflejó que el diámetro del orificio es la variable de mayor significancia seguida de la presión del vapor. La Tabla 3.4 resume los valores de significancia para las variables de entrada respecto a las de salida. Las tres variables de entrada existentes en este modelo tienen el mismo efecto y naturaleza a lo mostrado en la cortina de aire.

Tabla 3.3 Valores de diferencias para la cortina de agua.

Variables Salida Variables entrada	Velocidad	Altura	Temperatura	Humedad	Composición
Flujo volumétrico	-0.177	9.693	1.43	-3.8E-03	-0.0377
Distancia separación	0.015	-0.218	-0.017	5.592E-06	0.0031
Diámetro orificio	12.288	286.718	-1.395	7.77E-03	2.606
Temperatura	-3.89E-04	0.075	1	-3.484E-06	9E-07
Tamaño de la gota	1.427E-04	-2.11E-03	-1.28E-03	3.587E-07	3.012E-05
Ángulo de esparado	-0.029	2.27	-0.037	-1.017E-4	-6.144E-3

Tabla 3.4 Valores de diferencias para la cortina de vapor.

Variables Salida Variables entrada	Velocidad	Altura	Temperatura	Humedad	Composición
Presión de vapor	-0.169	0.508	15.792	0.047	-0.035
Distancia separación	0.037	-0.158	-2.451	-8.57E-3	7.39E-3
Diámetro orificio	-1.343	5.611	153.752	0.8	-0.262

En este análisis de sensibilidad se realizó un algoritmo en *Microsoft Visual C++* que defina los valores de las variables por el método *OAT*. Además, el cálculo de sus derivadas fue posible por un algoritmo realizado en Excel a través de Visual Basic.

### 3.7. Comparación de resultados en los modelos de mitigación con CFX.

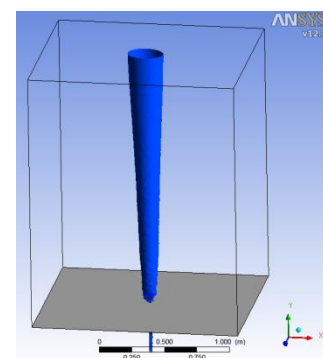
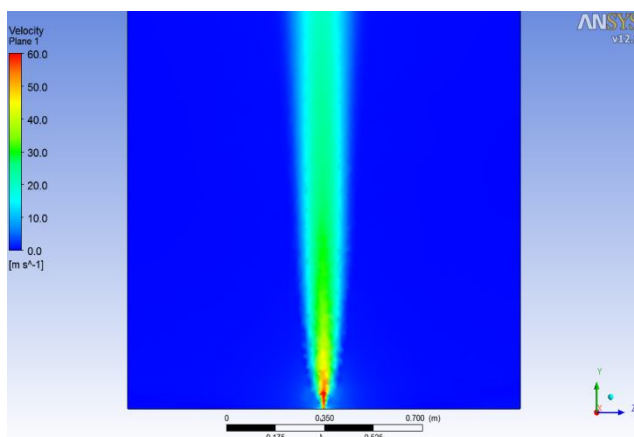
Las comparaciones de este trabajo están basadas en el uso de *CFX* de *ANSYS v12.1*. Esta herramienta cuenta con un programa propio para el diseño de la geometría. Asimismo, otro paquete computacional permite el planteamiento de la malla contando con diferentes métodos de aplicación para generar elementos de forma tetraédrica, hexaédrica y prismática. Así, la definición de la malla permite la limitación de los *dominios* sobre los que se realiza la discretización de las variables en base a los nodos generados. Otro elemento de *CFX* permite definir las condiciones iniciales y de frontera, las condiciones de convergencia, las ecuaciones que rigen el sistema y las consideraciones físicas. La solución del problema se realiza con el resolutor de *CFX*, el cual aplica el método de volumen finito al sistema. *CFX* permite la apreciación de los resultados en un paquete que logra una aceptada interacción con el usuario.

El primer análisis realizado es la demostración de la forma cónica del fluido mitigante al salir de una boquilla, como se planteó en la sección 3.2. El planteamiento está basado para un flujo de aire a 25°C, 120 m/s a través de una tubería de 1 in de diámetro y 40 cm de longitud. El dominio donde se observa la forma cónica tiene de las dimensiones 40 cmx160 cmx200 cm, se considera abierto en sus fronteras con 25°C y una presión de referencia de 1 atm. La malla desarrollada para este sistema son tetraedros con

386537 nodos, 2224903 elementos. Los elementos tienen 1 in en dominio abierto y 1 cm en la tubería por donde fluye el aire. La solución tomó un tiempo de 2 hr 17 min y 22.4 s. Los resultados se muestran en la Figura 3.5 los cuales incluyen: a) un perfil de velocidad para el flujo de aire en el dominio abierto, el cual tiene una forma de jet; sin embargo, la zona cercana a la emisión cuenta con una leve forma cónica; y b) una isosuperficie que representa en 3D la zona en la que el aire tiene una velocidad de 7m/s. Esta imagen ratifica de manera visual lo planteado en la sección 3.2.

El sistema de mitigación fue planteado para un dominio de 5 mx10 mx7 m. El fluido mitigante actúa a través de 25 tubos ubicados de forma transversal al flujo. La malla fue seccionada en 5 zonas cuya precisión dependió de la ubicación del fluido respecto a la zona de mitigación. El tamaño de la malla fue similar para los tres tipos de fluido, tal que para el aire fueron 133398 nodos y 434760 elementos, para el agua 108615 nodos y 419880 elementos, y para el vapor 124181 nodos y 424688 elementos. De igual forma, el tiempo de cálculo fue similar para los tres fluidos tomando 6 hr 40 min 45 s para el aire, 7 hr 22 min 55 s para el agua y 6 hr 27 min 26 s para el vapor.

Los resultados de *CFD* sobre la aplicación de una cortina de aire como fluido mitigante muestran una diferencia numérica con lo obtenido por el modelo propuesto. La Figura 3.6 a) muestra la diferencia del % volumen de ambos casos, donde existe una diferencia numérica notoria que se debe a los modelos que rigen la dispersión. Sin embargo, en el punto de la mitigación la concentración decrece súbitamente

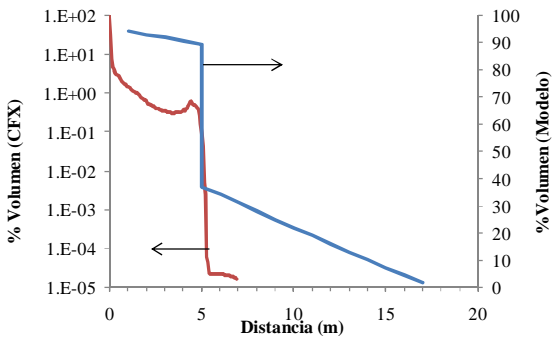


a) Perfil de velocidad del plano ZY cuando X es el centro de la emisión.      b) Isosuperficie de 7 m/s  
 Figura 3.5. Simulación en *CFD* de la forma cónica de aire al salir de la boquilla de la parte inferior.

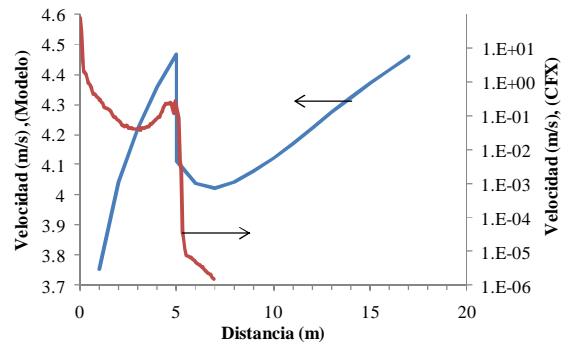


en ambos casos. Asimismo, la Figura 3.6 b) muestra una diferencia numérica en la velocidad de la nube y nuevamente se observa que decrece en el punto de mitigación. Por otra parte, la Figura 3.6 c) muestra que la temperatura obtenida por el *CFD* y el modelo tiene la misma tendencia. La Figura 3.6 d) remarca la forma física que presenta la nube durante la mitigación, la cual es diferente a lo obtenido por el modelo de mitigación, puesto que en este caso la nube termina totalmente en la mitigación.

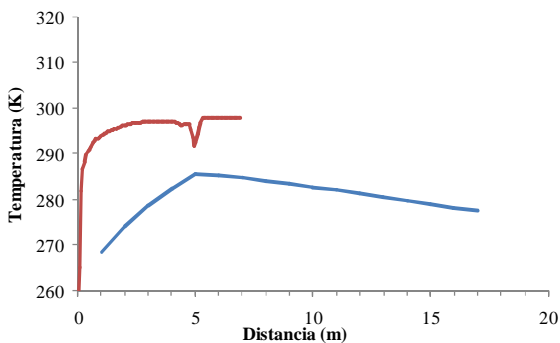
Los resultados de *CFD* sobre la aplicación de una cortina de agua como fluido mitigante muestran, nuevamente, una diferencia numérica con lo obtenido por el modelo propuesto. La Figura 3.7 a) muestra la diferencia del % volumen de ambos casos, la cual es muy similar a lo observado en la cortina de aire. Asimismo, la Figura 3.7 b) muestra que la diferencia en la velocidad de la nube es muy similar en orden de magnitud a lo observado en la cortina de aire. Por otra parte, la Figura 3.7 c) muestra que la temperatura obtenida por el *CFD* y el modelo tiene la misma tendencia. La Figura 3.7 d) remarca la forma física que presenta la nube durante la mitigación, la cual es diferente a lo obtenido por el modelo de mitigación, puesto que en este caso la nube termina totalmente en la mitigación. El caso de la cortina de vapor



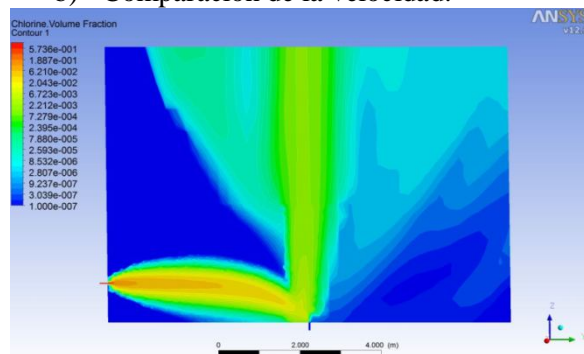
a) Comparación de % volumen.



b) Comparación de la velocidad.



c) Comparación de la temperatura.

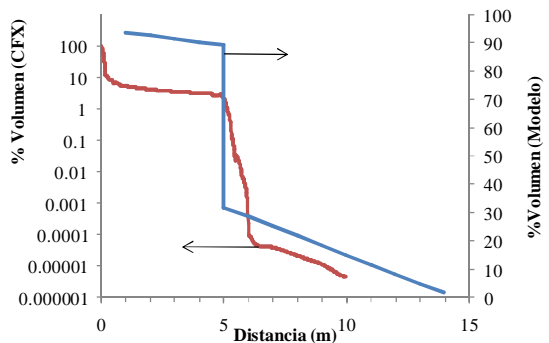


d) Forma física de la nube

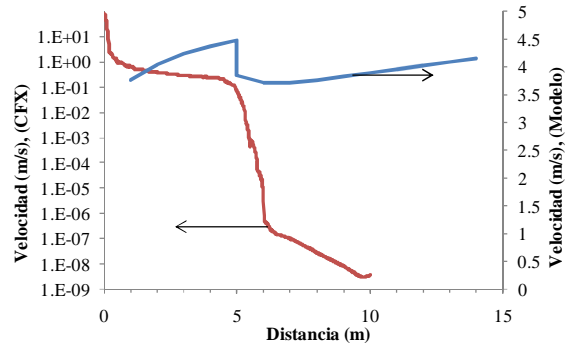
Figura 3.6. Comparación de los resultados del caso de estudio y el *CFD* para la mitigación con aire.

es similar a lo observado por la cortina de aire, como se observa en Figura 3.8 a), Figura 3.8 b) y Figura 3.8 d). Por otro lado, la temperatura tiene la misma tendencia y en este caso los valores numéricos son semejantes, Figura 3.8 c).

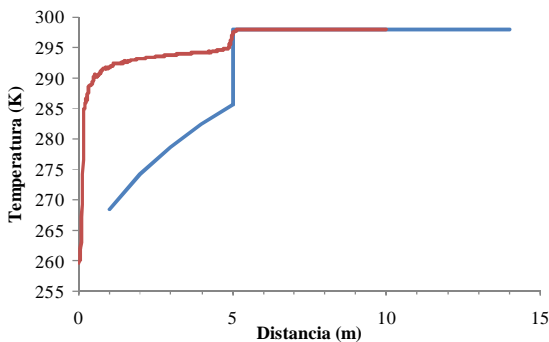
El comportamiento de los tres fluidos mitigación fue muy similar, a excepción de la temperatura la cual es particular para la temperatura de cada fluido. Sin embargo, los valores obtenidos para la velocidad y % volumen demuestran una diferencia notoria entre el modelo y el *CFD*. Esto puede ser dado a la diferencia numérica del *CFD* con el modelo *SLAB*. Además, el comportamiento de la temperatura, composición y velocidad es muy similar al obtenido con el modelo de mitigación, lo cual le da aceptación al modelo de mitigación propuesto. En contra parte, los resultados de *CFD* muestran que la nube de gas termina en el momento de la mitigación, caso contrario para el modelo de mitigación en el cual la nube continúa. En conclusión, el modelo de mitigación propuesto en este trabajo genera resultados con tendencia similar a los resultados de *CFD* pese a existir diferencia numérica notoria entre ambos.



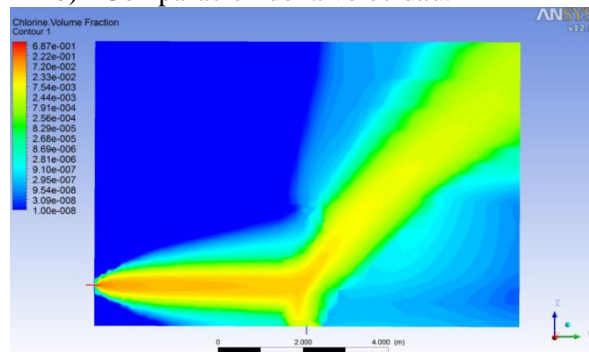
a) Comparación de % volumen.



b) Comparación de la velocidad.

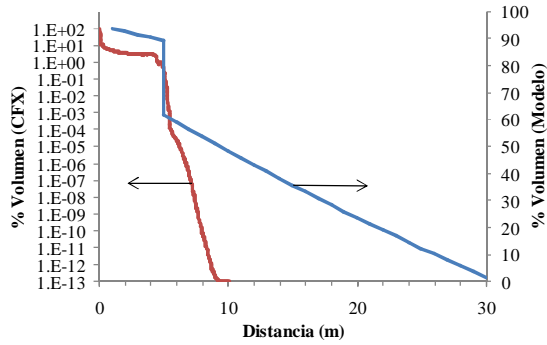


c) Comparación de la temperatura.

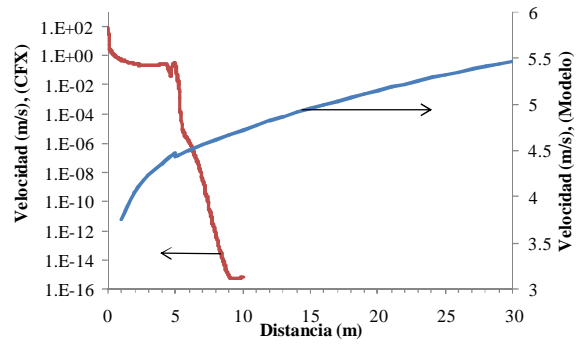


d) Forma física de la nube.

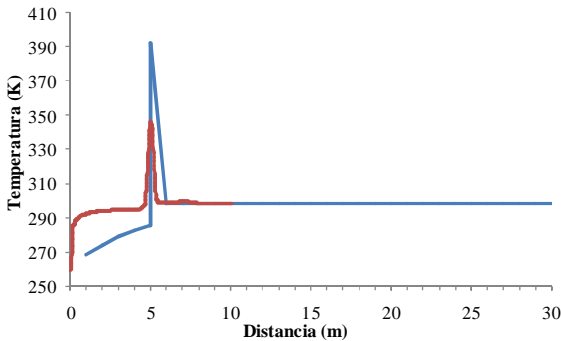
Figura 3.7. Comparación de los resultados del caso de estudio y el *CFD* para la mitigación con agua.



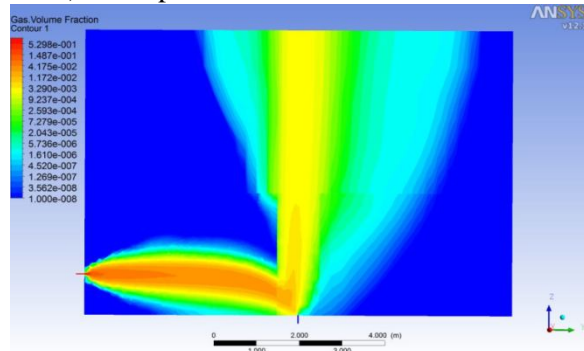
a) Comparación de % volumen.



b) Comparación de la velocidad.



c) Comparación de la temperatura.



d) Forma física de la nube.

Figura 3.8. Comparación de los resultados del caso de estudio y el *CFD* para la mitigación con vapor.

En resumen, los resultados del caso de estudio usando *CFD* y el modelo de mitigación desarrollado predicen las mismas tendencias pero con algunas diferencias numéricas debidas a las diferencias entre los modelos de dispersión usados, *i.e.* *SLAB* y *CFX*. El siguiente capítulo está enfocado al planteamiento matemático de la distribución de facilidades industriales donde el planteamiento de los sistemas de mitigación es retomado para reducir la concentración de las emisiones.

## Capítulo 4. DISTRIBUCIÓN DE FACILIDADES INDUSTRIALES

Este capítulo inicia con una revisión bibliográfica de la distribución de facilidades industriales que incluye evaluación del riesgo. Posteriormente se formula el problema matemático el cual incluye restricciones de terreno, traslape y riesgo. La formulación matemática sobre la aplicación de los sistemas de mitigación es incorporada al modelo para permitir la selección de varios sistemas de mitigación en una facilidad minimizando el riesgo. Lo anterior es planteado como un problema disyuntivo que se transforma en mixto entero no lineal para resolverse con *GAMS*. El capítulo finaliza con el planteamiento de la función objetivo.

### 4.1. Distribución de facilidades para reducir el riesgo de accidentes

La distribución de equipos y facilidades industriales ha mostrado un efecto significativo en la seguridad de procesos (CCPS, 2003, Mannan, 2005). Inicialmente, la distribución de equipos se utilizó en la reducción del riesgo por explosión a través de una matriz de factor de daño (Fuchino *et al.*, 1996). Asimismo, la frecuencia e intensidad de la explosión fueron consideradas para el cálculo de una distancia de separación entre la fuente de explosión y los equipos cercanos (Penteado y Ciric, 1996, Patsiatzis *et al.*, 2004).

