

UNA REVISIÓN SOBRE EL PAPEL DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL EN EL ANÁLISIS DE LA DISPERSIÓN DE GASES TÓXICOS EN PLANTAS QUÍMICAS

A REVIEW ON THE ROLE OF COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS ON THE ANALYSIS OF THE DISPERSION OF TOXIC GASES IN CHEMICAL PLANTS

Efraín Quiroz Pérez*
Julio Armando de Lira Flores

Universidad Autónoma de Querétaro,
Santiago de Querétaro, México

*efrain.quiroz@uaq.mx

Resumen

La seguridad de procesos desempeña un papel crucial en el diseño y la operación de las plantas químicas. Actualmente, los escenarios que suponen un riesgo en los procesos químicos se deben comprender desde el punto de vista de los fenómenos de transporte de los fluidos involucrados; en específico, la dispersión de gases tóxicos, que ponen en riesgo la salud de los trabajadores. En este sentido, el avance tecnológico y el incremento exponencial de la capacidad de cómputo en las últimas décadas han favorecido las técnicas de dinámica de fluidos computacional (CFD en inglés) por encima de los modelos convencionales de dispersión. Este trabajo describe los fundamentos de las técnicas de CFD complementados con una revisión de estudios sobre esta herramienta computacional en el modelado y la simulación de dispersión de gases tóxicos en plantas químicas. Además, se incluye un caso de estudio demostrativo y una discusión sobre las perspectivas de este enfoque: su estado actual, ventajas, limitaciones y áreas de oportunidad. Estos puntos permiten enfatizar el papel y la importancia de las técnicas de CFD en los análisis de riesgo llevados a cabo en las plantas químicas, especialmente aquellas donde puede ocurrir la fuga y dispersión de gases tóxicos.

Palabras clave: CFD, dispersión, gases tóxicos, plantas químicas, seguridad de procesos, simulación.



Abstract

Process safety plays a crucial role in the proper design and operation of chemical plants. Currently, the scenarios that pose a risk in chemical processes must be understood from the point of view of the transport phenomena of the fluids involved; specifically, the dispersion of toxic gases, which endanger the health of workers. In this sense, technological advances and the exponential increase in computing power in the last decades have favored computational fluid dynamics (CFD) techniques over conventional dispersion models. This paper describes the fundamentals of CFD techniques complemented with a review of studies on this computational tool in the modeling and simulation of toxic gas dispersion in chemical plants. In addition, a demonstrative case study and a discussion on the perspectives of this approach are included: its current status, advantages, limitations and areas of opportunity. These points allow emphasizing the role and importance of CFD techniques in the risk analysis carried out in chemical plants, especially those where leakage and dispersion of toxic gases can occur.

Keywords: CFD, dispersion, toxic gases, chemical plants, process safety, simulation.





Introducción

Debido a la creciente complejidad involucrada en las tecnologías de producción actuales y emergentes, la seguridad de procesos continúa jugando un papel crucial en el diseño y la operación de las plantas de procesamiento. A pesar del progreso logrado para que las industrias químicas se consideren entre los lugares de trabajo más seguros, prevalece una inmanente necesidad de comprender a cabalidad los mecanismos de los fenómenos incidentes en la seguridad; el objetivo es generar predicciones más confiables de los escenarios que pueden existir bajo distintas condiciones [1], [2].

A nivel mundial, en las plantas químicas se manejan diversos tipos de gases con diferentes propiedades físicas y químicas, muchos de los cuales se consideran dañinos tanto para la salud como para el medio ambiente. En consecuencia, existe un riesgo principalmente porque se producen y transportan a gran escala, están fácilmente disponibles y poseen una toxicidad aguda [3].