La consideración de emisión de gases tóxicos en el problema de distribución de equipos ha indicado la conveniencia de agrupar los equipos en facilidades ya que una emisión tóxica afecta esencialmente al personal (Vázquez-Román *et al.*, 2010). Una solución al problema de distribución con emisiones tóxicas ha sido planteada tomando en cuenta las condiciones atmosféricas de manera estocástica. Así, la

dirección y velocidad del viento son tomadas de datos históricos y una serie de simulaciones por el método de Monte Carlo generan escenarios sobre los que se obtienen funciones de probabilidad de muerte. Esto permite realizar una cuantificación del riesgo de forma realista en todas las posibles direcciones y velocidades del viento (Vázquez-Román *et al.*, 2008, 2010). Por otra parte, un planteamiento determinista de las condiciones atmosféricas ha sido planteado. Este planteamiento está enfocado en considerar una concentración de daño del gas en emisión para determinar la distancia en que las facilidades con personal deben estar alejadas de la fuente de emisión. Sin embargo, los resultados han mostrado distancias de separación excesivas entre las facilidades (Díaz-Ovalle *et al.*, 2010). Otra solución considera el espacio de ubicación de las facilidades en forma de malla. En este caso la cuantificación del riesgo se realiza asignando previamente a cada elemento de la malla un valor de riesgo. Así, las facilidades son ubicadas respecto a los valores del riesgo siguiendo una programación lineal. Sin embargo, los resultados están limitados al tamaño de la malla y al valor del riesgo (Jung *et al.*, 2010a).

## **4.2. Definición del problema**

La distribución de facilidades industriales es un problema en el cual los parámetros espaciales tanto del terreno como de las facilidades son esenciales. En estas consideraciones se incluye que las facilidades son definidas de forma rectangular y pueden ser nuevas o existentes. Además, las interconexiones forman parte de los parámetros a definir en la distribución puesto que tienen efecto en el resultado de la distribución. Inclusive, una distancia mínima permitida entre facilidades es otro parámetro geométrico. Esta distancia puede estar definida por una calle de maniobras (Vázquez-Román *et al.*, 2010) o por distancias predefinidas de manera heurística (Mecklenburgh, 1985).

La formulación planteada en la distribución de facilidades se enfoca al uso de restricciones sobre el cálculo del riesgo para emisiones de gases tóxicos. El riesgo es definido como el producto de la frecuencia e impacto de un accidente (Modarres, 2006). La frecuencia debe ser definida para un caso de emisión basada en datos históricos (Taylor, 2005) y el impacto es enfocado a la cantidad de personas afectadas por una dispersión basada en la probabilidad de muerte (Crowl y Louvar, 2002). Por lo tanto, la

cantidad de personas dentro de una facilidad es requerida para la evaluación del riesgo. La inclusión de la probabilidad de muerte en el problema tiene connotación espacial, por lo que la ubicación de una emisión dentro de una facilidad debe ser definida (Díaz-Ovalle *et al.*, 2010). Cabe señalar, que la función de riesgo también incluye la aplicación de sistemas de mitigación.

La formulación matemática inicia con las siguientes definiciones. Dados:

- un conjunto de facilidades ya existentes  $i \in I$ ,
- un conjunto de facilidades nuevas  $s \in S$ ,
- un conjunto de emisiones tóxicas  $r \in R$ ,
- un conjunto de sistemas de mitigación  $m \in M$ ,
- un conjunto de facilidades interconectadas  $a, b \in M_{ab}$ ,
- un conjunto de intervalos de ángulos  $\alpha \in A$ ,

además de los subconjuntos:

- un conjunto de facilidades existentes  $i$  con emisión de gases tóxicos  $ri(i,r)$ ,
- un conjunto de facilidades existentes  $i$  con un sistema de mitigación  $mi(i,m)$ ,
- un conjunto de facilidades existentes  $i$  con personal  $pi(i)$ ,
- un conjunto de facilidades nuevas  $s$  con emisión de gases tóxicos  $rs(s,r)$ ,
- un conjunto de facilidades nuevas  $s$  con un sistema de mitigación  $ms(s,m)$ ,
- un conjunto de facilidades nuevas  $s$  con personal  $ps(s)$ ,

así como los parámetros:

- el largo y ancho del terreno  $Lx$  y  $Ly$ ,
- el largo y ancho de las facilidades por instalar  $Lx_s$  y  $Ly_s$ ,
- el largo y ancho de las facilidades instaladas  $Lx_i$  y  $Ly_i$ , y su coordenada de ubicación  $x_i$  y  $y_i$ ,
- el desplazamiento del centro de una facilidad instalada al punto de emisión  $Px_{i,r}$  y  $Py_{i,r}$ ,
- el desplazamiento del centro de una facilidad nueva al punto de emisión  $Px_{s,r}$  y  $Py_{s,r}$ ,

- la cantidad de personas alojadas dentro de una facilidad instalada y una nueva  $Pe_i$  y  $Pe_s$ ,
- la frecuencia de ocurrencia de una emisión dada  $r$  en una facilidad instalada y una nueva  $f_{i,r}$  y  $f_{s,r}$ .
- los parámetros de los sistemas de mitigación sobre la concentración de daño,
- el tiempo de vida de la planta,  $P_L$  (años),
- el ancho de la calle  $st$ ,
- el costo de tubería  $C_P$  (\$/m),
- el costo de terreno  $C_L$  (\$/m<sup>2</sup>).
- el costo de daño al personal  $C_D$  (\$/persona);
- el costo del sistema de mitigación usada en una facilidad instalada y una nueva  $C_{Mi_s}$  (\$) y  $C_{Mi_i}$  (\$).
- el costo total de tubería  $C^P$  (\$);
- el costo total de terreno  $C^L$  (\$);
- el costo total de daño  $C^D$  (\$);
- el costo total de mitigación  $C^M$  (\$).

para calcular las variables:

- la ubicación de las facilidades nuevas  $s$ ,  $x_s$  y  $y_s$ ,
- el área de terreno total ocupado,
- el costo total de interconexión, riesgo y un sistema de mitigación con la distribución óptima,

minimizando el costo total de la distribución de las facilidades  $C_T$ .

### 4.3. Modelado Geométrico

Los modelos geométricos para la distribución de equipos y facilidades provienen de los planteamientos descritos en la Sección 1.2. La definición del tamaño del terreno, cantidad, tipo y dimensiones de las facilidades son variables necesarias en el modelo geométrico. Para la solución del problema es necesario incluir dos restricciones importantes. La primera restricción es evitar que las facilidades sean ubicadas

fuera del terreno asignado. La segunda condición es evitar el traslape entre facilidades. Las siguientes subsección describen detalladamente ambas restricciones.

#### 4.3.1. Restricciones del terreno

La formulación matemática de las consideraciones del terreno parte de la existencia de un área determinada que limita la ubicación de las facilidades dentro de ella y evita ubicaciones externas. La Figura 4.1 muestra como una facilidad  $s$  de dimensiones  $Lx_s$  y  $Ly_s$  debe ser ubicada dentro de un terreno con dimensiones  $Lx$  y  $Ly$ . En la Figura 4.1 el ancho de la calle de maniobras,  $st$ , se muestra claramente como una distancia mínima de separación entre la facilidad y la frontera del terreno. Lo anterior genera las expresiones (Vázquez-Román *et al.*, 2010):

$$\frac{Lx_s}{2} + st \leq x_s \leq Lx - \left( \frac{Lx_s}{2} + st \right), \forall s \in S \quad (4.1)$$

$$\frac{Ly_s}{2} + st \leq y_s \leq Ly - \left( \frac{Ly_s}{2} + st \right), \forall s \in S \quad (4.2)$$

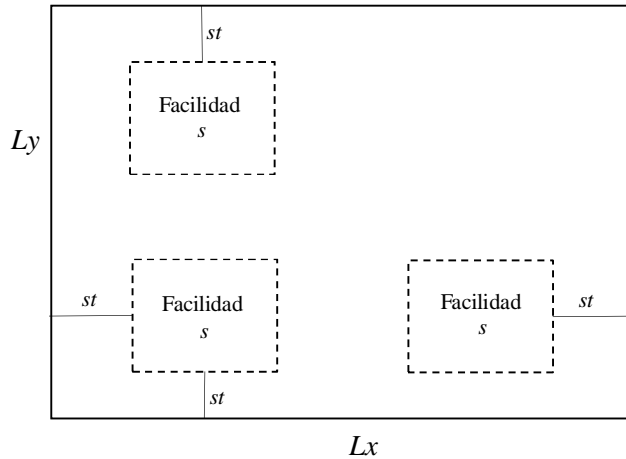


Figura 4.1 Descripción de la restricción del terreno.



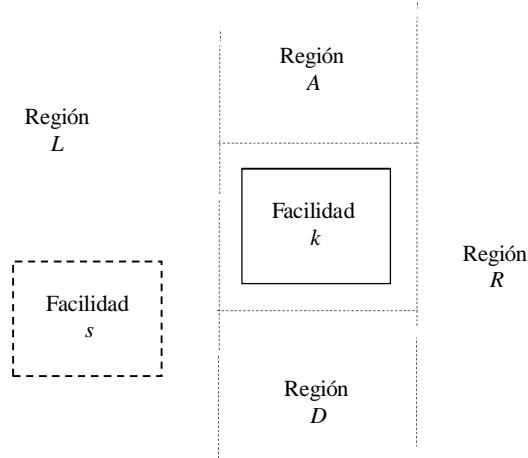


Figura 4.2 Regiones de posible ubicación de una nueva facilidad  $s$  alrededor de otra facilidad  $k$ . Imagen tomada de (Vázquez-Román et al., 2010).

#### 4.3.2. Restricciones de traslape

La restricción de traslape puede ser aplicada para una facilidad  $k$  alrededor de la cual una facilidad  $s$  puede ubicarse, ya sea a la izquierda, derecha, arriba o debajo. La Figura 4.2 describe estas cuatro posibles regiones de ubicación. La representación matemática de esta restricción es dada por una disyunción la cual permite seleccionar la mejor ubicación de la facilidad  $k$ . La disyunción se expresa como:

$$\left[ \begin{array}{c} \text{"L"} \\ x_s \leq x_k - D_{s,k}^{\min,x} \end{array} \right] \vee \left[ \begin{array}{c} \text{"R"} \\ x_s \leq x_k + D_{s,k}^{\min,x} \end{array} \right] \vee \left[ \begin{array}{c} \text{"A", "D"} \\ x_s \geq x_k - D_{s,k}^{\min,x} \\ x_s \leq x_k + D_{s,k}^{\min,x} \\ \left[ \begin{array}{c} \text{"A"} \\ y_s \geq y_k + D_{s,k}^{\min,y} \end{array} \right] \vee \left[ \begin{array}{c} \text{"D"} \\ y_s \leq y_k - D_{s,k}^{\min,y} \end{array} \right] \end{array} \right] \quad (4.3)$$

$$\forall s \in S, k \in I \vee k \in S, k \neq s$$

donde:

$$D_{s,k}^{\min,x} = \frac{Lx_s + Lx_k}{2} + st, \forall s \in S, k \in I \vee k \in S, k \neq s \quad (4.4)$$

$$D_{s,k}^{\min,y} = \frac{Ly_s + Ly_k}{2} + st, \forall s \in S, k \in I \vee k \in S, k \neq s. \quad (4.5)$$

#### 4.4. Restricción por distancias Mecklenburgh

Las distancias mínimas entre equipos con riesgo potencial, ya sea de explosión o emisión, y equipos vulnerables fueron inicialmente propuestas por Mecklenburgh (1985). Muchos de los diseños industriales han estado basados en este concepto de distancias mínimas aunque no necesariamente en las publicadas por el autor sino en otras similares publicadas en libros especializados de distribución de facilidades. Las distancias mínimas son consideradas en este trabajo como una restricción opcional al modelo por lo que pueden ser omitidas. La Tabla 4.1 muestra estas distancias propuestas para distintas facilidades donde los recuadros sombreados son dados para la distancia entre facilidades del mismo tipo.

Tabla 4.1 Distancias mínimas entre facilidades tomada de Mecklenburgh (1985).

Almacén	Cuarto de compresores	Cuarto de control	Tanque de almacenamiento	Planta tratadora de aguas residuales	Taller de mantenimiento	Oficinas	Procesos en general	Facilidad de servicios	Frontera de la planta
0									
60	2	0	60	20	0	0	30	0	
15	30	0	60	100	8	0	30	0	
75	75	60	70	100	8	60	30	0	
70	70	100	70	100	30	0	60	0	
30	30	0	60	140	8	0	60	0	
30	60	8	75	100	30	60	30	0	
40	40	40	60	100	0	0	60	0	
30	30	0	60	100	0	0	60	0	
8	30	0	60	20	8	30	30	0	

La formulación matemática de las distancias Mecklenburgh difiere del planteamiento de la sección anterior solo en el valor de  $st$ . La diferencia simplemente consiste en sustituir el valor de  $st$  por las distancias mínimas específicas entre facilidades. Así, el modelo incluye dos restricciones entre una facilidad y la frontera del terreno usando la distancia Mecklenburgh,  $D_s^{MK}$  :

$$x_s > D_s^{MK} + \frac{Lx_s}{2}, \forall s \in S \quad (4.6)$$

$$y_s > D_s^{MK} + \frac{Ly_s}{2}, \forall s \in S \quad (4.7)$$

#### 4.5. Restricción del riesgo por dispersión de gases tóxicos

La resolución simultánea de un problema de optimización y un problema con ecuaciones diferenciales es demasiado complicada. Por esta razón, es conveniente resolver las ecuaciones diferenciales relacionadas a la dispersión para, posteriormente, ajustar los resultados a funciones algebraicas que puedan ser usadas en la optimización. Lo anterior es referido al cálculo de la concentración mediante el uso del modelo de dispersión *SLAB*, descrito en la Sección 2.3. Así, la concentración de la dispersión obtenida es aproximada a una función de decaimiento exponencial de la distancia entre el punto de emisión y el punto de afectación. Por simplicidad, el centro de la facilidad que recibe la emisión se asume como el punto de afectación. La expresión matemática de la concentración es:

$$C_{k,r,l}^R = a_{k,r} e^{b_{k,r}(D_{k,r,l})^2}$$

$$\forall k \in ri(i,r), l \in ps(s), r \in R$$

$$\forall k \in rs(s,r), l \in pi(i), r \in R$$

$$\forall k \in rs(s,r), l \in ps(s), k \neq l, r \in R \quad (4.8)$$

donde  $C_{k,r,l}^R$  es la concentración de la emisión  $r$  en la facilidad  $k$  hacia la facilidad  $l$ ,  $a_{k,r}$  y  $b_{k,r}$  son parámetros de la función exponencial y  $D_{k,r,l}$  es la distancia de separación entre el punto de emisión  $r$  de la facilidad  $k$  a la facilidad  $l$ , definida como:

$$D_{k,r,l}^2 = \left( x_l - (x_k + Px_{k,r}) \right)^2 + \left( y_l - (y_k + Py_{k,r}) \right)^2$$

$$\forall k \in ri(i,r), l \in ps(s), r \in R$$

$$\forall k \in rs(s,r), l \in pi(i), r \in R$$

$$\forall k \in rs(s,r), l \in ps(s), k \neq l, r \in R$$
(4.9)

Las consecuencias de un escenario de dispersión están basadas en el daño al personal como se describió en la Sección 1.1. La probabilidad de daño proviene de aplicar una función probit usando la concentración en la dispersión (Finney *et al.*, 1975). Así:

$$P_{k,r,l} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{Y_{k,r,l} - 5 \frac{u^2}{2}} e^{-\frac{u^2}{2}} du$$

$$\forall k \in ri(i,r), l \in ps(s), r \in R$$

$$\forall k \in rs(s,r), l \in pi(i), r \in R$$

$$\forall k \in rs(s,r), l \in ps(s), k \neq l, r \in R$$
(4.10)

donde  $u$  es una función que permite obtener una distribución gaussiana de probabilidad  $P$  y  $Y$  es la representación de unidades probit calculadas a partir de la expresión general para gases tóxicos definida como:

$$Y_{k,r,l} = A_r + B_r \ln \left( C_{k,r,l} \right)^{n_r} t_{k,r}$$

$$\forall k \in ri(i,r), l \in ps(s), r \in R$$

$$\forall k \in rs(s,r), l \in pi(i), r \in R$$

$$\forall k \in rs(s,r), l \in ps(s), k \neq l, r \in R$$
(4.11)

donde  $A_r$ ,  $B_r$  y  $n_r$  son parámetros propios del gas  $r$ ,  $t_{k,r}$  es el tiempo de exposición a la emisión. El tiempo de exposición se expresa en minutos y se propone usar 10 min lo cual es estimado como el tiempo requerido para desalojar al personal de la planta. Algunos valores de los parámetros probit para algunos gases tóxicos son enunciados en la Tabla 3.1. Además, el cálculo de la expresión (4.10) es aproximado a una función sinusoidal a partir de sus valores calculados a través de una regresión no línea;, tal que:

$$P_{k,r,l} = 7.983 \times 10^{-5} + \frac{2.554 \times 10^{-4}}{2.554 \times 10^{-3} + e^{-1.65064Y_{k,r,l}}}$$

$$\begin{aligned} k \in ri(i,r), l \in ps(s), r \in R \\ \forall k \in rs(s,r), l \in pi(i), r \in R \\ \forall k \in rs(s,r), l \in ps(s), k \neq l, r \in R \end{aligned} \quad (4.12)$$

La severidad de las consecuencias para una dispersión de gases es el producto de la probabilidad de daño al personal y el número de personal que podría recibir ese daño. Sin embargo, la definición de la frecuencia de ocurrencia depende del historial de accidentes en la planta. Una forma general para obtener la frecuencia de ocurrencia es en base a la determinación de la frecuencia de todas las posibles fallas que ocasionen el accidente y la frecuencia de las posibles consecuencias. La frecuencia total es definida como el producto de dichas probabilidades (Modarres, 2006). De manera general, el riesgo para una emisión puede ser resumido como:

$$R_{k,r,l} = \sum_k \sum_{r \in R} \sum_l f_{k,r} \cdot P_{k,r,l} \cdot Pe_l$$

$$\begin{aligned} k \in ri(i,r), l \in ps(s), r \in R \\ \forall k \in rs(s,r), l \in pi(i), r \in R \\ \forall k \in rs(s,r), l \in ps(s), k \neq l, r \in R \end{aligned} \quad (4.13)$$

donde  $R_{k,r,l}$  es el riesgo de una emisión  $r$  ocurrida en una facilidad  $k$  que pueda dañar al personal de una facilidad  $l$ . En términos generales la expresión del riesgo total es definida como:

$$R = \sum_{\substack{rs(s,r) \\ k \in ps(s) \\ k \neq s}} f_{s,r} P_{s,r,k} Pe_k + \sum_{rs(s,r)} \sum_{i \in pi(i)} f_{s,r} P_{s,r,i} Pe_i + \sum_{\substack{ri(i,r) \\ s \in ps(s)}} f_{i,r} P_{i,r,s} Pe_s. \quad (4.14)$$

La expresión anterior está sujeta a la existencia de cada uno de los casos de emisión y personal. Por otra parte, la frecuencia generalmente es medida con unidades de años<sup>-1</sup> y la probabilidad de muerte con la cantidad de personas.