Por ejemplo, el cloro (Cl_2) es un gas común en la producción de plásticos, solventes, productos de papel y agua potable [4]; es altamente reactivo y cuando se inhala en bajas concentraciones (3-15 ppm) se puede presentar irritación ocular y de las membranas mucosas, así como lesiones de las vías respiratorias. Las consecuencias agudas asociadas a la exposición a mayores concentraciones de cloro incluyen obstrucción de las vías respiratorias, disnea, tos, cianosis, náuseas, vómito y pérdida del conocimiento [3]-[6].

Por otro lado, la exposición prolongada a bajas concentraciones (50-700 ppm) de amoníaco gaseoso (NH_3 , común en aplicaciones farmacéuticas, textiles y de refrigeración industrial [7]) se asocia a padecimientos como la sinusitis, el síndrome de inflamación de membranas mucosas, la bronquitis crónica y síntomas similares al asma [8], [9]. En el peor de los casos, la exposición a grandes volúmenes de amoníaco provoca irritación en el tracto respiratorio, piel y ojos, e inclusive puede causar la muerte debido al daño pulmonar [3], [8], [10], [11].

El fluoruro de hidrógeno (HF) se aprovecha como catalizador en las industrias del petróleo y gas; en la industria química, como agente reactivo en la síntesis de fluoropolímeros y fluorocarbonos. La exposición a una concentración promedio de 3 ppm causa irritación ocular y de las vías respiratorias superiores, mientras que 5 ppm pueden producir eritemas [12], [13]. Concentraciones más altas causan perjuicios serios a la salud huma-



na, incluyendo el daño a las vías respiratorias, edema pulmonar, hipocalcemia, quemaduras cutáneas, e inclusive una incidencia creciente de diversos tipos de cáncer [14], [15].

Históricamente, la industria química ha mantenido su enfoque en reducir el riesgo de daño debido a accidentes, tanto al personal como al ambiente. En este sentido, la higiene industrial es una disciplina dedicada a la identificación, evaluación y control de aquellas condiciones que pueden causar heridas y enfermedades. Involucra el monitoreo de la concentración de gases tóxicos y su reducción mediante sistemas eficientes de ventilación y el desarrollo de procedimientos para el manejo de materiales y sustancias peligrosas [1], [16], [17].

Respecto al monitoreo de los niveles de gases tóxicos, la higiene industrial se apoya en leyes y regulaciones gubernamentales para la evaluación de riesgos a la salud humana. En los Estados Unidos de América, por ejemplo, la Conferencia Americana de Higienistas Industriales Gubernamentales (ACGIH, *American Conference of Governmental Industrial Hygienists*), establece los valores umbrales límite (TLV, *threshold limit values*) para una gama de agentes químicos [18]; el TLV para una sustancia química se refiere a la concentración máxima en el aire bajo la cual no se esperan efectos adversos para un trabajador [1]. Por otro lado, la Administración de Seguridad y Salud Ocupacional (OSHA, *Occupational Safety and Health Administration*) ha definido sus propios valores umbrales, los cuales son identificados como límites de exposición permisible (PEL, *permissible exposure level*) [1], [19]. Estos valores límite han fungido como referentes en las regulaciones técnicas de otros países; por ejemplo, la Norma Oficial Mexicana NOM-010-STPS-2014, centrada en las condiciones de seguridad e higiene en los centros de trabajo y almacenamiento donde se manejen, transporten, procesen o depositen sustancias químicas capaces de generar contaminación en el ambiente laboral [20].

A su vez, los TLV son un parámetro de referencia en las etapas de los análisis de riesgo que se efectúan en las plantas químicas. Típicamente, este tipo de análisis comienza por considerar un incidente hipotético pero probable, como la liberación accidental de una sustancia tóxica y/o inflamable en una planta química. Es posible predecir con mayor certeza que ocurra o no un escenario así si se cuenta con el historial de accidentes *in situ* y el personal involucrado posee una experiencia amplia en seguridad industrial [1], [2], [21].



... Este trabajo describe los fundamentos de las técnicas de dinámica de fluidos computacional (CFD) complementados con una revisión de estudios sobre esta herramienta computacional en el modelado y simulación de dispersión de gases tóxicos en plantas químicas.



El siguiente paso consiste en determinar un valor numérico que represente las consecuencias indeseables del incidente en cuestión, con base en las propiedades de la sustancia: tasas de liberación (flujo másico o volumétrico) y evaporación, así como su transporte y dispersión bajo condiciones meteorológicas específicas (velocidad del viento, temperatura ambiente, presión, etcétera) [1], [2], [21]. El modelado matemático de este conjunto de fenómenos físicos se vuelve esencial en los procedimientos de cuantificación del riesgo. Para este propósito, se han desarrollado los llamados modelos de dispersión, tales como los gaussianos [22], [23], [24] y los integrales [25], [26], [27]. A pesar de que este tipo de modelos son ampliamente populares, y presentan importantes desventajas. En primer lugar, no ofrecen una representación fidedigna de la fenomenología relacionada con las interacciones de los gases con los obstáculos comunes en las plantas químicas (equipos de proceso, edificios, cuartos de control y de servicios, etcétera) [2], [28], [29]. Además, la unidimensionalidad de estos modelos impone un límite severo a la predicción de la dispersión gaseosa, pues el movimiento y las propiedades de estos fluidos exhiben cambios a través de las tres dimensiones espaciales [28], [30], [31]. Finalmente, es importante mencionar que las turbulencias originadas cuando los gases fluyen alrededor de los obstáculos producen variaciones locales en las concentraciones y la difusión de los gases [30], [32], [33], [34]; en este sentido, se ha reportado que los modelos de dispersión convencionales producen estimaciones de estas variables que difieren de manera abismal del comportamiento real [28], [35], [36].

El creciente avance tecnológico y el incremento exponencial de la capacidad computacional en las últimas décadas han favorecido la aplicación de técnicas especiales para el estudio de la fenomenología relacionada con los escenarios que suponen un riesgo en los procesos químicos. Una de estas técnicas es la dinámica de fluidos computacional (*CFD*, *Computational Fluid Dynamics*). *CFD* se apoya de procesos informáticos para predecir cuantitativamente los fenómenos relacionados con la dinámica de fluidos y la transferencia de energía y masa, a partir de la aplicación de las llamadas leyes de conservación [37], [38]. Constituye una herramienta numérica invaluable en el análisis y la estimación paramétrica de la seguridad de los procesos químicos, tales como la distribución de gases tóxicos, los niveles de radiación y los perfiles de sobrepresión [2].

La liberación o fuga de gases tóxicos en plantas químicas pueden darse de forma rápida y en cantidades suficientes para esparcirse, formar nubes densas y originar consecuencias catastróficas tanto en el sitio donde ocurren como en los alrededores. En estos casos, el modelado *CFD* proporcio-



na información valiosa sobre la velocidad, la temperatura, los perfiles de concentración, la evolución y la dirección del flujo, así como las dimensiones de su área de impacto. Este enfoque ha gozado de popularidad en la última década en diversos estudios en plantas químicas con múltiples obstáculos y edificios, lo cual supone un ambiente con direcciones de flujo complejas. Además, los modelos basados en CFD poseen ventajas sobre los modelos de dispersión convencionales; para empezar, ofrecen una óptima capacidad de predicción de los perfiles reales de concentración, velocidad y temperatura, sobre todo en sistemas tridimensionales donde hay obstáculos con geometrías complejas. Cuando se implementan de forma correcta, despliegan una alta precisión en la estimación de estas variables en aquellos espacios que exhiben fluctuaciones turbulentas (remolinos, recirculaciones, etcétera) [2].

Otra ventaja de CFD es que sus resultados repercuten positivamente en la toma de decisiones de emergencia, así como en las estrategias de planificación en incidentes relacionados con el escape de materiales peligrosos [39], [40]. Por ejemplo, los perfiles de concentración de los gases tóxicos permiten generar estimaciones iniciales para determinar las condiciones o escenarios bajo los cuales se alcancen concentraciones límite; asimismo, esta información proporciona un marco de referencia sobre las ubicaciones clave donde colocar sensores de detección de gases en una planta química.