#### 4.6. Restricción al aplicar sistemas de mitigación en la distribución de facilidades

Los fundamentos sobre los sistemas de mitigación han sido enunciados en el capítulo anterior. En esta sección es necesario definir la ubicación de los sistemas de mitigación en función del escenario de la emisión. Uznanski y Buchlin (1998) sugieren que el sistema de mitigación debe ser cercano al punto de emisión o estar ubicado entre este y una facilidad con personal. La frontera de las facilidades representa un punto intermedio entre una emisión y una facilidad con personal, por lo cual esta es tomada como la ubicación de la mitigación en una facilidad.

La evidencia experimental indica que la concentración del gas emitido tiende a tener un valor máximo en la vecindad de la emisión para, posteriormente, iniciar una reducción gradual conforme se aleja de este punto. La necesidad de mitigar se presenta debido a que la concentración permanece en niveles nocivos aún a distancias razonablemente altas. Para reflejar el efecto de mitigación es necesario estimar inicialmente los valores de concentración desde la emisión hasta la ubicación de la mitigación. En el punto de mitigación, la concentración disminuye de forma abrupta dependiendo del sistema usado para continuar con la dispersión típica. Así, la función de concentración para la nube mitigada debe estar restringida a que el cálculo de esta no anteceda al punto de ubicación del sistema de mitigación y la ubicación del sistema de mitigación se convierte en el punto inicial de la reducción. La concentración para la nube mitigada es función de la diferencia de la distancia comprendida entre el punto de mitigación y el punto de recepción lo que es equivalente a la diferencia de la distancia  $D_{k,r,l}$  con la distancia de mitigación  $D_{k,r}^M$ . La Figura 4.3 ubica estas distancias de manera gráfica sobre la concentración y la facilidad.

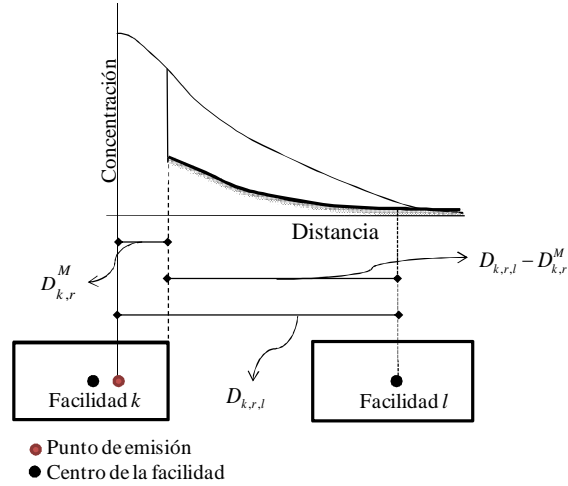


Figura 4.3 Representación de las distancias usadas en la reducción de concentración entre facilidades.

La concentración obtenida por mitigación es aproximada como:

$$\begin{aligned}
 C_{m,k,r,l}^M &= a_{m,k,r}^M e^{b_{m,k,r}^M (D_{k,r,l} - D_{k,r}^M)} \\
 k \in ri(i,r), l \in ps(s), r \in R, m \in M \\
 \forall k \in rs(s,r), l \in pi(i), r \in R, m \in M \\
 \forall k \in rs(s,r), l \in ps(s), k \neq l, r \in R, m \in M
 \end{aligned}
 \tag{4.15}$$

donde,  $C_{m,k,r,l}^M$  es la concentración resultante de mitigar una emisión  $r$  usando un sistema de mitigación  $m$  en la facilidad  $k$  en dirección a la facilidad  $l$ , y  $a_{m,k,r}^M$  y  $b_{m,k,r}^M$  son parámetros de la función de la concentración resultante de la mitigación.

El caso determinista aplicado en este trabajo considera una forma circular para la isopleta generada por una emisión ya que la dirección y velocidad del viento no cambian. En el caso de mitigaciones con condiciones atmosféricas de forma determinista, una isopleta circular es generada para facilidades de forma circular donde el punto de emisión sea el centro de la facilidad, es decir donde la distancia de mitigación es la misma en cualquier dirección. Sin embargo, la forma rectangular, que presenta la mayoría de las facilidades, y la ubicación del punto de emisión dentro de la facilidad generan una diversidad de distancias de mitigación que modifica la forma de la isopleta. Esto puede ser observado al realizar una iso-

pleta de una emisión con mitigación. Un ejemplo es la mitigación con una cortina de agua sobre la emisión presentada en el caso de estudio de la Sección 3.4. Esta emisión es ubicada en la coordenada interna (10,7) de una facilidad con dimensiones de 25 m de largo y 20 m de ancho. Al aplicar los modelos de mitigación se genera una isopleta para una concentración de 3 ppm, donde se obtiene que a una mayor distancia de mitigación la isopleta se aleja del punto de mitigación. De esta manera se demuestra que la función de la concentración mitigada, Ecuación (4.15), es diferente en distintas distancias de mitigación. La Figura 4.4 muestra la isopleta desarrollada y muestra así el efecto de la distancia de mitigación.

Los parámetros de la función de concentración de mitigación son obtenidos a partir de la aplicación de los modelos de mitigación a una distancia de mitigación específica. Así, el cambio de la distancia de mitigación es reflejado en estos parámetros. La aplicación de esta función de concentración en la distribución de facilidades genera una variedad de distancias de mitigación por la ubicación del punto de emisión dentro de la facilidad. Las posibles distancias de mitigación usadas en el modelo de la concentración deben ser definidas antes de resolver el problema de optimización considerando la dirección que una nube presente. En el problema determinista esta dirección parte del punto de emisión hacia la ubicación de una facilidad con personal. Sin embargo, una gran cantidad de distancias de mitigación puede ser generada en base a todas las posibles direcciones que una facilidad con personal puede presentar al ser ubicada. Esto genera un problema matemático muy complicado por lo que es necesario delimitar el número de distancias de mitigación.

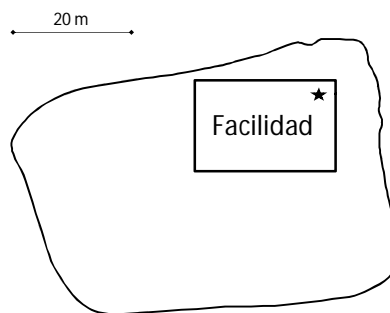


Figura 4.4. Isopleta de concentración de 3ppm para una emisión de gas cloro que demuestra mayor precisión al incluir la distancia de mitigación para cada dirección.



Una primera solución de este problema es el planteamiento con cuatro posibles distancias de mitigación cuya dirección hacia una facilidad con personal es perpendicular a las demás direcciones. Las direcciones para este caso corresponden hacia las cuatro regiones de ubicación de facilidades propuestas por la disyunción (4.3). Así, la ubicación de una facilidad con personal en una de estas cuatro regiones determina la función de concentración correspondiente a la distancia de mitigación formada en esa dirección. El planteamiento matemático es una formulación mixta entera no lineal en la cual las variables binarias provienen de la convexificación de la disyunción (4.3) como puede verse en Vázquez-Román *et al.* (2010). La expresión matemática propuesta es:

$$\begin{aligned}
C_{m,k,r,l}^M &= B_{k,l}^A a_{M,m,k,r}^A e^{b_{M,m,k,r}^A (D_{k,l} - D_{k,r}^M)} + B_{k,l}^D a_{M,m,k,r}^D e^{b_{M,m,k,r}^D (D_{k,l} - D_{k,r}^M)} + B_{k,l}^L a_{M,m,k,r}^L e^{b_{M,m,k,r}^L (D_{k,l} - D_{k,r}^M)} + B_{k,l}^R a_{M,m,k,r}^R e^{b_{M,m,k,r}^R (D_{k,l} - D_{k,r}^M)} \\
D_{k,r}^M &= B_{k,l}^A \left( \frac{Ly_k}{2} - Py_{k,r} \right) + B_{k,l}^D \left( \frac{Ly_k}{2} + Py_{k,r} \right) + B_{k,l}^L \left( \frac{Lx_k}{2} + Px_{k,r} \right) + B_{k,l}^R \left( \frac{Lx_k}{2} - Px_{k,r} \right)
\end{aligned} \tag{4.16}$$

$$\begin{aligned}
B_{k,l}^A + B_{k,l}^D + B_{k,l}^L + B_{k,l}^R &= 1 \\
k \in ri(i,r), l \in ps(s), r \in R, m \in M \\
\forall k \in rs(s,r), l \in pi(i), r \in R, m \in M \\
\forall k \in rs(s,r), l \in ps(s), k \neq l, r \in R, m \in M
\end{aligned}$$

donde  $B_{k,l}^A$ ,  $B_{k,l}^D$ ,  $B_{k,l}^L$  y  $B_{k,l}^R$  son variables binarias equivalente a aquellas que permiten seleccionar la ubicación de la facilidad  $l$  alrededor de la facilidad  $k$ , los parámetros de reducción  $a_M$  y  $b_M$  son parámetros propios para cada una de las funciones de concentración de mitigación propias para las cuatro regiones de ubicación indicadas por los superíndices  $A$ ,  $L$ ,  $D$  y  $R$ .

Esta propuesta no es aceptable en su totalidad ya que pueden existir distancias de mitigación mayores en direcciones diferentes a las propuestas. Estas direcciones son ubicadas en el ángulo comprendido entre dos de las direcciones propuestas de forma perpendicular. Por tal motivo, una forma para reducir esta imprecisión es considerar más de cuatro direcciones para tomar en cuenta aquellas distancias de mitigación excedentes. Un planteamiento de múltiples direcciones es el adecuado. Esto concuerda con la propuesta angular para la ubicación de facilidades planteada por Vázquez-Román *et al.* (2010). En esta pro-

puesta, la dirección de la posición de una facilidad respecto al punto de emisión se obtiene en un intervalo angular de tamaño  $\alpha$  donde la cantidad de intervalos es un número entero que haga a  $90^\circ$  un múltiplo del ángulo  $\alpha$ . Por simplicidad, el modelo matemático es planteado para considerar distancias entre los puntos centrales de las facilidades. En este caso, el modelo es replanteado para que las distancias sean tomadas entre el punto de emisión y el punto el central de una facilidad con personal. El modelo permite seleccionar la ubicación de una facilidad de manera angular por medio del planteamiento de una disyunción. Esta disyunción cuenta con cuatro restricciones que posicionan a una facilidad en un gajo o intervalo angular. Matemáticamente se define como:

$$\bigvee_{\alpha \in A} \left[ \begin{array}{l} \text{"}\alpha\text{-intervalo"} \\ S_{\alpha}^{\Delta y} \left( y_l - (y_k + Py_{k,r}) \right) \geq 0 \\ S_{\alpha}^{\Delta x} \left( x_l - (x_k + Px_{k,r}) \right) \geq 0 \\ S_{\alpha}^{\Delta x} \left( y_l - (y_k + Py_{k,r}) \right) \leq S_{\alpha}^{\Delta x} m_{\alpha} \left( x_l - (x_k + Px_{k,r}) \right) \\ S_{\alpha}^{\Delta x} \left( y_l - (y_k + Py_{k,r}) \right) \geq S_{\alpha}^{\Delta x} m_{\alpha-1} \left( x_l - (x_k + Px_{k,r}) \right) \end{array} \right] \quad \begin{array}{l} k \in ri(i,r), l \in ps(s) \\ \forall k \in rs(s,r), l \in pi(i) \\ \forall k \in rs(s,r), l \in ps(s), l \neq k \end{array} \quad (4.17)$$

donde  $S_{\alpha}^{\Delta y}$  y  $S_{\alpha}^{\Delta x}$ , son vectores con valores 1 y -1,  $m_{\alpha}$  la pendiente del ángulo  $\alpha$  que permite relacionar las distancias en las coordenadas  $x$  y  $y$ . Los vectores,  $S_{\alpha}^{\Delta y}$  y  $S_{\alpha}^{\Delta x}$ , relacionan trigonométricamente los componentes  $x$  y  $y$  de la distancia entre las facilidades. Los valores de los vectores son específicos para los ángulos comprendidos en los cuatro cuadrantes debido al valor que los ángulos pueden presentar al ser mayor de  $90^\circ$ . Así, el vector  $S_{\alpha}^{\Delta x}$  tiene valores de 1, -1, -1, 1, y el vector  $S_{\alpha}^{\Delta y}$  tiene valores de 1, 1, -1, -1.

La disyunción (4.17) de la posición angular ha sido convexificada por medio de la técnica de *convex hull* para poder definir el problema como una programación mixta entera no lineal y pueda este ser resuelto por *GAMS* (General Algebraic Modeling System). Esto indica que por medio de variables binarias se obtiene la selección de la posición. Así, la solución de la disyunción (4.17) permite la selección de la posición de una facilidad con personal alrededor de aquella que tenga emisión. De lo anterior se demuestra que la función de concentración mitigada es definida en base a la posición de la facilidad con

personal. Así, una expresión que represente a la selección de dicha concentración en cada ángulo de la disyunción requiere el uso de las variables binarias que definen la posición. Por otra parte, la variedad de sistemas de mitigación crea la oportunidad de seleccionar aquel que minimice el riesgo por emisión y el costo total mediante una selección apropiada del sistema mitigante. Esto es planteado con una expresión matemática donde una concentración mitigada sea seleccionada de un conjunto de sistemas de mitigación. La solución incluye el caso en que no sea necesario el uso de sistemas de mitigación. Esta selección es planteada con el uso de variables binarias que indican el sistema de mitigación seleccionado e incluye la selección angular de la concentración mitigada. Las siguientes subsecciones incluyen la convexificación de la disyunción (4.17), la definición de la concentración seleccionada de forma angular y el planteamiento para múltiples sistemas de mitigación para cada uno de los casos de ubicación de la fuente de emisión y del personal.

#### 4.6.1 Restricciones cuando una facilidad instalada tiene emisión y una facilidad nueva personal

La convexificación de la disyunción (4.17) para este caso considera que las variables de posición en la facilidad nueva,  $x$  y  $y$ , deben ser disgregadas, de tal forma que:

$$\begin{aligned} x_s &= \sum_{\alpha \in A} x_{i,s,\alpha}, \quad \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s) \\ y_s &= \sum_{\alpha \in A} y_{i,s,\alpha}, \quad \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s) \end{aligned} \quad (4.18)$$

donde  $x_{i,s,\alpha}$  y  $y_{i,s,\alpha}$  son las variables de cada disyunción  $\alpha$ .

Las restricciones de las disyunciones son convexificadas como:

$$\begin{aligned} s_\alpha^{\Delta y} \left( y_{i,s,\alpha} - (y_i + Py_{i,r}) \cdot B_{i,s,\alpha} \right) &\geq 0, \quad \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s), \alpha \in A \\ s_\alpha^{\Delta x} \left( x_{i,s,\alpha} - (x_i + Px_{i,r}) \cdot B_{i,s,\alpha} \right) &\geq 0, \quad \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s), \alpha \in A \\ s_\alpha^{\Delta y} \left( y_{i,s,\alpha} - (y_i + Py_{i,r}) \cdot B_{i,s,\alpha} \right) &\leq s_\alpha^{\Delta x} m_\alpha \left( x_{i,s,\alpha} - (x_i + Px_{i,r}) \cdot B_{i,s,\alpha} \right), \quad \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s), \alpha \in A \\ s_\alpha^{\Delta y} \left( y_{i,s,\alpha} - (y_i + Py_{i,r}) \cdot B_{i,s,\alpha} \right) &\geq s_\alpha^{\Delta x} m_{\alpha-1} \left( x_{i,s,\alpha} - (x_i + Px_{i,r}) \cdot B_{i,s,\alpha} \right), \quad \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s), \alpha \in A \end{aligned} \quad (4.19)$$

donde  $B_{i,s,\alpha}$  es una variables binaria que permite la selección de una disyunción. Para lograr esto, la variable binaria está sujeta a:

$$\sum_{\alpha \in A} B_{i,s,\alpha} = 1, \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s) \quad (4.20)$$

Las variables de posición disgregadas deben presentar límites en su cálculo. Por tal motivo, las restricciones de terreno de la sección 4.3.1 son incluidas en el modelo como límites superiores, tal que:

$$\begin{aligned} x_{i,s,\alpha} &\leq B_{i,s,\alpha} \cdot \left( Lx - st - \frac{Lx_s}{2} \right), \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s), \alpha \in A \\ y_{i,s,\alpha} &\leq B_{i,s,\alpha} \cdot \left( Ly - st - \frac{Ly_s}{2} \right), \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s), \alpha \in A \\ x_{i,s,\alpha} &\geq 0 \quad y_{i,s,\alpha} \geq 0, \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s), \alpha \in A \end{aligned} \quad (4.21)$$

La concentración mitigada es seleccionada a partir de la variable binaria de la posición,  $B_{i,s,\alpha}$ , como ha sido mencionado anteriormente, de tal forma que:

$$C_{i,r,s,m}^M = \sum_{\alpha \in A} B_{i,s,\alpha} \cdot a_{i,r,m,\alpha}^M e^{b_{i,r,m,\alpha}^M (D_{i,r,s}^M - D_{i,r,\alpha}^M)}, \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s), r \in R, m \in M \quad (4.22)$$

donde  $C_{i,r,s,m}^M$  es la concentración mitigada un sistema de mitigación  $m$ ,  $D_{i,r,\alpha}^M$  es la distancia de mitigación de la facilidad  $i$  para una emisión  $r$  dada en la dirección angular  $\alpha$ ,  $a_{i,r,m,\alpha}^M$  y  $b_{i,r,m,\alpha}^M$  son los parámetros de mitigación de la función de concentración para una emisión  $r$  dada en  $i$  usando un sistema de mitigación  $m$  en la dirección angular  $\alpha$ .