De lo anterior dicho, este trabajo describe los principios técnicos de CFD y presenta una revisión de estudios enfocados en su uso en el modelado y la simulación de dispersión de gases tóxicos dentro de plantas químicas. Se agrega un caso de estudio demostrativo, así como una discusión sobre las perspectivas respecto a este enfoque, incluyendo su estado actual, ventajas, limitaciones y áreas de oportunidad.

Metodología

Las etapas que conforman el desarrollo de un modelo CFD son preprocesamiento, solución numérica del modelo y posprocesamiento. Hoy en día existe una gran variedad de programas de CFD (tanto comerciales como de uso libre), los cuales poseen una interfaz gráfica que permite acceder de forma secuencial a cada etapa por medio de programas o aplicaciones secundarias; las tareas relacionadas se facilitan con la creación y manipulación de los modelos computacionales.

Por ejemplo, en la Figura 1 se presenta la interfaz ANSYS® Workbench™ 2023 R2 [41], donde se puede apreciar cada una de las etapas mencionadas en la plantilla de un modelo computacional (denominada Dispersión_de_gases_tóxicos) por desarrollar.

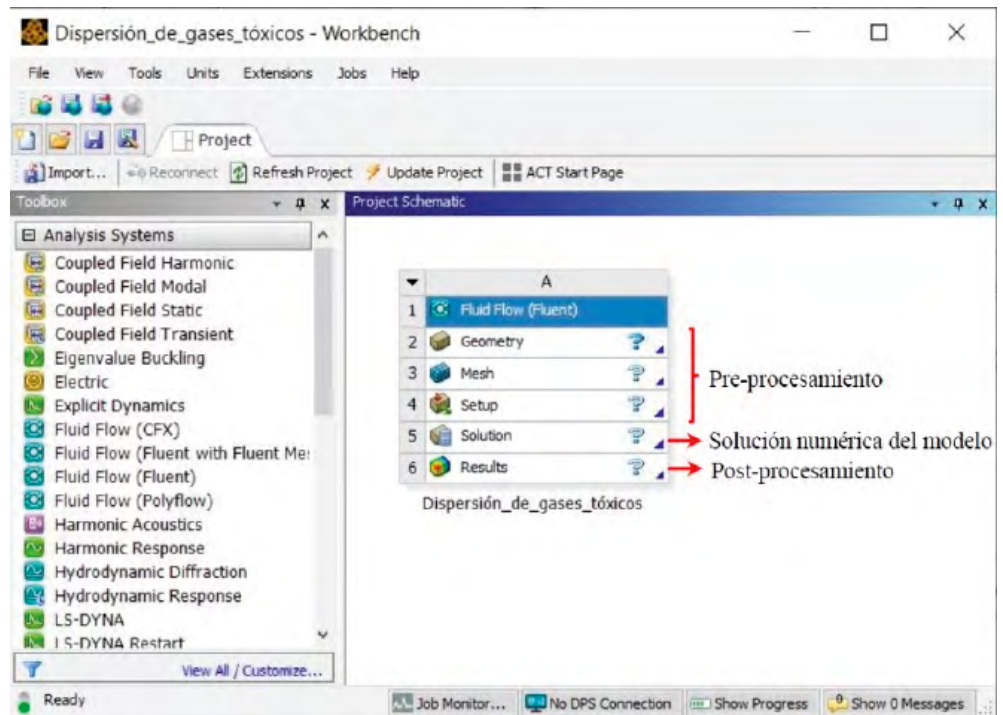


FIGURA 1. Interfaz gráfica de ANSYS® Workbench™ 2023 R2.

A continuación, se describen los aspectos que conforman cada etapa del desarrollo y la simulación de modelos basados en CFD, enfatizando su aplicación en la dispersión de gases tóxicos en plantas químicas.

Preprocesamiento

El preprocesamiento debe llevarse a cabo antes de implementar el procedimiento de solución numérica de un modelo computacional basado en CFD. En las siguientes subsecciones se describe cada una de estas tareas.

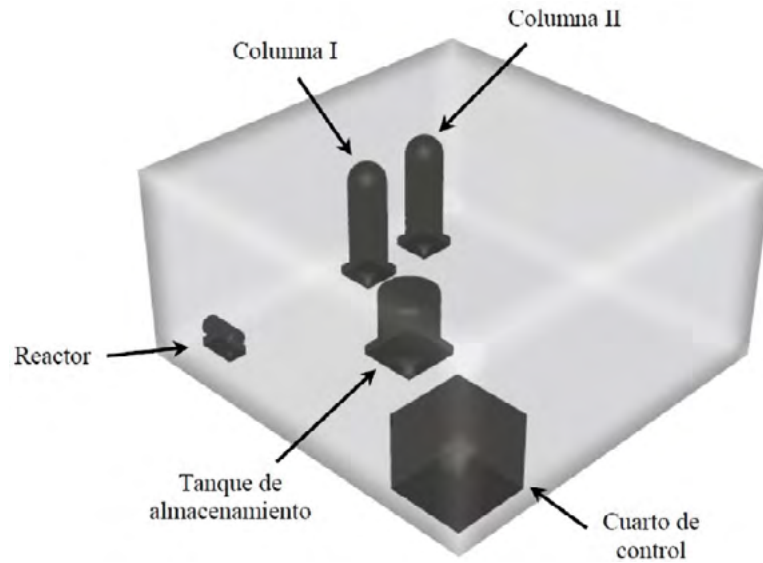
Generación del dominio computacional

Esta etapa consiste en la construcción de la geometría computacional que representará el sistema de estudio. Esta labor se lleva a cabo por medio un software de diseño asistido por computadora (CAD, *Computer-Aided Design*). En este sentido, el dominio computacional del sistema de estudio debe contener todos los elementos geométricos que puedan alterar el comportamiento de los fluidos y/o influir en la transferencia tanto de masa como de energía; por ejemplo, entradas, salidas, muros, zonas porosas, deflectores y otros componentes internos.



El fenómeno de dispersión de gases se puede simular considerando un dominio computacional (la planta química) con o sin elementos internos como equipos de proceso, cuartos de control, tuberías, escaleras, barreras físicas de protección y/o mitigación. La Figura 2 muestra el dominio computacional de una planta química que procesa metano gaseoso y cuenta con un reactor químico, dos columnas de destilación, un tanque de almacenamiento y un cuarto de control. En este caso, el dominio fue generado en el programa ANSYS® DesignModeler™ 2023 R2 [42], al cual puede accederse en el apartado Geometry de la plantilla en ANSYS® Workbench™.

FIGURA 2. Dominio computacional de una planta química con elementos internos generado en ANSYS® DesignModeler™ 2023 R2.



Aquellos estudios que consideran un dominio computacional sin elementos internos pueden tener como objetivo un análisis preliminar de la dispersión de los gases tóxicos en la planta, incluyendo perfiles de concentración, velocidades o temperaturas. Así, los resultados obtenidos en esta etapa son comparables con aquellos que se tendrán una vez considerados uno o varios elementos internos. Por ejemplo, en [43] se obviaron los elementos internos, pues el propósito fue analizar el efecto de una cortina de agua en forma de *spray* para mitigar una corriente gaseosa tóxica en una planta; en este caso, los componentes tóxicos considerados fueron fluoruro de hidrógeno (HF) y amoníaco (NH_3). En resumen, las razones por las cuales se omiten los elementos internos dentro del dominio computacional de la planta es que estos no forman parte del sistema de interés.