La concentración mitigada está sujeta a los límites:

$$C_{i,r,s,m}^M \leq \sum_{\alpha \in A} B_{i,s,\alpha} \cdot a_{i,r,m,\alpha}^M, \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s), r \in R, m \in M$$

$$C_{i,r,s,m}^M > 0$$
(4.23)

La selección de un sistema de mitigación es planteada como:

$$C_{i,r,s} = B_i^C \cdot C_{i,r,s}^R + \sum_{m \in mi(i,m)} B_{MIT_{i,m}} \cdot C_{i,r,s,m}^M, \forall i \in ri(i,r), s \in ps(s), r \in R$$
(4.24)

donde  $C_{i,r,s}$  es la concentración obtenida de la selección,  $B_i^C$  es una variable binaria que determinan si se omite el uso de un sistema de mitigación y  $B_{MIT_{i,m}}$  es una variable que permite seleccionar un sistema de mitigación si este es requerido. Las variables binarias están sujetas a:

$$B_i^C + \sum_{m \in mi(i,m)} B_{MIT_{i,m}} = 1, \forall i \in ri(i,r)$$
(4.25)

#### 4.6.2 Restricciones cuando una facilidad nueva tiene emisión y una facilidad instalada personal

La convexificación de la disyunción (4.17) para este caso es similar al caso anterior ya que se considera que las variables de posición en la facilidad nueva,  $x$  y  $y$ , deben ser disgregadas, de tal forma que:

$$x_s = \sum_{\alpha \in A} x_{s,i,\alpha}, \forall s \in rs(s,r), i \in pi(i)$$

$$y_s = \sum_{\alpha \in A} y_{s,i,\alpha}, \forall s \in rs(s,r), i \in pi(i)$$
(4.26)

donde  $x_{s,i,\alpha}$  y  $y_{s,i,\alpha}$  son las variables de posición para cada disyunción  $\alpha$ .

Las restricciones de las disyunciones son convexificadas como:

$$\begin{aligned}
s_{\alpha}^{\Delta y} \left( (y_i - Py_{s,r}) \cdot B_{s,i,\alpha} - y_{s,i,\alpha} \right) &\geq 0, \forall s \in rs(s,r), i \in pi(i), r \in R, \alpha \in A \\
s_{\alpha}^{\Delta x} \left( (x_i - Px_{s,r}) \cdot B_{s,i,\alpha} - x_{s,i,\alpha} \right) &\geq 0, \forall s \in rs(s,r), i \in pi(i), r \in R, \alpha \in A \\
s_{\alpha}^{\Delta y} \left( (y_i - Py_{s,r}) \cdot B_{s,i,\alpha} - y_{s,i,\alpha} \right) &\leq s_{\alpha}^{\Delta x} m_{\alpha} \left( (x_i - Px_{s,r}) \cdot B_{s,i,\alpha} - x_{s,i,\alpha} \right), \forall s \in rs(s,r), i \in pi(i), r \in R, \alpha \in A \\
s_{\alpha}^{\Delta y} \left( (y_i - Py_{s,r}) \cdot B_{s,i,\alpha} - y_{s,i,\alpha} \right) &\geq s_{\alpha}^{\Delta x} m_{\alpha-1} \left( (x_i - Px_{s,r}) \cdot B_{s,i,\alpha} - x_{s,i,\alpha} \right), \forall s \in rs(s,r), i \in pi(i), r \in R, \alpha \in A
\end{aligned}
\tag{4.27}$$

donde  $B_{s,i,\alpha}$  es una variables binaria que permite la selección de una disyunción. Para lograr esto, la variable binaria está sujeta a:

$$\sum_{\alpha \in A} B_{s,i,\alpha} = 1, \forall s \in rs(s,r), i \in pi(i) \tag{4.28}$$

Las variables de posición disgregadas deben presentar límites en su cálculo. Por tal motivo, las restricciones de terreno de la sección 4.3.1 son incluidas en el modelo como:

$$\begin{aligned}
x_{s,i,\alpha} &\leq B_{s,i,\alpha} \cdot \left( Lx - st - \frac{Lx_s}{2} \right), \forall s \in rs(s,r), i \in pi(i), \alpha \in A \\
y_{s,i,\alpha} &\leq B_{s,i,\alpha} \cdot \left( Ly - st - \frac{Ly_s}{2} \right), \forall s \in rs(s,r), i \in pi(i), \alpha \in A \\
x_{s,i,\alpha} &\geq 0 \quad y_{s,i,\alpha} \geq 0, \forall s \in rs(s,r), i \in pi(i), \alpha \in A
\end{aligned}
\tag{4.29}$$

La concentración mitigada es seleccionada a partir de la variable binaria de la posición, como ha sido mencionado anteriormente, de tal forma que:

$$\begin{aligned}
C_{s,r,i,m}^M &= \sum_{\alpha \in A} B_{s,i,\alpha} \cdot a_{s,r,m,\alpha}^M e^{b_{s,r,m,\alpha}^M (D_{s,r,i} - D_{s,r,\alpha}^M)} \\
\forall s \in rs(s,r), i \in pi(i), r \in R, m \in M
\end{aligned}
\tag{4.30}$$

donde  $C_{s,r,i,m}^M$  es la concentración mitigada usando un sistema de mitigación  $m$ ,  $D_{s,r,\alpha}^M$  es la distancia de

mitigación de la facilidad  $s$  para una emisión  $r$  dada en la dirección angular  $\alpha$ ,  $a_{s,r,m,\alpha}^M$  y  $b_{s,r,m,\alpha}^M$  son los parámetros de mitigación de la función de concentración para una emisión  $r$  dada en  $s$  usando un sistema de mitigación  $m$  en la dirección angular  $\alpha$ .

La concentración mitigada está sujeta a los límites:

$$\begin{aligned} C_{s,r,i,m}^M &\leq \sum_{\alpha \in A} B_{s,i,\alpha} \cdot a_{s,r,m,\alpha}^M, \forall s \in rs(s,r), i \in pi(i), r \in R, m \in M \\ C_{s,r,i,m}^M &> 0 \end{aligned} \quad (4.31)$$

La selección de un sistema de mitigación es planteada de forma similar al caso anterior, de tal forma que:

$$C_{s,r,i} = B_s^C \cdot C_{s,r,i}^R + \sum_{m \in ms(s,m)} B_{MIT_{s,m}} \cdot C_{s,r,i,m}^M, \forall s \in rs(s,r), i \in pi(i), r \in R \quad (4.32)$$

donde  $C_{s,r,i}$  es la concentración obtenida de la selección,  $B_s^C$  es una variable binaria que determinan si se omite el uso de un sistema de mitigación y  $B_{MIT_{s,m}}$  es una variable que al ser requerido un sistema de mitigación permite seleccionar aquel sistema de mitigación  $m$  de la facilidad  $s$  que optimice el problema. Las variables binarias están sujetas a:

$$B_s^C + \sum_{m \in ms(s,m)} B_{MIT_{s,m}} = 1, \forall s \in rs(s,r) \quad (4.33)$$

#### 4.6.3 Restricciones cuando una facilidad nueva tiene emisión y otra facilidad nueva personal

La convexificación de la disyunción (4.17) para este caso defiere de los anteriores debido a que en ambas facilidades la posición está variando. Por tal motivo, las posiciones de ambas facilidades deben ser disgregadas, de tal forma que:

$$\begin{aligned}
x_s &= \sum_{\alpha \in A} x_{s,k,\alpha}, \quad \forall s \in rs(s,r), k \in ps(s), k \neq s \\
y_s &= \sum_{\alpha \in A} y_{s,k,\alpha}, \quad \forall s \in rs(s,r), k \in ps(s), k \neq s \\
x_k &= \sum_{\alpha \in A} x_{k,s,\alpha}, \quad \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s \\
y_k &= \sum_{\alpha \in A} y_{k,s,\alpha}, \quad \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s
\end{aligned} \tag{4.34}$$

donde  $x_{s,k,\alpha}$ ,  $y_{s,k,\alpha}$ ,  $x_{k,s,\alpha}$  y  $y_{k,s,\alpha}$  son las variables de posición para cada disyunción  $\alpha$ .

La convexificación de la disyunción es planteada de tal forma que las restricciones se presenten como:

$$\begin{aligned}
s_\alpha^{\Delta y} (y_{s,k,\alpha} - y_{k,s,\alpha} - Py_{k,r} \cdot B_{k,s,\alpha}) &\geq 0, \quad \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s \\
s_\alpha^{\Delta x} (x_{s,k,\alpha} - x_{k,s,\alpha} - Px_{k,r} \cdot B_{k,s,\alpha}) &\geq 0, \quad \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s \\
s_\alpha^{\Delta y} (y_{s,k,\alpha} - y_{k,s,\alpha} - Py_{k,r} \cdot B_{k,s,\alpha}) &\leq s_\alpha^{\Delta x} m_\alpha (x_{s,k,\alpha} - x_{k,s,\alpha} - Px_{k,r} \cdot B_{k,s,\alpha}), \quad \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s \\
s_\alpha^{\Delta y} (y_{s,k,\alpha} - y_{k,s,\alpha} - Py_{k,r} \cdot B_{k,s,\alpha}) &\geq s_\alpha^{\Delta x} m_{\alpha-1} (x_{s,k,\alpha} - x_{k,s,\alpha} - Px_{k,r} \cdot B_{k,s,\alpha}), \quad \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s
\end{aligned} \tag{4.35}$$

donde  $B_{k,s,\alpha}$  es una variables binaria que permite la selección de una disyunción y está sujeta a:

$$\sum_{\alpha} B_{k,s,\alpha} = 1 \tag{4.36}$$

Las variables de posición disgregadas presentan las mismas características que las del caso anterior, por lo cual deben aplicarse límites en su cálculo. En este caso, los límites son aplicados a los dos pares de variables usando las restricciones de terreno, por lo que se tiene:

$$\begin{aligned}
x_{s,k,\alpha} &\leq B_{k,s,\alpha} \cdot \left( Lx - st - \frac{Lx_s}{2} \right), \quad \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s \\
y_{s,k,\alpha} &\leq B_{k,s,\alpha} \cdot \left( Ly - st - \frac{Ly_s}{2} \right), \quad \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s
\end{aligned} \tag{4.37}$$



$$x_{k,s,\alpha} \leq B_{k,s,\alpha} \cdot \left( Lx - st - \frac{Lx_k}{2} \right), \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s$$

$$y_{k,s,\alpha} \leq B_{k,s,\alpha} \cdot \left( Ly - st - \frac{Ly_k}{2} \right), \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s$$

$$x_{s,k,\alpha} \geq 0 \quad y_{s,k,\alpha} \geq 0, \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s$$

$$x_{k,s,\alpha} \geq 0 \quad y_{k,s,\alpha} \geq 0, \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s$$

La concentración mitigada es seleccionada a partir de la variable binaria de la posición, como ha sido mencionado anteriormente, de tal forma que:

$$C_{k,r,s,m}^M = \sum_{\alpha} B_{k,s,\alpha} \cdot a_{k,r,m,\alpha}^M e^{b_{k,r,m,\alpha}^M (D_{k,r,s} - D_{k,r,\alpha}^M)}, \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s \quad (4.38)$$

donde  $C_{k,r,s,m}^M$  es la concentración mitigada usando un sistema de mitigación  $m$ ,  $D_{k,r,\alpha}^M$  es la distancia de mitigación de la facilidad  $k$  para una emisión  $r$  dada en la dirección angular  $\alpha$ ,  $a_{k,r,m,\alpha}^M$  y  $b_{k,r,m,\alpha}^M$  son los parámetros de mitigación de la función de concentración para una emisión  $r$  dada en  $k$  usando un sistema de mitigación  $m$  en la dirección angular  $\alpha$ . La concentración mitigada está sujeta a los límites:

$$C_{k,r,s,m}^M \leq \sum_{\alpha \in A} B_{k,s,\alpha} \cdot a_{k,r,m,\alpha}^M, \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s, r \in R, m \in M \quad (4.39)$$

$$C_{k,r,s,m}^M > 0$$

El planteamiento en el caso de la existencia de emisión en una facilidad nueva que afecte al personal en una facilidad nueva pero diferente es:

$$C_{k,r,s} = B_k^C \cdot C_{k,r,s}^R + \sum_{m \in ms(s,m)} B_{MIT_{k,m}} \cdot C_{k,r,s,m}^M, \forall k \in rs(s,r), s \in ps(s), k \neq s \quad (4.40)$$

donde  $C_{k,r,s}$  es la concentración obtenida de la selección. Las variables binarias son equivalentes a las pre-

sentadas en la ecuación (4.33) ya que están referidas a la misma facilidad donde ocurre una emisión.

Las formulaciones matemáticas presentadas en esta sección forman un problema mixto entero no lineal que es resuelto usando el resolvidor *GAMS*.

#### 4.7. Función objetivo

La función está basada en el costo total de la instalación e incluye el costo de terreno, costo de interconexión, costo de mitigación y costo de daño al personal. El costo de terreno está definido por el área ocupada por las facilidades y difiere del terreno total preestablecido. Esta área ocupada está definida de forma rectangular cuyas dimensiones son las máximas distancias obtenidas por las facilidades distribuidas representadas por  $A_x$  y  $A_y$  en las coordenadas  $x$  y  $y$  respectivamente (Vázquez-Román *et al.*, 2010). El valor del costo del terreno depende de la distribución representa una extensión de la planta o una planta nueva. El cálculo de dichas dimensiones es planteada como:

$$A_x \geq x_s + \frac{Lx_s}{2}, \forall s \in S \quad (4.41)$$

$$A_y \geq y_s + \frac{Ly_s}{2}, \forall s \in S \quad (4.42)$$

por lo cual, el costo del terreno es:

$$C^L = C_L A_x A_y \quad (4.43)$$

El costo de interconexión es calculada para aquellas facilidades industriales que estén conectadas por tubería o cuenten con sistemas de cableado eléctrico y electrónico. El valor de este costo va a depender del tipo de conexión de la facilidad. El cálculo de este costo requiere la distancia de separación entre

las facilidades interconectadas la cual está planteada por la distancia euclidiana. El costo de interconexión se define como:

$$C^P = C_P \sum_{(a,b) \in M_{a,b}} D_{a,b} \quad (4.44)$$

donde  $D_{a,b}$  es la distancia euclidiana entre las facilidades  $a$  y  $b$  definida como:

$$D_{a,b}^2 = (x_a - x_b)^2 + (y_a - y_b)^2 \quad (4.45)$$

El cálculo del costo de daño al personal está basado en escenarios cuya ocurrencia no es simultánea. El valor del costo de daño al personal es un valor de determinación compleja y de efectos controversiales. Un valor próximo oscila en 10 millones de dólares (Jung *et al.*, 2010b) aunque algunas fuentes informativas, como el *Washington Post*, lo han aproximado a 6.8 millones de dólares. En este trabajo el valor del costo no es calculado y se considera estos dos valores mostrados. La expresión que incluye este costo en el planteamiento es:

$$C^D = C_D P_L \left( \sum_{\substack{n(s,r) \\ k \in ps(s)}} \sum_{k \in ps(s)} f_{s,r} P_{s,r,k} P e_k + \sum_{\substack{n(s,r) \\ s \in pi(i)}} \sum_{s \in pi(i)} f_{s,r} P_{s,r,i} P e_i + \sum_{\substack{n(i,r) \\ s \in ps(s)}} \sum_{s \in ps(s)} f_{i,r} P_{i,r,s} P e_s \right) \quad (4.46)$$

El costo del sistema de mitigación es determinado en base de los parámetros de diseño de la facilidad y del sistema de mitigación. El cálculo de este costo no es incluido en este trabajo y por simplicidad se toma como un valor constante y aproximado a aquellos usados en la industria. El costo es seleccionado según sea seleccionado el sistema de mitigación en una facilidad, por lo cual, se tiene:

$$\begin{aligned}
C^{Mit_i} &= \sum_{m \in mi(i,m)} B^{Mit_{i,m}} \cdot C^{Mit_{i,m}} \\
C^{Mit_s} &= \sum_{m \in ms(s,m)} B^{Mit_{s,m}} \cdot C^{Mit_{s,m}}
\end{aligned}
\tag{4.47}$$

Finalmente, el coCsto total de mitigación es definido por la suma de el costo seleccionado en la facilidad, y se define como:

$$C^M = \sum_{s \in rs(s,r)} C^{Mit_s} + \sum_{i \in ri(i,r)} C^{Mit_i}
\tag{4.48}$$

La función objetivo consiste en minimizar la suma de los costos mencionados en las ecuaciones (4.43), (4.44), (4.46) y (4.48):

$$\min(C^L + C^P + C^D + C^M)
\tag{4.49}$$

El siguiente capítulo lleva a cabo una serie de casos de estudio sobre el modelo de optimización descrito. Además, un paquete computacional para la solución de este tipo de problemas fue desarrollado en este trabajo y su descripción se presenta en el siguiente capítulo.

## Capítulo 5. CASOS DE ESTUDIO: PROGRAMA *TROL*

Los conceptos definidos en los capítulos anteriores son aplicados en este capítulo. Así, los casos de estudio retoman lo discutido anteriormente. Además, estos casos de estudio son resueltos con un paquete computacional desarrollado a lo largo de este trabajo, *TROL* (Toxic Release in Optimal facility Layout). Una introducción sobre paquetes computacionales aplicados en la distribución de facilidades y equipos es la primera parte de este capítulo. Posteriormente se describe la arquitectura y el manejo de *TROL*. Los casos de estudio están enfocados a mostrar el efecto reductivo de los sistemas de mitigación a través de la comparación de soluciones obtenidas con emisión sin mitigación.

### 5.1. Programas referentes a la distribución de equipos y facilidades

La distribución de equipos industriales es un problema sobre el cual ha sido propuesta una gran diversidad de métodos de solución, como se indicó en las Secciones 1.2 y 4.1. Inicialmente, el enfoque del problema fue la distribución de secciones de ensamblaje donde la mejor ubicación dependía de las cualidades que cada sección mostraba al ser ubicada una cerca de otra (Francis y White, 1974). La solución inicial del problema fue propuesta de forma cualitativa basándose en la prioritización de la cercanía en las secciones. Por otra parte, una forma cuantitativa fue propuesta con un algoritmo computacional definido como *CRAFT* (Computerized Relative Allocation of Facilities Technique). Este algoritmo parte de una distribución propuesta y calcula iterativamente el costo de transporte y la ubicación hasta obtener un valor mínimo (Armour y Buffa, 1963).

Posteriormente, diversos algoritmos fueron desarrollados para resolver el problema de la distribu-

ción de equipos. Uno de estos es el algoritmo computacional *ALDEP* (Automated Layout Design Program) el cual resuelve el problema por medio de la priorización entre la cercanía de las secciones (Sheehof y Evans, 1967). Otro algoritmos es *CORELAP* (Computerized Relationship Layout Planning) cuyo enfoque es resolver el problema de distribución con la utilización de valor de importancias entre las unidades (Lee y Moore, 1967).

La evolución de los métodos de solución del problema de distribución ha dependido de la capacidad computacional existente. Así, una serie de programas más elaborados ha surgido para resolver este problema. Uno de estos programas es *MASL* (Multifactor Approach for Selecting Layout) el cual evita las deficiencias mostradas por *ALDEP*, *CORELAP* y *CRAFT*. Además, *MASL* incluye la optimización del flujo de producto, los obstáculos físicos y la capacidad de crecimiento de la planta (Galbraith y Miller, 1990). Por otra parte, *DISCON* (DISpersion CONcentration) es un programa que considera al problema de manera no convexa y lo resuelve a través del método de gradiente diferencial lagrangiano. Además, este método emplea ecuaciones diferenciales cuya solución es minimizada para indicar un óptimo local de la distribución (Drezner y Wesotowsky, 1985).

La aplicación de métodos no convencionales ha sido demostrada en el programa *FLEXP*ERT (Facility Layout EXPERT) que utiliza cuantitativamente algoritmos difusos (Alif y Badiru, 1996). Asimismo, el programa *HOPE* (Heuristically Operated Placement Evolution) es otro ejemplo de métodos no convencionales al aplicar algoritmos genéticos a la solución del problema de distribución (Kochhar *et al.*, 1998). Similarmente, *AVOLI* (Visual Environmental for Industrial Layout Optimization) es un programa que aplica la optimización de búsqueda local usando un algoritmo *tabu* con una ventaja notoria sobre problemas de obstrucciones (Martins *et al.*, 2006).

En la actualidad la solución del problema de distribución de equipos industriales por medio de programas computacionales ha requerido el uso de interfaces gráficas. Un ejemplo de estos es *FLAG* (Facility Layout Algorithm using Graphics) el cual aplica un enfoque gráfico al problema considerándolo sobre un plano continuo mostrando una buena relación con el usuario (Ketcham *et al.*, 1989). Otro ejemplo es el programa *FLQ* (Facility Layout with Queuing) el cual permite al usuario obtener la distribución

óptima donde se incluyan las restricciones de priorización en el manejo del producto. El uso de una interfaz en *FLQ* permite suministrar las propiedades de los elementos del programa (Yang y Benjaafar, 2001). Asimismo, el programa *FACOPT* (FACility layout OPTimization) muestra una interfaz que permite al usuario la solución del problema utilizando algoritmos genéticos (Yang y Benjaafar, 2001). Por otra parte, entre los programas comerciales *VIP\_PLANOT*, en su última modificación del 2006, ha mostrado resultados aceptables al abarcar gran parte de los algoritmos y problemas planteados para el problema de la distribución de equipos industriales.

El cálculo de efectos por accidentes industriales no está incluido en programas de distribución de equipos y facilidades, por tal motivo se requieren programas especializados. Entre estos programas están listados *EFFECTS*, realizado por *TNO*, *FLACS* (FLame ACceleration Simulator), realizado por GexCon, y *PHAST*, realizado por Det Norske Veritas. En el caso de emisiones tóxicas, los programas especializados en *CFD* (Computational Fluid Dynamics) son recomendables. Sin embargo, los programas anteriores no pueden ser vinculados directamente a un programa de optimización en el que iterativamente se modifiquen los valores de riesgo conforme se optimiza el problema.

La necesidad de incluir el análisis de la dispersión de gases tóxicos en la distribución de facilidades mostró la oportunidad de crear un programa capaz de desarrollar esto. Sin embargo, la solución sofisticada de los modelos de dispersión es omitida por el uso de modelos más simples, como el caso de *SLAB*. De esta manera, un programa computacional es formulado con capacidad de cuantificar los valores de riesgo indispensables cuando existe emisión de gases tóxicos incluyendo sistemas de mitigación. Este programa se nombró *TROL* (Toxic Release in Optimal facility Layout). Por otra parte, *TROL* logra la optimización de la distribución de facilidades usando la interfaz *GAMS*. Esta interfaz permite la solución del problema a través de sus resolvedores.

## **5.2. Arquitectura del programa *TROL***

La estructura del programa *TROL* proviene de una arquitectura orientada a objetos usando *Microsoft Visual Studio*. Inicialmente *TROL* fue desarrollado en la versión *MFC 8.0* contenida en *Microsoft Vi-*

Visual Studio 2005 con el producto Visual C++ 8.0. A lo largo de la evolución del MFC el programa fue modificado. Así, las modificaciones a TROL se realizaron usando MFC 9.0 con Visual C++ 2008 y MFC 10.0 con Visual C++ 2010. TROL es compatible con las plataformas Windows XP, Windows Vista y Windows 7. En todos los casos, el programa TROL requiere de la existencia del programa GAMS para poder resolver la optimización.

La arquitectura del programa TROL está diseñada para recibir datos del usuario desde la interface y de archivos externos, la Figure 5.1 muestra esta interfaz. En el ingreso de datos, la interface permite al usuario definir los parámetros de optimización, dispersión, mitigación y las características de las facilidades a través de sus diálogos respectivos. En particular, el diálogo representativo de las facilidades permite ingresar los datos de los sistemas de mitigación y de las emisiones existentes por facilidad. Además, la base de datos de gases tóxicos puede ser expandida o modificada en su diálogo respectivo.

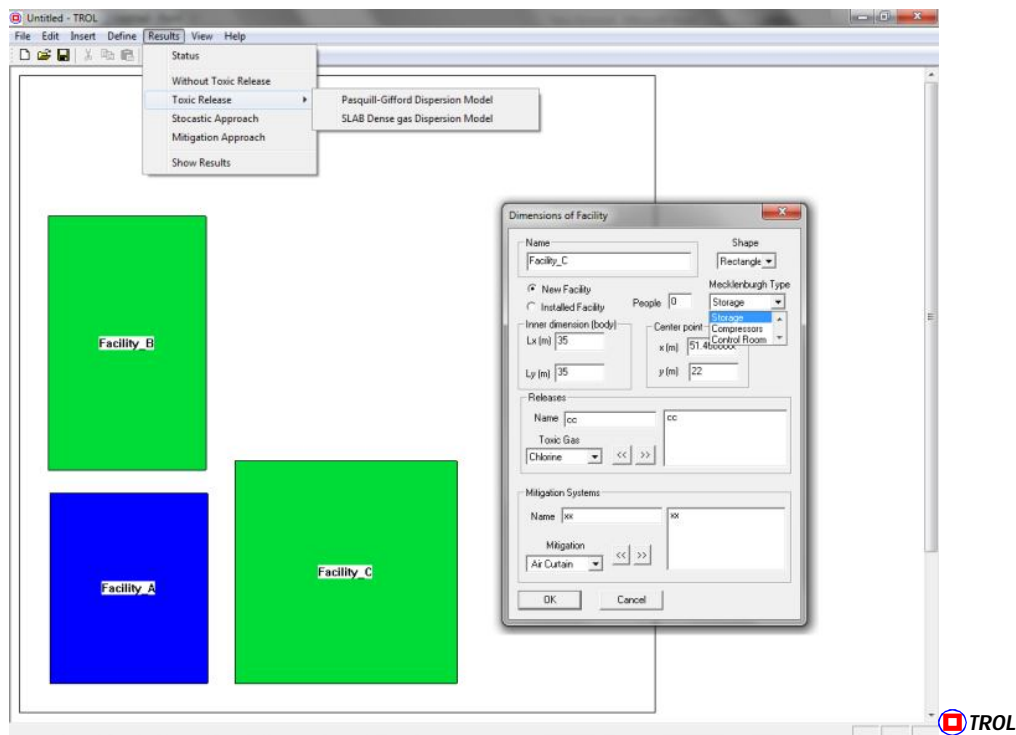


Figura 5.1 Interfaz del programa TROL.



Los resultados son desplegados en la interfaz a través de la reubicación de las facilidades y el diálogo de resultados. Además, un archivo de texto resume todo lo concerniente con el problema definido en la interfaz. Durante la solución del problema, el programa *TROL* define los modelos y datos de gases a utilizar. Así, el programa *GAMS* solo recibe las ecuaciones concernientes a la optimización y el valor de los parámetros que dependen de las circunstancias del problema. La Figura 5.2 representa la arquitectura de comunicación del programa *TROL* a través de un diagrama de flujo de su funcionamiento.

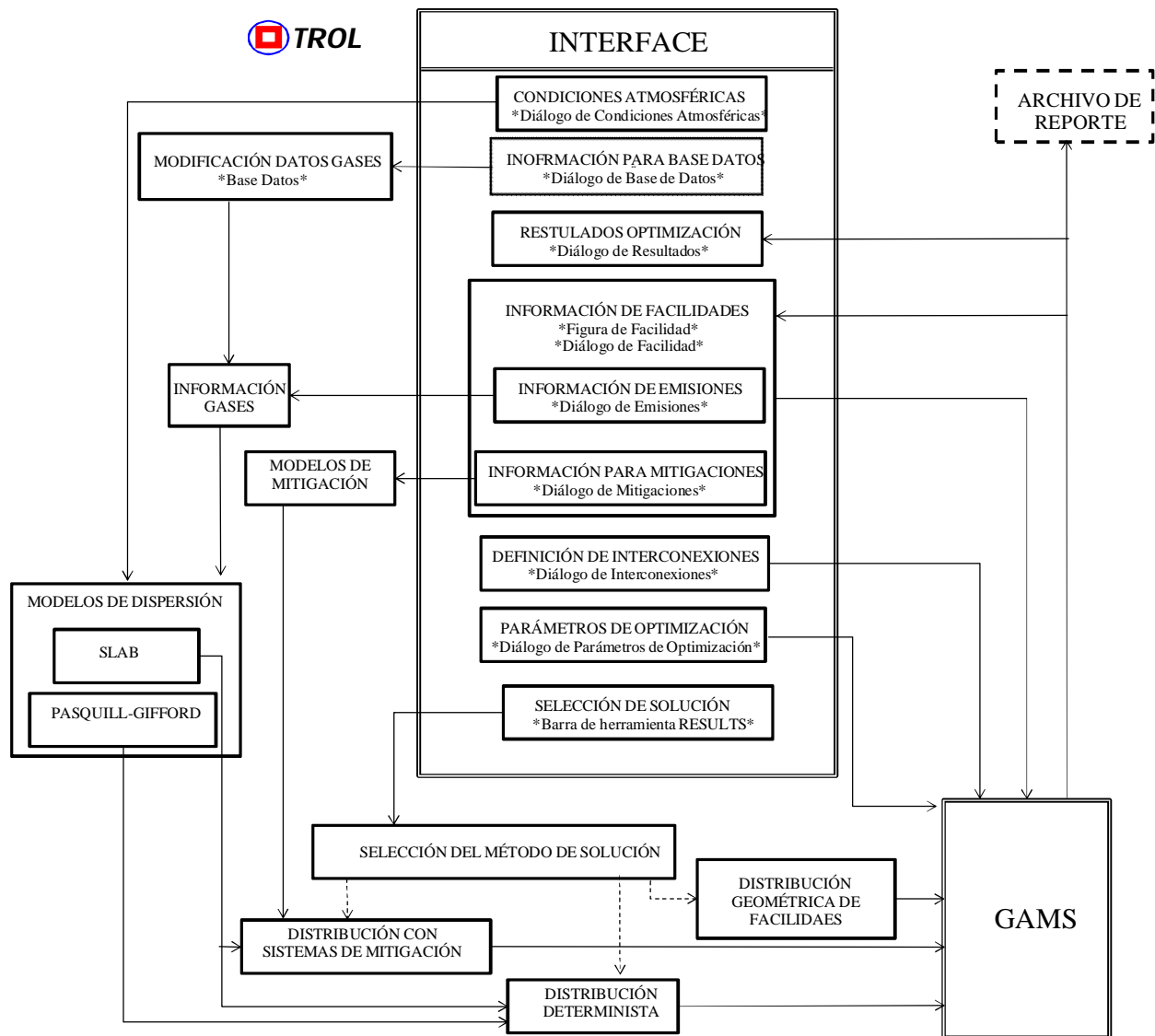


Figura 5.2 Diagrama de flujo del funcionamiento del programa *TROL*.

El programa *TROL* puede manejar una gran cantidad de facilidades industriales, entre instaladas y nuevas, según lo permitan las dimensiones del terreno. Sin embargo, la solución de un problema extenso requerirá mayor tiempo computacional y en algunos resolvers existentes en *GAMS* la solución de un problema de este tipo no asegura el óptimo global. Además, es recomendable tener una licencia de algunos resolvers de *GAMS* sobre todo aquellos enfocados en la solución de MINLP y NLP.

Los errores en la ejecución de *TROL* provienen ya sea de la optimización o las características de las emisiones y mitigaciones. La solución de problemas debidos a la optimización se da en el cambio de los valores iniciales de las facilidades lo cual se logra al mover las facilidades por instalar. Además, otra estrategia es probar con un resolver distinto. Los errores sobre la emisión son generados por la ubicación de la concentración de daño fuera del terreno. En este caso, las facilidades no pueden ser ubicadas más allá del terreno por lo que se recomienda aumentar el tamaño de este. En el caso de las mitigaciones, las propiedades de los sistemas de mitigación hacen que la nube se convierta en una dispersión pasiva sobre la que no es posible aplicar el modelo *SLAB*. En este último caso es recomendable buscar valores acertados en la mitigación para poder lograr su solución.

### **5.3. Caso de estudio 1**

El problema planteado consiste en obtener la distribución de un conjunto de facilidades industriales con emisión de gas tóxico. Las características de las facilidades son descritas en la Tabla 5.1. La distribución se realiza en un terreno con dimensiones de 1100 m por 1100 m y con una calle de maniobras de 5 m. Los costos son para la interconexión de 200 \$/m, el terreno 20 \$/m<sup>2</sup> y el daño al personal 8,000,000 \$/persona. Además, la vida útil de la planta se proyecta a 50 años. Las interconexiones son dadas de facilidad a facilidad como Facilidad\_B – Nueva\_A, Facilidad\_B – Nueva\_D y Nueva\_A – Nueva\_D. Por otra parte, las condiciones atmosféricas son el peor escenario, 1.5/F, con rugosidad de pasto a 1 cm de altura y un aire a 290 K con 45 % de humedad.

Tabla 5.1 Características de las facilidades para el Caso de Estudio 1.

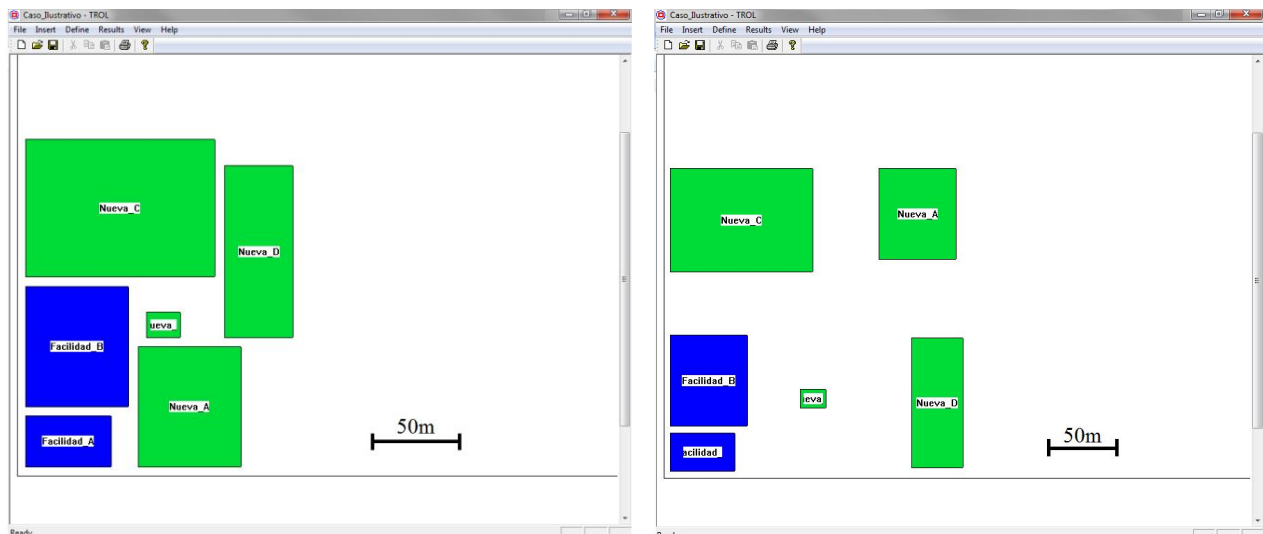
Nombre	Tipo Mecklenburgh	$L_x$ (m)	$L_y$ (m)	X (m)	Y (m)	Personal
Facilidades instaladas						
Facilidad_A	Oficinas	50	30	30	20	20
Facilidad_B	Proceso	60	70	35	75	2
Facilidades Nuevas						
Nueva_A	Proceso	60	70			0
Nueva_B	Cuarto de control	20	15			10
Nueva_C	Almacén	110	80			2
Nueva_D	Tanques almacenamiento	40	100			0

Las emisiones son planteadas para Facilidad\_B y Nueva\_D. La primera facilidad tiene una emisión de gas cloro con frecuencia de ocurrencia de  $2.5E-4$  ubicada en el centro de la facilidad con un flujo de 420 g/s en un charco de 1 m de diámetro y con propiedades de densidad de  $3.21 \text{ Kg/m}^3$  y temperatura de 245 K. La segunda cuenta con una emisión de fosgeno con frecuencia de ocurrencia de  $1.5E-6$  ubicada en (-5,0) dentro de la facilidad con un flujo de 80 g/s a través de una tubería de 1 plg y con propiedades de densidad de  $4.35 \text{ Kg/m}^3$  y temperatura de 260 K.

Los sistemas de mitigación para Facilidad\_B son una cortina de agua y una de vapor. La cortina de agua tiene una temperatura de 298 K y un flujo de 20 gpm a través de boquillas con  $\frac{3}{4}$  plg de orificio y 90 cm de separación entre sí. Las boquillas forman gotas con un tamaño promedio de  $300 \mu\text{m}$  y están diseñadas para generar un ángulo de apertura de  $120^\circ$ . El sistema presenta absorción y la posición de las boquillas es en el nivel del suelo. La cortina de vapor es suministrada por vapor saturado a 5 bar que pasan a través de orificios de 0.5 plg separados 50 cm entre sí. Los costos para estos sistemas son \$18,000 y \$23,000 respectivamente.

Los sistemas de mitigación para Nueva\_D son una cortina de aire y una cortina de vapor. La cortina de aire maneja este gas a 5 bar, 280 K y 45 % de humedad a través de orificios de 1 plg de diámetro y 45 cm de separación entre sí. La cortina de vapor es suministrada por vapor saturado a 5 bar que pasa a través de orificios de 0.5 plg y la separación entre los orificios es de 50 cm entre sí. Los costos para estos sistemas son \$20,000 y \$23,000 respectivamente. La solución de este problema se describe en los siguientes pasos.

Las soluciones provienen de aplicar el resolvidor CONOPT para la programación no lineal y DICOPT para MINLP. Los resultados para las distribuciones geométricas muestran una diferencia notoria entre lo obtenido al aplicar o no las distancias Mecklenburgh, ya que las distancias Mecklenburgh crean un aumento en la separación entre facilidades. Esta solución demuestra el beneficio de la aplicación de estas distancias en la distribución al reducir el riesgo. La Figura 5.3 muestra la diferencia observada entre estas soluciones. En la imagen se observa un patrón de ubicación similar en las dos soluciones solo difieren por la distancia de separación y el costo. El costo y las coordenadas obtenidas para ambas soluciones son mostrados en la Tabla 5.2. El costo al aplicar las distancias Mecklenburgh duplica al costo de forma geométrica debido al aumento del terreno ocupado y la distancia de interconexión entre las facilidades.



a) Solución sin aplicar distancias Mecklenburgh

b) Solución con distancias Mecklenburgh

Figura 5.3 Comparación de resultados al aplicar o no distancias Mecklenburgh en Caso de Estudio 1.