Por otro lado, numerosos trabajos han estudiado el efecto de los elementos internos de una planta química en la dispersión de gases tóxicos: barreras físicas de protección (paredes) de diferentes dimensiones [44] o diseños



geométricos [45], equipos de proceso, tales como tanques de almacenamiento y reactores químicos, así como cuartos de control, oficinas y otros edificios [31], [46], [47], [48].

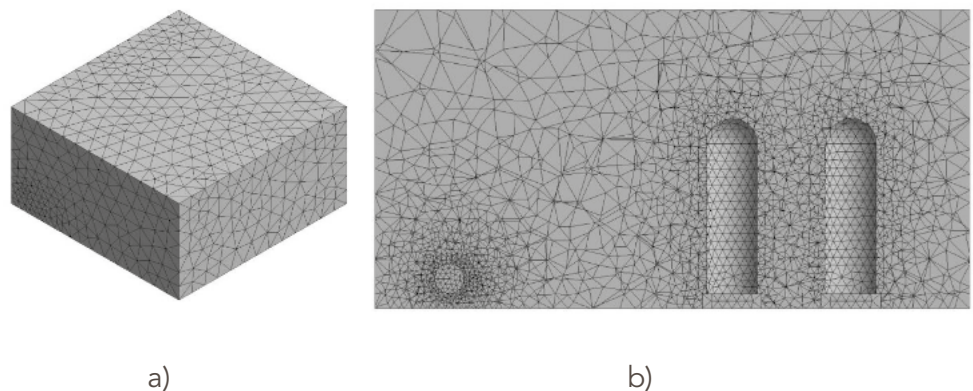
Discretización del dominio computacional

En CFD la fenomenología es representada mediante un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales integradas sobre elementos diferenciales de volumen; *a posteriori*, se aproximan para obtener un conjunto de ecuaciones algebraicas, cuya solución puede encontrarse, por ejemplo, a través de métodos matriciales.

Mediante un procedimiento denominado *mallado* se efectúa la división del dominio computacional en elementos diferenciales de volumen [49], [50], [51]. En el caso de mallas bidimensionales dichas fracciones pueden ser cuadriláteros, triángulos u otros polígonos; en cambio, cuando se trata de mallas tridimensionales, pueden ser hexaedros, tetraedros u otros prismas. A su vez, si las mallas compuestas de elementos de tipo cuadrilátero (2D) o hexaedro (3D) ostentan un arreglo ordenado y uniforme se designan como *mallas estructuradas*.

A este respecto se suman las *mallas no estructuradas* (Figura 3), compuestas de elementos cuadriláteros o hexaedros, así como de elementos triangulares (2D), tetraédricos, entre otros prismas (3D). En particular, la Figura 3 corresponde a la discretización del dominio computacional (Figura 2) generada en el programa ANSYS® Meshing™ 2023 R2 [52], accesible en el apartado Mesh de la plantilla del modelo computacional (Figura 1).

FIGURA 3. Malla no estructurada del dominio computacional de una planta química generada en ANSYS® Meshing™ 2023 R2:
a) vista externa
b) vista interna.



Es menester mencionar que la generación de mallas estructuradas para sistemas con geometrías complejas puede consumir mucho tiempo, e incluso llegar a ser una labor imposible; la dificultad se debe a que algunas regiones o zonas poseen formas geométricas que es complicado representar por medio de cuadriláteros y hexaedros (zonas con curvaturas, de-



flectores u otros componentes internos). Como consecuencia, surge la necesidad de generar mallas no estructuradas, puesto que las formas de tetraedros y triángulos se adaptan mejor a las regiones con formas geométricas complejas [38], [53].

Como se mencionó anteriormente, al definir el dominio computacional de la planta química donde se desea analizar la dispersión de gases tóxicos, es de suma importancia considerar la presencia de elementos internos u obstáculos en la misma. Tales cuerpos influirán directamente en la estrategia de discretización espacial o mallado de dicho dominio. Algunos trabajos proponen mallas tridimensionales estructuradas, que consisten principalmente de hexaedros, para el mallado del dominio computacional de una planta química con diferentes unidades de proceso con formas geométricas convencionales [48], [54]. Ambos estudios establecen que, en las zonas correspondientes a la fuente de emisión del gas y alrededores de las unidades de proceso, los elementos de la malla deben poseer menor tamaño respecto a otras zonas. Esta estrategia es conocida como *refinamiento* y ofrece una mejor representación de los fenómenos más relevantes en las zonas donde las variables involucradas (velocidad, concentración, temperatura, entre otras) exhiben cambios drásticos o muy pronunciados. El refinamiento permite un mejor control del tamaño de la malla, referido al número de elementos que la conforman. La estrategia ha sido aplicada en estudios donde se han generado mallas tridimensionales no estructuradas, unas conformadas mayormente por tetraedros [31], otras por combinaciones de tetraedros y poliedros [55], [56].

Ecuaciones gobernantes

CFD involucra el análisis del comportamiento de fluidos, así como de los fenómenos relacionados con la transferencia de calor y/o masa; es decir, está cimentada en las leyes de conservación de masa, momento y energía. A continuación, se explica el fundamento teórico de las ecuaciones que representan estas leyes.

Conservación de la masa y conservación de la cantidad de movimiento

Las ecuaciones de conservación para sistemas monofásicos que involucran un flujo laminar están bien establecidas. En este sentido, la conservación de la masa y el momento (cantidad de movimiento) está dada, respectivamente, por las Ecuaciones (1) y (2) [57]:



$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + (\nabla \cdot \rho \vec{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \vec{v} + (\nabla \cdot \rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p - (\nabla \cdot \tau) + \rho \vec{g} \quad (2)$$

Donde:

t denota el tiempo,

ρ corresponde a la densidad,

\vec{v} representa el vector de velocidad,

p es la presión,

τ respecta al tensor de esfuerzos viscosos.

En este caso, el gradiente ∇ representa el cambio de las variables con respecto a las dimensiones en un plano; por ejemplo, en un plano cartesiano tridimensional, estas dimensiones estarían dadas por las coordenadas (x, y, z) . Al desarrollar un modelo basado en CFD, se deben definir cuáles de estas variables tienen influencia en los fenómenos de interés; por ejemplo, si los efectos gravitacionales son importantes o si se abordará un enfoque transitorio o estacionario (es decir, sistemas cuyo comportamiento cambia con el tiempo o no).

Conservación de energía

Los sistemas no-isotérmicos (es decir, aquellos en los que existen cambios considerables en la temperatura) requieren tomar en cuenta la Ley de conservación de energía además de las Ecuaciones (1) y (2). El propósito es ponderar la energía interna total del sistema, es decir, la suma de las energías térmica y mecánica; en particular, las fluctuaciones de energía térmica durante la dispersión de gases ejercen un efecto más significativo. Por esta razón, la expresión matemática que las describe se suele incluir al evaluar la mitigación de los accidentes y dispersión de contaminantes [43], [46], [58]; por ejemplo, ha sido considerada en el modelado de cortinas de fluidos como agua, aire y vapor, sobre la concentración de los componentes tóxicos en emisiones gaseosas [43], [59]; la intención es tomar en cuenta los fenómenos de enfriamiento o calentamiento que experimentan las nubes de gases tóxicos al entrar en contacto con las cortinas de fluidos a una diferente temperatura.

En este caso, la conservación de la energía térmica está dada por [57]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho e + (\nabla \cdot \rho e \vec{v}) = - (\nabla \cdot \vec{q}) - p(\nabla \cdot \vec{v}) + (-\tau : \nabla \vec{v}) + S_h$$

Donde:

e representa la energía interna por unidad de masa,

\vec{q} expresa el vector de flujo de calor debido al transporte molecular,

S_h es la tasa volumétrica de producción de calor.

El término de disipación viscosa $(-\tau : \nabla \vec{v})$ a menudo se desprecia en el modelado de aplicaciones de ingeniería química [60].