Tabla 5.2 Resultados de las distribuciones geométricas en el Caso de Estudio 1.

Nombre	Geométrico simple		Distancias Mecklenburgh	
	X (m)	Y (m)	X (m)	Y (m)
Nueva_A	100	40	195	203
Nueva_B	85	87.5	115	37.5
Nueva_C	60	155	60	190
Nueva_D	140	130	210	58
Terreno (m <sup>2</sup> )	31,200		54,740	
Costo total (\$)	677,031		1,220,225	

La distribución de facilidades en este problema sin aplicar sistemas de mitigación resultó con una esperada separación excesiva entre las facilidades. Estas separaciones fueron dadas para la distancia entre el punto de emisión y la ubicación de la concentración de valor ERPG-3 de cada emisión. Así, las distancias fueron calculadas como 635 m de la emisión de gas cloro y 134 m para la emisión de fosgeno, como se aprecia en la Figura 5.4 a). Sin embargo, a pesar de mostrar un costo elevado, la distribución muestra la ubicación de mayor seguridad para las facilidades con personal, Nueva\_B y Nueva\_C, al ser estas alejadas totalmente de los puntos de emisión.

La distribución de facilidades considerando sistemas de mitigación demuestra una reducción notoria de la distancia, el costo y riesgo. La Figura 5.4 b) es la descripción de esta distribución. Así, la aplicación de la mitigación reduce la concentración y genera una nube de dispersión post-mitigada de menor tamaño a la mostrada sin mitigación. Esto implica que una probabilidad de muerte de valores bajos se encuentre a una distancia corta. Así, el costo reducido es la consecuencia de esto por la disminución del área ocupada, distancia de separación y probabilidad de muerte. Por otra parte, la comparación de esta distribución con la obtenida sin aplicar sistemas de mitigación demuestra claramente la efectividad de los sistemas de mitigación y la aplicabilidad del modelo de optimización, la Figura 5.4 muestra esta comparación y la Tabla 5.3 resume los datos obtenidos en ambos casos. Adicionalmente, la selección de los sis-

temas de mitigación es otro resultado importante e interesante. El modelo definió a través de la variable binaria qué sistema de mitigación le corresponde a cada facilidad. Así, para Facilidad\_B se seleccionó la cortina de vapor y para Nueva\_D la cortina de aire. Las selecciones fueron dadas por una reducción notable en la concentración, como en Facilidad\_B, o un bajo costo del sistema, en Nueva\_D.

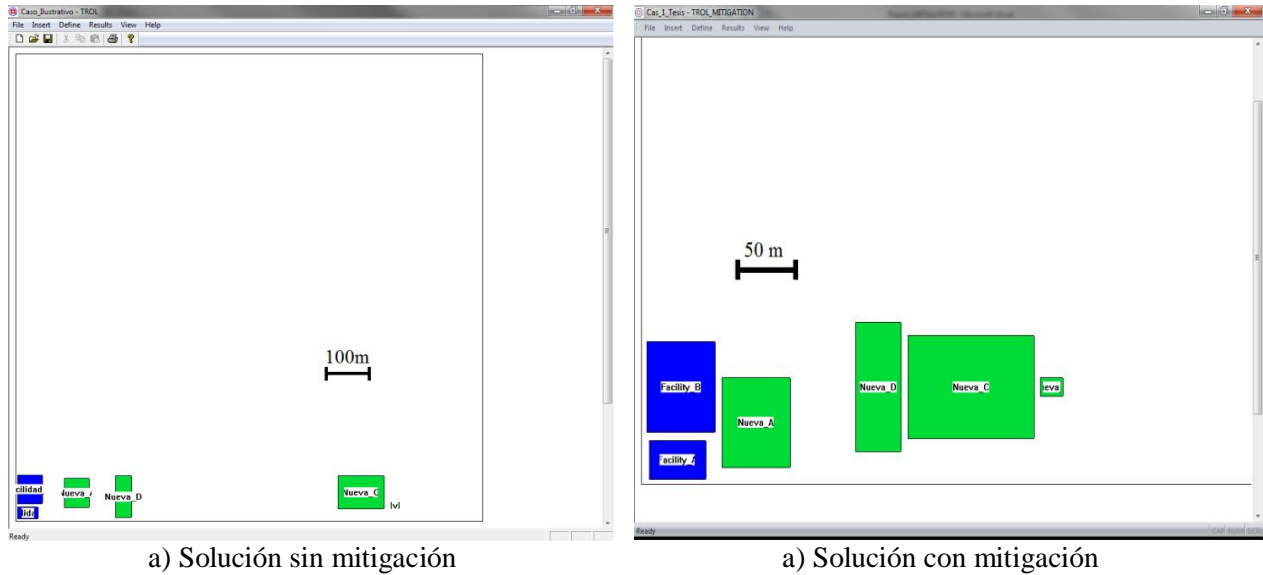


Figura 5.4 Comparación de la omisión y aplicación de mitigación para el Caso de Estudio 1.

Tabla 5.3 Resultados de aplicar y omitir los sistemas de mitigación en el Caso de Estudio 1.

Nombre	Sin mitigación		Con mitigación	
	X (m)	Y (m)	X (m)	Y (m)
Nueva_A	145	66.5	100	47.5
Nueva_B	894.04	37.5	356	75
Nueva_C	814.04	68	286	75
Nueva_D	255	58	206	75
Terreno (m <sup>2</sup> )	97,636.5		45,742	
Costo total (\$)	1,997,610		1,054,715	

## 5.4. Caso de estudio 2

El problema se plantea similarmente al anterior donde dado un conjunto de facilidades industriales con emisión de gases tóxicos definir la ubicación de las nuevas facilidades. Las características de las facilidades instaladas y las nuevas son descritas en Tabla 5.4 y Tabla 5.5 respectivamente. La distribución se realiza en un terreno con dimensiones de 700 m por 700 m y con una calle de maniobras de 5 m. Los costos son para la interconexión de 60.8 \$/m, el terreno 16 \$/m<sup>2</sup> y el daño al personal 8,000,000 \$/persona. Además, la vida útil de la planta se proyecta a 50 años. Las interconexiones son dadas de facilidad a facilidad como Nueva\_A – Nueva\_B y Nueva\_B – Nueva\_C. Por otra parte, las condiciones atmosféricas son el peor escenario, 1.5/F, con rugosidad de pasto a 1 cm de altura y aire a 290 K con 25 % de humedad.

Tabla 5.4 Características de las facilidades instaladas para el Caso de Estudio 2.

Nombre	$L_x$ (m)	$L_y$ (m)	X (m)	Y (m)	Personal
Facilidad_A	45	30	97	20.5	5
Facilidad_B	30	50	21.5	30	1
Facilidad_C	25	20	57.9	31.7	0
Facilidad_D	30	20	88.7	49.5	0

Tabla 5.5 Características de las facilidades nuevas para el Caso de Estudio 2.

Nombre	$L_x$ (m)	$L_y$ (m)	Personal
Cuarto_Control	15	15	10
Nueva_A	25	45	2
Nueva_B	60	60	0
Nueva_C	35	20	0
Nueva_D	35	20	0

Las emisiones son planteadas para Facilidad\_C, Nueva\_C y Nueva\_D. La primera facilidad tiene una emisión de gas cloro con frecuencia de ocurrencia de  $5E-4$  ubicada en (10,-7) de la facilidad con un flujo de 114 gr/s a través de una tubería de 1 in de diámetro. Las propiedades de la emisión son una densidad de  $3.21 \text{ Kg/m}^3$  y temperatura de 245 K. Además, una fuga de  $\text{H}_2\text{S}$  ocurre en el centro de la facilidad. Esta fuga tiene una frecuencia de ocurrencia de  $1E-3$ , una densidad de  $1.36 \text{ Kg/m}^3$  y un flujo de 50 g/s a través de una tubería de 1 in a 222K. La emisión de gas cloro ocurre a estas mismas condiciones en el centro de Nueva\_C con una frecuencia de ocurrencia de  $2.5E-3$ . La emisión de  $\text{H}_2\text{S}$  ocurre en el centro de Nueva\_D con una frecuencia de ocurrencia de  $1E-3$  a las mismas condiciones de su homóloga presente en la Facilidad\_C.

Los sistemas de mitigación para Facilidad\_C son una cortina de aire y una de agua. La cortina de aire maneja este gas a 3 bar, 280 K y 40% de humedad a través de orificios de  $\frac{1}{2}$  plg de diámetro y 35 cm de separación entre sí. La cortina de agua tiene una temperatura de 298 K y un flujo de 14 gpm a través de boquillas con  $\frac{3}{4}$  plg de orificio y 20 cm de separación entre sí. Las boquillas forman gotas con un tamaño promedio de  $300 \mu\text{m}$  y están diseñadas para generar un ángulo de apertura de  $90^\circ$ . El sistema presenta absorción y la posición de las boquillas es en el nivel del suelo. Los costos para estos sistemas son \$18,000 y \$20,000 respectivamente.

Los sistemas de mitigación para Nueva\_C son una cortina de aire, una cortina de agua y una cortina de vapor. La cortina de aire maneja este gas a 3 bar, 280 K y 40 % de humedad a través de orificios de  $\frac{1}{2}$  plg de diámetro y 35 cm de separación entre sí. La cortina de agua difiere del anterior solo en la distancia de separación y el ángulo de apertura, cuyos valores son de 30 cm y  $120^\circ$ . La cortina de vapor es suministrada por vapor saturado a 5 bar que pasa a través de orificios de 1 plg y la separación entre los orificios es de 35 cm entre sí. Los costos para estos sistemas son \$22,000, \$23,000 y \$24,500 respectivamente.

Los sistemas de mitigación para Nueva\_D son una cortina de aire, una cortina de agua y una cortina de vapor. Las cortina de aire y vapor son las mismas utilizadas para Nueva\_C. La cortina de agua

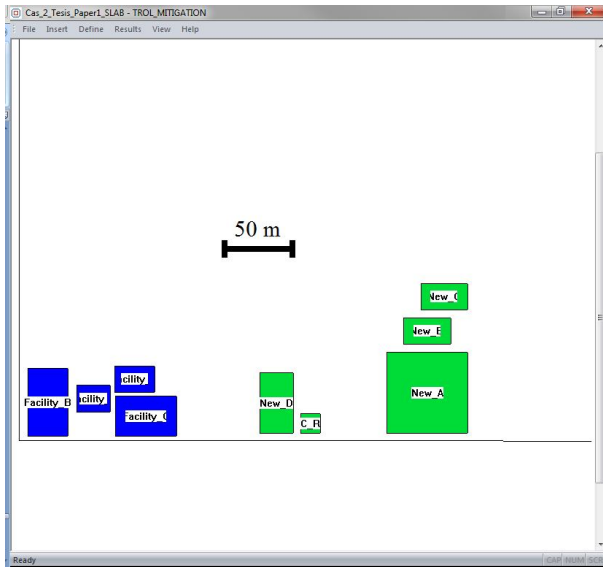


difiere de la usada en Facilidad\_C solo en la distancia de separación y el ángulo de apertura, para este caso son de 50 cm y 90°. Los costos para estos sistemas son \$22,000, \$23,000 y \$24,500 respectivamente.

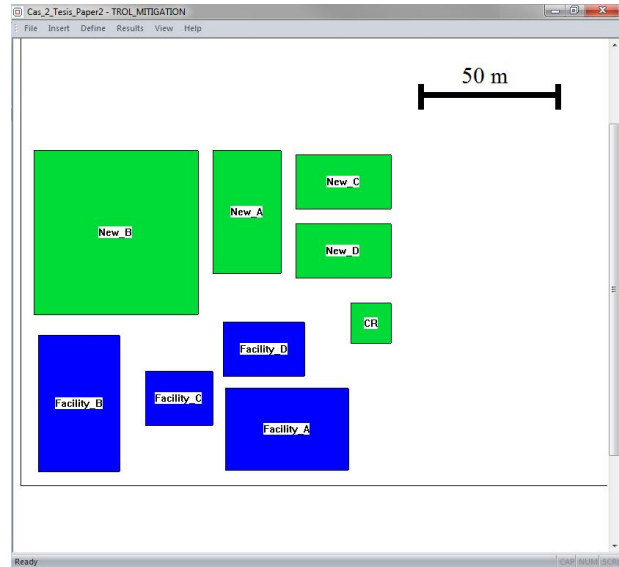
Las soluciones obtenidas provienen de aplicar el resolver CONOPT para la programación no lineal y DICOPT para MINLP. Este problema requirió mayor tiempo de cómputo debido a un aumento en el número de ecuaciones. Este aumento de ecuaciones es causa de la cantidad de facilidades nuevas, emisiones y sistemas de mitigación. Así, los valores iniciales para la solución del problema fueron importantes para la determinación de la factibilidad. Nuevamente, la aplicación de sistemas de mitigación muestra una reducción notoria en la distancia y el costo. En este caso se observa que la distribución aplicando sistemas de mitigación se asemeja a una distribución geométrica por la distancia de separación entre las facilidades y el costo. Esto indica que, espacialmente, las distribuciones son aceptables. La Figura 5.5 muestra la diferencia al aplicar u omitir sistemas de mitigación. La Tabla 5.6 resume los datos obtenidos en ambos casos. La cortina de agua es el sistema de mitigación seleccionado para las tres facilidades.

Tabla 5.6 Resultados de aplicar y omitir los sistemas de mitigación en el Caso de Estudio 2.

Nombre	Sin mitigación		Con mitigación	
	X (m)	Y (m)	X (m)	Y (m)
Cuarto_Control	213.7	12.5	127.5	59.2
Nueva_A	298.9	35	82.5	99.4
Nueva_B	298.9	80	35	92
Nueva_C	311.4	105	117.5	110.5
Nueva_D	188.7	27.5	117.5	85.3
Terreno (m <sup>2</sup> )	37,823		16,458.2	
Costo total (\$)	608,698		340,241	



a) Solución sin mitigación



a) Solución con mitigación

Figura 5.5 Comparación de la omisión y aplicación de mitigación para el Caso de Estudio 2.

### 5.5. Caso de estudio 3

Este problema ha sido enfocado en la distribución de una planta de producción de gas cloro. El análisis de este problema está enfocado en la aplicación de la metodología realizada en este trabajo y tiene solo fines académicos, así mismo los datos utilizados.

Las características de las facilidades instaladas y las nuevas son descritas en Tabla 5.7 y Tabla 5.8, respectivamente. La distribución se realiza en un terreno con dimensiones de 800 m por 500 m y con una calle de maniobras de 5 m. Los costos son para la interconexión de 130 \$/m, el terreno 20 \$/m<sup>2</sup> y el daño al personal 8,000,000 \$/persona. Además, la vida útil de la planta se proyecta a 50 años. Las interconexiones son dadas de facilidad a facilidad como: Facilidad\_A - Nueva\_A, Facilidad\_B - Nueva\_D, Facilidad\_A - Nueva\_E y Nueva\_A - Nueva\_C. Por otra parte, las condiciones atmosféricas son el peor escenario, 1.5/F, con rugosidad de pasto a 1 cm de altura y aire a 287 K con 40 % de humedad.

Tabla 5.7 Características de las facilidades instaladas para el Caso de Estudio 3.

Nombre	$Lx$ (m)	$Ly$ (m)	$X$ (m)	$Y$ (m)	Personal
Facilidad_A	35	15	22.7	13.3	0
Facilidad_B	25	34	25.3	41.3	0
Facilidad_C	23	23	56	17.3	0
Facilidad_D	19	36	80	25	17

Tabla 5.8 Características de las facilidades nuevas para el Caso de Estudio 3.

Nombre	$Lx$ (m)	$Ly$ (m)	Personal
Cuarto_Control	17	25	16
Nueva_A	15	25	0
Nueva_B	17	30	0
Nueva_C	35	35	4
Nueva_D	17	45	0
Nueva_E	23	17	5

Las emisiones son planteadas para Facilidad\_A, Nueva\_B y Nueva\_D. Todas las emisiones son de gas cloro con densidad de  $3.21 \text{ Kg/m}^3$  y temperatura de 245 K. La primera facilidad tiene dos emisiones de gas cloro con frecuencia de ocurrencia de 0.005 y 0.001 ubicadas en (-12,5) y (10,0), respectivamente. La primera emisión ocurre en un charco de 1.3 m de diámetro con un flujo de 2.13 kg/s. La otra emisión ocurre a través de una tubería de 1 plg de diámetro, un flujo másico de 146 g/s. En la Nueva\_B ocurre una emisión de gas cloro que se ubica en (0,0) con frecuencia de ocurrencia de 0.0001 a través de una tubería de 3 plg y un flujo de 638 g/s. Finalmente, Nueva\_D cuenta con 3 emisiones. La primera ocurre en (0,0) a través de una tubería de 1 plg y un flujo de 113.9 g/s; la segunda ocurre en (7,20) a través de

una tubería de 2 plg y un flujo de 283.6 g/s; y, la tercera ocurre en (-7,-20) debido a un charco de 1 m de diámetro con un flujo de 1.9 Kg/s.

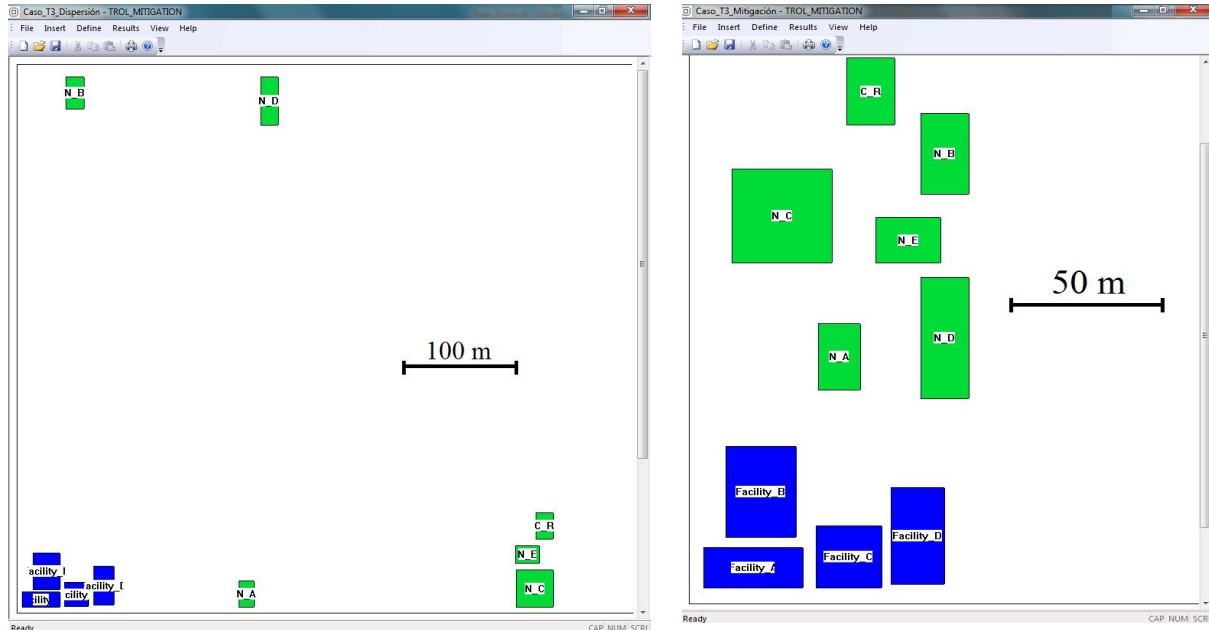
Los sistemas de mitigación para Facilidad\_A son una cortina de aire y una cortina de vapor. La cortina de aire maneja este gas a 6 bar, 280 K y 40% de humedad a través de orificios de ½ plg de diámetro y 35 cm de separación entre sí. La cortina de vapor es suministrada por vapor saturado a 5 bar que pasa a través de orificios de ¾ plg y la separación entre los orificios es de 40 cm entre sí. Los costos para estos sistemas son \$10,000 y \$14,000 respectivamente.

Los sistemas de mitigación para Nueva\_B son dos cortinas de agua. La primera cortina de agua tiene una temperatura de 298 K y un flujo de 30 gpm a través de boquillas con ¾ plg de orificio y 60 cm de separación entre sí. Las boquillas forman gotas con un tamaño promedio de 540 µm y están diseñadas para generar un ángulo de apertura de 120°. En la otra cortina se tiene temperatura de 298 K y un flujo de 37 gpm a través de boquillas con 1 plg de orificio y 70 cm de separación entre sí. Las boquillas forman gotas con un tamaño promedio de 300 µm y están diseñadas para generar un ángulo de apertura de 100°. Los costos para ambas son \$15,000.

Los sistemas de mitigación para Nueva\_D son tres cortinas de agua. La cortina 1 tiene una temperatura de 298 K y un flujo de 25 gpm a través de boquillas con ¾ plg de orificio y 45 cm de separación entre sí. Las boquillas forman gotas con un tamaño promedio de 300 µm y están diseñadas para generar un ángulo de apertura de 90°. La cortina 2 tiene una temperatura de 298 K y un flujo de 20 gpm a través de boquillas con ¾ plg de orificio y 60 cm de separación entre sí. Las boquillas forman gotas con un tamaño promedio de 600 µm y están diseñadas para generar un ángulo de apertura de 120°. La cortina 3 tiene una temperatura de 290 K y un flujo de 30 gpm a través de boquillas con ¾ plg de orificio y 30 cm de separación entre sí. Las boquillas forman gotas con un tamaño promedio de 430 µm y están diseñadas para generar un ángulo de apertura de 120°. Todas las cortinas tienen un costo de \$10,000.

Las soluciones obtenidas provienen de aplicar el resolver CONOPT para la programación no lineal y DICOPT para MINLP. Nuevamente, la aplicación de sistemas de mitigación muestra una reducción notoria en la distancia y el costo La Figura 5.6 muestra la diferencia al aplicar u omitir sistemas de

mitigación. La Tabla 5.9 resume los datos obtenidos en ambos casos. La Facilidad A seleccionó la cortina de vapor, la Nueva\_B la segunda cortina de agua, y la Nueva\_D, la primer cortina de agua.



a) Solución sin mitigación

a) Solución con mitigación

Figura 5.6 Comparación de la omisión y aplicación de mitigación para el Caso de Estudio 3.

Tabla 5.9 Resultados de aplicar y omitir los sistemas de mitigación en el Caso de Estudio 3.

Nombre	Sin mitigación		Con mitigación	
	X (m)	Y (m)	X (m)	Y (m)
Cuarto_Control	482.8	79.5	63.7	189.1
Nueva_A	210.2	17.5	52.7	91.2
Nueva_B	53.7	473.4	89.4	166.1
Nueva_C	473.8	22.5	32.7	143.1
Nueva_D	231.2	466	89.4	89.2
Nueva_E	467.1	53.5	76.7	134.2
Terreno (m <sup>2</sup> )	239,943		19,748	
Costo total (\$)	4,888,020		530,904	

## Capítulo 6. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

### 6.1. Conclusiones

Los modelos de mitigación presentados en este trabajo fueron desarrollados para los fluidos mitigantes más comunes y de fácil manejo; que son el aire, agua y el vapor de agua. Los dos primeros fluidos tienen un comportamiento semejante y no mostraron problemas en el planteamiento matemático. Sin embargo, la cortina de agua fue el modelo más complejo por la hidrodinámica presente en la formación de gotas. El planteamiento de este modelo fue limitado al conocimiento empírico sobre el fenómeno de esparcido, donde se desarrolló para un solo tamaño de gota, y la transferencia de masa y calor se basaron en correlaciones experimentales. En general, los modelos no mostraron un comportamiento matemático complicado; es decir, la obtención de las soluciones no requirió métodos numéricos avanzados ni alto tiempo de cómputo.

Los resultados obtenidos por estos modelos de mitigación fueron los cambios en las propiedades de la nube en dispersión como el incremento de la altura, la reducción de la velocidad, el cambio de la temperatura y el decremento en la concentración. Este comportamiento concordó con lo observado experimentalmente en diferentes trabajos. En cierta forma, esto indicó que los modelos de mitigación propuestos representan aceptablemente el fenómeno de mitigación. Por otra parte, los resultados numéricos mostraron que el exceso de flujo genera un decremento alto de la concentración, una altura extrema de la nube y posteriormente una dispersión pasiva, la cual no pudo ser modelada con modelos de gases densos. Adicionalmente, el análisis de sensibilidad mostró que, para los tres sistemas de mitigación propuestos, el diámetro del orificio es la variable que mostró mayor afectación sobre los resultados numéricos.

La corroboración de los resultados fue posible con el uso de simulaciones tipo *CFD*. En esta

herramienta, los resultados obtenidos por mitigación tienen la tendencia similar a lo obtenido por los modelos propuestos. Sin embargo, los valores numéricos difieren a los obtenidos por el modelo de mitigación y la causa podría ser el modelo de dispersión. Además, la tendencia que muestra la temperatura, concentración y velocidad son similares a las obtenidas con el modelo de mitigación. Sin embargo, el *CFD* mostró la terminación de la nube en el momento de la mitigación y no de forma continua como lo planteó el modelo de mitigación.

La aplicación de modelos de mitigación no es común en la industria química, inclusive su empleo durante la distribución de facilidades parece ser que no ha sido planteado en la literatura abierta. Los modelos de mitigación de este trabajo fueron usados en la distribución de facilidades. Esto permitió que la disminución súbita de la concentración redujera notoriamente el riesgo y, por consecuencia, el área ocupada por la distribución de las facilidades. Además, el planteamiento matemático permitió la selección del sistema de mitigación óptimo. El resultado es un problema mixto entero no lineal en la existencia de múltiples sistemas de mitigación, en cuyo caso los costos de mitigación son tomados en cuenta. Sin embargo, la solución de problemas fue más difícil de obtener conforme se aumentó el número de facilidades por instalar, emisiones y sistemas de mitigación y los valores iniciales son la parte crítica de la solución.

La solución en conjunto de la distribución de facilidades industriales y la mitigación de gases tóxicos requirió cálculos continuos en la mitigación. Esto, aunado a la potencial aplicación de los modelos en pruebas de diseño, tomas de decisiones y elaboración de análisis de riesgo, mostró la necesidad del desarrollo de un software. Así, el programa TROL fue desarrollado con la capacidad de realizar el cálculo de los sistemas de mitigación y la resolución del modelo de optimización de forma simultánea. El programa es una herramienta capaz de incluir modelos de mayor exactitud o extenderse a cálculo de fuego y explosiones sobre las facilidades.

La aplicación de los sistemas de mitigación en la distribución de facilidades industriales con emisión de gases tóxicos reduce notoriamente el costo total y el riesgo. Así, este trabajo puede ser una herramienta importante para la toma de decisiones sobre el diseño de plantas en el momento que se realice la distribución de las facilidades o se aplique una técnica de análisis de riesgo.

## 6.2. Trabajo futuro

El problema de solucionar un modelo de dispersión conjuntamente con la optimización de facilidades industriales es el primer tópico a resolver. En cada iteración de la optimización se plantea una posible posición de las facilidades las cuales serán un obstáculo físico a la dispersión. Así, el modelo de dispersión debe incluir el efecto de los obstáculos y calcular sus parámetros espacialmente en cada iteración. Un acercamiento a esta solución es la aplicación de diferencias finitas al modelo *SLAB* cuyas ecuaciones sean resueltas simultáneamente al problema de optimización. Sin embargo, este planteamiento podría tener problemas numéricos durante la optimización.

Los resultados obtenidos del modelo de mitigación son suficientes para describir el comportamiento físico de la nube en mitigación, pero el modelo muestra una serie de suposiciones que contrarrestan una estricta aceptación en el campo de fenómenos de transporte. Así, la aplicación de métodos matemáticos en esa área podría mejorar esta observación. Un método de aceptable aplicación es el promedio volumétrico que al ser aplicado reduciría las suposiciones aplicadas al modelo. De esta manera este método puede generar un modelo donde las variables son las promedio de la mitigación. Inclusive, este método podría ser aplicado a modelos de mitigación complejos como el trabajo de Fthenakis *et. al* (1990) el cual incluye la distribución del tamaño de las gotas de agua.

Los resultados de las distribuciones de estos casos de estudio podrían ser analizados usando un *CFD*. Es decir, sobre los resultados se podría aplicar un *CFD* para comparar el efecto de la dispersión. Para este caso, podría usarse nuevamente el *CFX* de *ANSYS* o probar con *FLACS* de *GexCon*.

La existencia de algunas facilidades industriales de forma circular, como esferas que contienen cloro, requiere el desarrollo de un modelo de distribución que incluya esta geometría. Por tal motivo, un modelo geométrico híbrido puede ser desarrollado para este fin y su solución podría mejorar la aplicación de sistemas de mitigación.

La distribución de facilidades con aplicación de sistemas de mitigación no asegura la obtención de un óptimo local durante la optimización. Las partes no lineales de la distancia de separación y el cálculo



lo del área hacen al problema no convexo. Así, la aplicación de técnicas de convexificación de funciones podría ayudar a obtener un problema convexo y obtener un óptimo global de la solución de distribución.

La emisión de gases podría incluir una forma realista de las condiciones atmosféricas cuando estas sean representadas de manera estocástica e influyan sobre los sistemas de mitigación y el área circunvecina de la planta. Esto es dado a que expertos en el área de riesgo de procesos industriales muestran mayor confianza a problemas estocásticos cuando existe personal en los alrededores de las plantas. Este desarrollo sería valorado en países donde el terreno es muy limitado y el modelo determinista no podría ser aplicado por sus altos valores de separación entre facilidades. Aunque el costo de lo anterior sería un modelo matemáticamente complicado.

## Referencias

- Alif, A. y Badiru, A. B. (1996). "FLEXPERT: facility layout expert system using fuzzy linguistic relationships codes." IIE Transactions: **28** (4), 295-308.
- Armour, G. C. y Buffa, E. (1963). "A heuristic algorithm and simulation approach to relative location of facilities." Management Science: **9** 294-309.
- Bara, A. y Dusserre, G. (1997). "The use of water curtains to protect firemen incase of heavy gas dispersion." Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **10** (3), 179-183.
- Barbosa-Póvoa, A. P., Mateus, R. y Novais, A. Q. (2001). "Optimal two-dimensional layout of industrial facilities." International Journal of Production Research: **39** (12), 2567-2593.
- Barbosa-Póvoa, A. P., Mateus, R. y Novais, A. Q. (2002). "Optimal 3D layout of industrial facilities." International Journal of Production Research: **40** (7), 1669-1698.
- Bathe, K.-J. y Zhang, H. (2009). "A mesh adaptivity procedure for CFD and fluid-structure interactions." Computers and Structures: **87** 604-617.
- Benjamin, T. B. (1968). "Gravity currents and related phenomena." Journal of Fluid Mechanics: **31** (2), 209-248.
- BETE Fog Nozzle, I. (2007). Nozzles for industry, pollution control and fire protection. Engineered spraying solutions: 116.
- Bird, R. B., Stewart, W. E. y Lightfoot, E. N. (1998). Transport Phenomena, John Wiley and Sons.
- Blocken, B., Carmeliet, J. y Stathopoulos, T. (2007). "CFD evaluation of wind speed conditions in passages between parallel buildings—effect of wall-function roughness modifications for the atmospheric boundary layer flow." Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics: **95** (9-11), 941-962.
- Bowonder, B. (1987). "The Bhopal accident." Technological Forecasting and Social Change: **32** (2), 169-182.
- Brighton, P. W. M. y Prince, A. J. (1987). "Overall properties of the heavy gas clouds in the Thorney Island phase II trials." Journal of Hazardous Materials: **16** 103-138.
- CCPS (1989a). Guidelines for chemical process quantitative risk analysis, Center for chemical process safety of the AIChE, New York, New York.
- CCPS (1989b). Guidelines for process equipment reliability data with data tables, Center for chemical process safety of the AIChE, New York, New York.
- CCPS (1992). Guidelines for hazard evaluation procedures, Center for chemical process safety of the AIChE, New York, New York.
- CCPS (1996). Guidelines for evaluating process plant building for external explosions and fires, Center for chemical process safety of the AIChE, New York, New York.

- CCPS (1997). Postrelease mitigation technology in the chemical process industry, Center for chemical process safety of the AIChE, New York, New York.
- CCPS (2000). Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis, Center for chemical process safety of the AIChE, New York, New York.
- CCPS (2003). Guidelines for facility siting and layout, Center for chemical process safety of the AIChE, New York, New York.
- Churakov, S. V. y Gottschalk, M. (2003). "Perturbation theory based equation of state for polar molecular fluids: I. Pure Fluids." Geochimica et Cosmochimica Acta: **67** (13), 2397-2414.
- Colenbrander, G. W. (1980). "A mathematical model for the transient behaviour of dense vapour clouds." Loss Prevention and Safety Promotion: **3** 1104.
- Cox, R. A. y Roe, D. R. (1977). A model of the dispersion of dense vapour clouds. 2nd Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion, Heidelberg, Alemania.
- CPR (2005). Guidelines for quantitative risk assessment "Purple book", CPR 18E, Publication Series on Dangerous Substances (PGS 3), Hague, Netherlands: The State Secretary of Housing Spatial Planning and the Environment (VROM).
- CPR (2009). Methods for determination of possible damage "Green book", CPR 16E, Publication Series on Dangerous Substances (PGS 3), Hague, Netherlands: The State Secretary of Housing Spatial Planning and the Environment (VROM).
- Crowl, D. A. y Louvar, J. F. (2002). Chemical process safety, fundamentals with applications. New Jersey, Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences.
- Cuadros, F., Cachadiña, I. y Ahumada, W. (1996). "Determination of Lennard-Jones interaction parameters using a new procedure." Molecular engineering: **5** 319-325.
- Dandrieux-Bony, A., Dimbour, J.-P. y Dusserre, G. (2005). "A simple model for calculating chlorine concentrations behind a water spray in case of small releases." Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **18** (4-6), 245-253.
- Deaves, D. M. y Lines, I. G. (1998). "The nature and frequency of low wind speed conditions." Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics: **73** (1), 1-29.
- Díaz-Ovalle, C., Vázquez-Román, R. y Mannan, M. S. (2010). "An Approach to Solve the Facility Layout Problem Based on the Worst-Case Scenario." Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **23** (3), 385-392.
- Díaz-Ovalle, C. O., Vázquez-Román, R. y Mannan, S. (2009). "Determinación de los factores del peor escenario en la emisión de gases tóxicos." Información Tecnológica: **20** 1-9.
- DiMaio, L. R. y Norman, E. C. (1988). "Performance of aqueous hazmat foams on selected hazardous materials." Plant Operations Progress: **7** (3), 195-198.

- Dimbour, J. P., Dandrieux, A., Gilbert, D. y Dusserre, G. (2003a). "The use of water sprays for mitigating chlorine gaseous releases escaping from a storage shed." Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **16** (4), 259-269.
- Dimbour, J. P., Gilbert, D., Dandrieux, A. y Dusserre, G. (2003b). "Assessment of the effectiveness of downward water sprays for mitigating gaseous chlorine releases in partially confined spaces.", Journal of Hazardous Materials: **96** (2-3), 127-141.
- Dreux, M. S. (2005). "Defending OSHA facility siting citations: Issues and recommendations." Process Safety Progress: **24** (2), 77-78.
- Drezner, Z. y Wesotowsky, G. O. (1985). "Layout of facilities with some fixed points." Computers & Operations Research: **12** (6), 603-610.
- Drira, A., Pierreval, H. y Hajri-Gabouj, S. (2007). "Facility Layout Problems: A Survey." Annual Reviews in Control: **31** (2), 255-267.
- EAC (2003). Encyclopedia of atmospheric Sciences. J. Holton, J. Pyle, J. Curry, Elsevier Science Ltd.
- Ermak, D. L., Chan, S. T., Morgan, D. L. y Morris, L. K. (1982). "A comparison of dense gas dispersion model simulations with burro series LNG spill test results." Journal of Hazardous Materials: **6** (1-2), 129-160.
- Faveri, D. M. D., Pastorino, R., Fumarola, G. y Ferraiolo, G. (1984). "Mixing of gas clouds by water barriers.", Journal of Occupational Accidents: **5** (4), 257-263.
- Finney, D. J., Holt, L. B. y Sheffield, F. (1975). "Repeated estimations of an immunological response curve." Journal of Biological Standardization: **3** (1), 1-9.
- Foulds, L. R. (1983). "Techniques for facilities layout: Deciding which pairs of activities should be adjacent." Management Science: **29** (12), 1414-1426.
- Francis, R. L. y White, J. A. (1974). Facility Layout and location an analytical approach. Englewood Cliffs, NJ, Prentice-Hall.
- Frost, R. (1947). "Atmospheric Turbulence." Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society: **74** (321-322), 316-338.
- Fthenakis, V. M. (1993). "HGSPRAY: A complete model of spraying unconfined gaseous releases.", Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **6** (5), 327-331.
- Fthenakis, V. M. y Zakkay, V. (1990). "A theoretical study of absorption of toxic gases by spraying." Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **3** (2), 197-206.
- Fuchino, T., Itoh, T. y Muraki, M. (1996). "Arrangement of process equipment modules with consideration of plant safety." Journal of Chemical Engineering of Japan: **39** 896.
- Galbraith, L. y Miller, W. (1990). "A multifactor approach to selecting computer generated electronics assembly facility layouts." Computers Industrial Engineering: **18** (1), 1-11.
- Georgiadis, M. C. y Macchietto, S. (1997). "Layout of process plants: A novel approach." Computers & Chemical Engineering: **21** (S1), S337-S342.

- Georgiadis, M. C., Schilling, G., Rotstein, G. E. y Macchietto, S. (1999). "A general mathematical programming approach for process plant layout." Computers & Chemical Engineering: **23** (7), 823-840.
- Gerald, C. F. y Wheatley, P. O. (1992). Applied numerical analysis, Addison-wesley Publishing Company.
- Germeles, A. E. y Drake, E. M. (1975). Gravity spreading and atmospheric dispersion of LNG vapor clouds. Fourth International Symposium on Transport of Hazardous Cargoes by Sea and Inland Waterways, Jacksonville, Florida.
- Gifford, F. A. (1961). "Use of routine meteorological observations for estimating atmospheric dispersion." Nucl. Safety: **2** (4), 47.
- Goetschalckx, M. y Irohara, T. (2007) "Efficient Formulations for the Multi-Floor Facility Layout Problem with Elevators." Optimization Online, DOI:
- Green, R. H. y Al-Hakim, L. (1985). "A Heuristic for Facilities Layout Planning." International Journal of Management Science: **13** 469-474.
- Griffiths, R. F. (1994). "Errors in the use of the Briggs parameterization for atmospheric dispersion coefficients." Atmospheric Environment: **28** (17), 2861-2865.
- Gunn, D. J. y Al-Asadi, H. D. (1987). "Computer-aided layout of chemical plant: a computational method and case study." Computer-Aided Design: **19** (3), 131-140.
- Hanna, S. R., Hansen, O. R., Ichard, M. y Strimaitis, D. (2009). "CFD model simulation of dispersion from chlorine railcar releases in industrial and urban areas.", Atmospheric Environment: **43** (2), 262-270.
- Havens, J. A. (1982). "A description and computational assessment of the SIGMET LNG vapor dispersion model." Journal of Hazardous Materials: **6** (1-2), 181-195.
- Henly, E. J. y Seader, J. D. (1999). Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering, John Wiley & Sons.
- Heragu, S. S. (1992). "Recent models and techniques for solving the layout problem." European Journal of Operational Research: **57** 136-144.
- Heragu, S. S. y Kusiak, A. (1991). "Efficient models for the facility layout problem." European Journal of Operational Research: **53** (1), 1-13.
- Heskestad, G., Kung, H.-C. y Todtenkopf, N. F. (1981). Air entrainment into water sprays. Factory Mutual System. F. M. Research. Norwood, Massachusetts, Factory Mutual Research Corporation.
- Hiltz, R. M. (1982). "Mitigation of the vapor hazard from silicon tetrachloride using water-based foams.", Journal of Hazardous Materials: **5** (3), 169-175.
- Hirsch, C. (2007). Numerical Simulation of Inviscid Flows. Numerical Computation of Internal and External Flows (Second Edition). Oxford, Butterworth-Heinemann: 545-597.
- Jagger, S. F. (1983). Formulations of the dense gas dispersion problem.

- Jayakumar, S. y Reklaitis, G. V. (1994). "Chemical plant layout via graph partitioning-I. Single level,." Computers & Chemical Engineering: **18** (5), 441-458.
- Jayakumar, S. y Reklaitis, G. V. (1996). "Chemical plant layout via graph partitioning-II. Multiple levels." Computers & Chemical Engineering: **20** (5), 563-578.
- Jonsson, L., Karlsson, E. y Thaning, L. (2005). "Toxic gas clouds: Effects and implications of dry deposition on concentration." Journal of Hazardous Materials: **124** (1-3), 1-18.
- Jung, S., Ng, D., Laird, C. D. y Mannan, M. S. (2010a). "A new approach for facility siting using mapping risks on a plant grid area and optimization." Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **23** (6), 824-830.
- Jung, S., Ng, D., Lee, J.-H., Vázquez-Román, R. y Mannan, M. S. (2010b). "An approach for risk reduction (methodology) based on optimizing the facility layout and siting in toxic gas release scenarios." Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **23** (1), 139-148.
- Kaiser, G. D. y Walker, B. C. (1978). "Releases of anhydrous ammonia from pressurized containers \_the importance of denser-than-air mixtures." Atmos. Environment: **12** (12), 2289-2300.
- Ketcham, R. L., Malstrom, E. M. y McRoberts, K. L. (1989). "A comparison of three computer assisted facilities design algorithms." Computers Industrial Engineering: **16** (3), 375-386.
- Kletz, T. (2009). What went wrong?: case histories of process plant disasters and how they could have been avoided. Oxford, UK, Butterworth-Heinemann/ICHEME.
- Kochhar, J. S., Foster, B. T. y Heragu, S. S. (1998). "Hope: A genetic algorithm for the unequal area facility layout problem." Computers & Operations Research: **25** (7-8), 583-594.
- Lee, R. C. y Moore, J. M. (1967). "CORELAP-Computerized Relationship Layout Planning." Journal of Industrial Engineering: **18** (3), 195-200.
- Lines, I. G., Deaves, D. M. y Atkins, W. S. (1997). "Practical modeling of gas dispersion in low wind speed conditions, for application in risk assessment." Journal of Hazardous Materials: **54** (3), 201-226.
- Mannan, S., Ed. (2005). Lee's Loss Prevention in the Process Industries, Elsevier Butterworth-Heinemann Publications.
- Markiewicz, M. (2006). Modelling of air pollution dispersion. **2511**.
- Martins, V. C., Cândido, m. A. B. y Coelho, L. d. S. (2006). "Solving facility layout problem with a set of geometric Hard-constraints using tabu search." Advances in Soft Computing: **34** 251-256.
- Martinsen, W. E. (1992). "Notes on a few vapor suppression techniques.", Plant Operations Progress: **11** (1), 23-26.
- Marx, J. D. y Cornwell, J. B. (2008). The importance of weather variations in a quantitative risk analysis. Making Safety Second Nature & WCOGI, College Station, Tx.
- McQuaid, J. (1985). "Objectives and design of the phase I heavy gas dispersion trials." Journal of Hazardous Materials: **11** 1-33.

- McQuaid, J. (1987). "Design of the thorney island continuous release trials." Journal of Hazardous Materials: **16** 1-8.
- McQuaid, J. y Fitzpatrick, R. D. (1981). The uses and limitations of water-spray barriers. The containment and dispersion of gases by water sprays. D. V. Greenwood. North Western Branch, Institution of Chemical Engineers.
- McQuaid, J. y Fitzpatrick, R. D. (1983). "Air entrainment by water sprays: Strategies for application to the dispersion of gas plumes." Journal of Occupational Accidents: **5** (2), 121-133.
- McRae, G. J., Goodin, W. R. y Seinfeld, J. H. (1982). "Development of a second-generation mathematical model for urban air pollution- I. Model formulation." Atmospheric Environment: **16** (4), 679-696.
- Mecklenburgh, J. C. (1985). Process Plant Layout. New York.
- Meroney, R. N. (1993). "Bluff-body aerodynamics influence on transport and diffusion of hazardous gases: shelterbelts and vapor barrier fences." Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics: **49** (1-3), 141-156.
- Meroney, R. N. y Neff, D. E. (1985). "Numerical modelling of water spray barriers for dispersing dense gases." Boundary Layer Meteorology: **31** 233-247.
- Modarres, M. (2006). Risk Analysis in Engineering. Techniques, Tools and trends, Taylor and Francis Group-U.S.
- Molag, M., Schoten, H. y Powell-Price, M. (2001). "Effective applications of fluid curtains to mitigate incidental gas releases." Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries: 1051-1058.
- Moodie, K. (1985). "The use of water spray barriers to disperse spills of heavy gases." Plant Operations Progress: **4** (4), 234-241.
- Moore, P. A. C. y Rees, W. D. (1981). Forced dispersion of gases by water and steam. The containment and dispersion of gases by water sprays. D. V. Greenwood. North Western Branch, Institution of Chemical Engineers.
- Morawska, N. S. H. a. L. (2006). " A review of dispersion modelling and its application to the dispersion of particles: An overview of different dispersion models available." Atmospheric Environment: **40** (30), 5902-5928.
- Morgan, D. L., Morris, L. K. y Ermak, D. L. (1983). SLAB: A time-dependent computer model for the disperison of heavy gases released in the atmosphere. Livermore, California, lawrence Livermore Laboratory: 15.
- Naamansen, P., Baraldi, D., Hjertager, B. H., Solberg, T. y Cant, S. (2002). "Solution adaptive CFD simulation of premixed flame propagation over various solid obstructions." Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **15** 189-197.
- Nikuradse, J. (1930). "Untersuchungen über turbulente Strömungen in nicht kreisförmigen Röhren." Archive of Applied Mechanics **1**(3), 306-332.

- Ooms, G. y Tennekes, H. (1984). Atmospheric dispersion of Heavy gases and small particles. Berlín.
- Palazzi, E., Currò, F. y Fabiano, B. (2007). "n-Compartment mathematical model for transient evaluation of fluid curtains in mitigating chlorine releases." Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **20** (2), 135-143.
- Papageorgiou, L. G. y Rotstein, G. E. (1998). "Continous-domain mathematical models for optimal process plant layout." Industrial and Engineering Chemistry Research: **37** (9), 3631-3639.
- Pasquill, F. (1961). "The estimation of the dispersion of windborne materials." Met. Mag.: **90** (1063), 33.
- Patsiatzis, D. I., Knight, G. y Papageorgiou, L. G. (2004). "An MILP approach to safe process plant layout." Trans IChemE Part A: Chemical Engineering and Design: **82** (A5), 579-586.
- Patsiatzis, D. I. y Papageorgiou, L. G. (2002). "Optimal multi-floor process plant layout." Computers & Chemical Engineering: **26** (4-5), 575-583.
- Penteado, F. D. y Ciric, A. R. (1996). "An MINLP approach for safe process plant layout." Industrial and Engineering Chemistry Research: **35** (4), 1354-1361.
- Pietersen, C. M. y van het Veld, B. F. P. (1992). "Risk assessment and risk contour mapping." Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **5** (1), 60-63.
- Puls, E., Engelhardt, F. y Hartwig, S. (2001). "Investigation on the mitigation during accidental release of heavy gas by technical devices." Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries: 1149-1152.
- Puttock, J. S. (1987). "Analysis of meteorological data for the Thorney Island Phase I trials." Journal of Hazardous Materials: **16** 43-74.
- Puttock, J. S. y Colenbrander, G. W. (1985). "Thorney island data and dispersion modelling." Journal of Hazardous Materials: **11** 381-397.
- Rana, M. A., Cormier, B. R., Suardin, J. A., Zhang, Y. y Mannan, M. S. (2008). "Experimental Study of effective Water Spray Curtain Application in Dispersing Liquefied natural Gas Vapor Clouds." Process Safety Progress: **27** (4), 345-353.
- Ratcliff, M. A., Petersen, R. L., Schatz, K. W. y Heskestad, G. (1993). "Physical modeling of water sprays - comparison against field operations.", Process Safety Progress: **12** (3), 143-146.
- Rege, M. A. y Tock, R. W. (1996). "Estimation of point-source of hydrogen sulfide and ammonia using a modified Pasquill-Gifford approach." Atmospheric Environment: **30** (18), 3181-3195.
- Richardson, L. F. (1925). "Turbulence and vertical temperature difference near trees." Philosophic Magazine: **49** 81.
- Richardson, L. F. (1926). "Atmospheric diffusion sown on a distance-neighbour graph." Proceedings of the Royal Society of London. Series A.: **110** (756), 709-737.
- Rizzi, A. y Engquist, B. (1987). "Selected topics in the theory and practice of computational fluid dynamics." Journal of Computational Physics: **72** (1), 1-69.



- Roberts, O. F. T. (1923). "The theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere." Proc. R. Soc.: **104** 640.
- Saltelli, A., Chan, K. y Scott, E. M. (2008). Sensitivity analysis, John Wiley & Sons.
- Sander, R. (1999). Compilation of Henry's Law Constants for Inorganic and Organic Species of Potential Importance in Environmental Chemistry.
- Scargiali, F., Rienzo, E. D., Ciofalo, M., Grisafi, F. y Brucato, A. (2005). "Heavy gas dispersion modelling over a topographically complex mesoscale a CFD based approach." Process Safety and Environment Protection: **83** 242-256.
- Schatz, K. W. y Fthenakis, V. M. (1994). "Mitigation of hydrogen fluoride aerosols by dry powders.", Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **7** (6), 451-456.
- Schatz, K. W. y Koopman, R. P. (1990). "Water spray mitigation of hydrofluoric acid releases.", Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **3** (2), 222-233.
- Scheffler, N. E., Green, L. S. y Frurip, D. J. (1993). "Vapor suppression of chemicals using foams.", Process Safety Progress: **12** (3), 151-157.
- Schick, R. J. (2006). Spray technology Reference Guide: Understanding drop size. Wheaton, IL, Spray Analysis and Research Services, Spraying Systems Co.
- Schmidt-Traub, H., Holtkötter, T., Lederhose, M. y Leuders, P. (1999). "An approach to plant layout optimization." Chemical Engineering & Technology: **22** (2), 105-109.
- Sheehof, J. M. y Evans, W. O. (1967). "automated Layout Design Program." The Journal of Industrial Engineering: **18** (12), 690-695.
- Sheppard, P. A. (1947). "The aerodynamic drag of the earth's surface and the value of Kármán's constant in the lower atmosphere." Proceedings of the Royal Society of London. Series A.: **188** (1013), 208-222.
- Sklavounos, S. y Rigas, F. (2004). "Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles.", Journal of Hazardous Materials: **108** (1-2), 9-20.
- Spicer, T. O., Havens, J. A., Tebean, P. A. y Key, L. E. (1986). DEGADIS: a heavier-than-air gas atmospheric dispersion model developed for the US Coast Guard. Proc. Ann. Conf., Am. Poll. Control Ass.
- St-Georges, M. y Buchlin, J.-M. (1995). Heat transfer in liquid curtains mitigating pollutant releases. Loss Prevention and safety promotion in the process industries, Antwerp, Belgium.
- Steidle, T. C., Meroney, R. N., Neff, D. E., Shin, S. H., Tan, T. Z. y Wu, G. (1990). "Analysis of vapor barrier experiments to evaluate their effectiveness as a means to mitigate HF cloud concentrations.", Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics: **36** (1-3), 633-641.
- Sullivan, D. A., Holdsworth, M. T. y Hlinka, D. J. (2004). "Monte Carlo-based dispersion modeling of off-gassing releases from the fumigant metam-sodium for determining distances to exposure endpoints." Atmospheric Environment: **38** (16), 2471-2481.

- Sutton, O. G. (1949). "The application to micrometeorology of the theory of turbulent flow over rough surfaces." Quarterly journal of the Royal meteorological society: **75** (326), 335-350.
- Sutton, O. G. (1953). Micrometeorology. New York, McGraw-Hill.
- Tauseef, S. M., Rashtchian, D. y Abbasi, S. A. (2011). "CFD-based simulation of dense gas dispersion in presence of obstacles." Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **24** (4), 371-376.
- Tauseef, S. M., Rashtchian, D., Abbasi, T. y Abbasi, S. A. "A method for simulation of vapour cloud explosions based on computational fluid dynamics (CFD)." Journal of Loss Prevention in the Process Industries: **In Press, Corrected Proof**
- Taylor, J. R. (2005). Hazardous Materials Release and Accident Frequencies for Process Plant, Taylor Associates ApS. **I**: 4.5-4.10.
- te Riele, P. H. M. (1977). "The atmospheric dispersion of heavy gases emitted at or near ground level.", Loss Prevention and Safety Promotion: **2** 347.
- Tong, P. y Rossettos, J. N. (1977). Finite element method. Basic technique and implementation, Dover Publications, Inc.
- Tu, J., Yeoh, G. H. y Liu, C. (2008). Introduction. Computational Fluid Dynamics. Burlington, Butterworth-Heinemann: 1-28.
- Ulke, A. G. (2000). "New turbulent parameterization for a dispersion model in the atmospheric boundary layer." Atmospheric Environment: **34** (7), 1029-1042.
- Uznanski, D. T. y Buchlin, J.-M. (1998). Mitigation of industrial hazards by water spray curtains. The international emergency management society conference. T. G. W. University. Washington, D. C.
- van Ulden, A. P. (1974). "On the spreading of a heavy gas released near the ground." Loss Prevention and Safety Promotion: **1** 221.
- van Ulden, A. P. (1978). "Simple estimates for vertical diffusion from sources near the ground." Atmospheric Environment (1967): **12** (11), 2125-2129.
- Vázquez-Román, R., Lee, J.-H., Jung, S. y Mannan, M. S. (2008). Designing plant layouts with toxic releases based on wind statistics. IASTED International Conference on Modelling and Simulation, paper 620-018, May 26-28, Quebec, Canada.
- Vázquez-Román, R., Lee, J.-H., Jung, S. y Mannan, M. S. (2010). "Optimal facility layout under toxic release in existing plants." Computers & Chemical Engineering: **34** 122-133.
- Westerlund, J., Papageorgiou, L. G. y Westerlund, T. (2007). "A MILP Model for N-dimensional allocation." Computers & Chemical Engineering: **31** (2), 1702-1714.
- Witlox, H. W. M. (1994a). "The HEGADAS model for ground-level heavy-gas dispersion-I. Steady-state model." Atmospheric Environment: **28** (18), 2917-2932.
- Witlox, H. W. M. (1994b). "The HEGADAS model for ground-level heavy-gas dispersion II. Time-dependent model." Atmospheric Environment: **28** (18), 2933-2946.

- Woodburn, P. J. y Britter, R. E. (1996). "CFD Simulations of a tunnel fire-Part I." Fire Safety Journal: **26** 35-62.
- Woodward, J. L. (1998). "Improving the effect of atmospheric stability class for dispersion modeling." Process Safety Progress: **17** (1), 1-8.
- Yang, T. y Benjaafar, S. (2001). FLQ: A software for Facility Layout with Queueing. Minneapolis, MN, Division of Industrial Engineering, Department of Mechanical Engineering.
- Yaws, C. (1978). Matheson Gas Data Book.
- Yegnan, A., Williamson, D. G. y Graettinger, A. J. (2002). "Uncertainty analysis in air dispersion modeling." Environmental Modelling & Software: **17** (7), 639-649.
- Zeman, O. (1982). "The dynamics and modeling of heavier-than-air cold gas releases." Atmos. Environment: **16** (4), 741-751.
- Zonato, C., Pagella, C. y Faveri, D. M. D. (1993). "Practical application of water barriers for the mitigation of atmospheric releases.", Safety Science: **16** (3-4), 501-509.