Transporte de especies químicas

Además de las Ecuaciones (1) a (3), la ecuación de transporte para cada una de las especies químicas i , que componen las emisiones gaseosas tóxicas, debe ser añadida con el fin de representar el flujo o transporte de la forma más realista posible. Diferentes estudios han abordado tal enfoque para analizar la dispersión aérea de gases tóxicos en plantas químicas, tales como fluoruro de hidrógeno (hf) [43], [44], [61], cloro (Cl₂) [31], [47], [62], [63], [64], amoníaco (nh₃) [56], [65], [66], ácido sulfhídrico (H₂S) [55], cloruro de vinilo (C₂H₃Cl) [58], etanol (C₂H₆O) [67] y dióxido de carbono (co₂) [68].

La ecuación de conservación de cada una de las especies químicas está dada por la siguiente expresión general [57]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \omega_i + (\nabla \cdot \rho \vec{v} \omega_i) = - (\nabla \cdot \vec{J}_i) + S_i$$

Donde:

ω_i es la fracción másica de la especie i ,

\vec{J}_i corresponde al vector de flujo de masa de la especie i asociado al transporte molecular,

S_i denota la tasa neta de producción de la especie i por unidad de volumen. Este último término es omisible para los sistemas en los cuales las especies en la emisión gaseosa no interactúan para llevar a cabo reacciones químicas de formación ni consumo.





Con el fin de que las Ecuaciones (1) a (4) tengan solución, es necesario añadir una ecuación de estado para el cálculo de la densidad (ρ), así como ecuaciones constitutivas para el tensor de esfuerzos viscosos ($\boldsymbol{\tau}$), el vector de flujo de calor (\vec{q}) y el de flujo de masa (\vec{J}_i). Como consideración inicial, a falta de un conocimiento detallado de la reología del fluido a través de un sistema, puede asumirse un comportamiento newtoniano para el mismo. De este modo, resulta útil la siguiente expresión para $\boldsymbol{\tau}$:

$$\boldsymbol{\tau} = - \left\{ \left(\lambda - \frac{2}{3} \mu \right) (\nabla \cdot \vec{v}) \mathbf{I} + \mu [(\nabla \vec{v}) + (\nabla \vec{v})^T] \right\}$$

Donde:

λ y μ son, respectivamente, la viscosidad a granel y la viscosidad de corte,

\mathbf{I} es el tensor identidad, y el superíndice T indica la traspuesta,

La viscosidad a granel puede despreciarse para gases densos y líquidos [57].

Por otro lado, las leyes de Fick y de Fourier se utilizan con frecuencia para modelar los vectores de flujo de calor y de masa, respectivamente. De esta forma, las ecuaciones para estos términos son [57]:

$$\vec{q} = -k \nabla T$$

$$\vec{J}_i = -D_i \rho \nabla \omega_i$$

Donde:

k representa la conductividad térmica,

T indica la temperatura,

D_i corresponde al coeficiente de difusión de Fick de la especie i .

Hay que destacar que los programas comerciales y de uso libre de CFD cuentan con bibliotecas de modelos matemáticos para representar las ecuaciones gobernantes hasta aquí descritas, sumados a otros submodelos destinados a aplicaciones específicas. Concretamente, se observa en las Figuras 4 y 5 la interfaz de selección de modelos matemáticos disponibles en el programa ANSYS® Fluent® 2023 R2 [69]; en específico, las ecuaciones de energía (Figura 4) y transporte de especies químicas (Figura 5). En primera instancia debe accederse al apartado "Setup" de la plantilla del modelo computacional en ANSYS® Workbench™ (Figura 1). Después se selecciona la pestaña Models, con lo cual se desplegarán los modelos disponibles para describir la fenomenología involucrada en un sistema de interés. Cabe señalar que las Ecuaciones (1) y (2) son los modelos pre-

determinados para describir, respectivamente, la conservación de la masa y de la cantidad de movimiento en la mayoría de los programas de CFD.

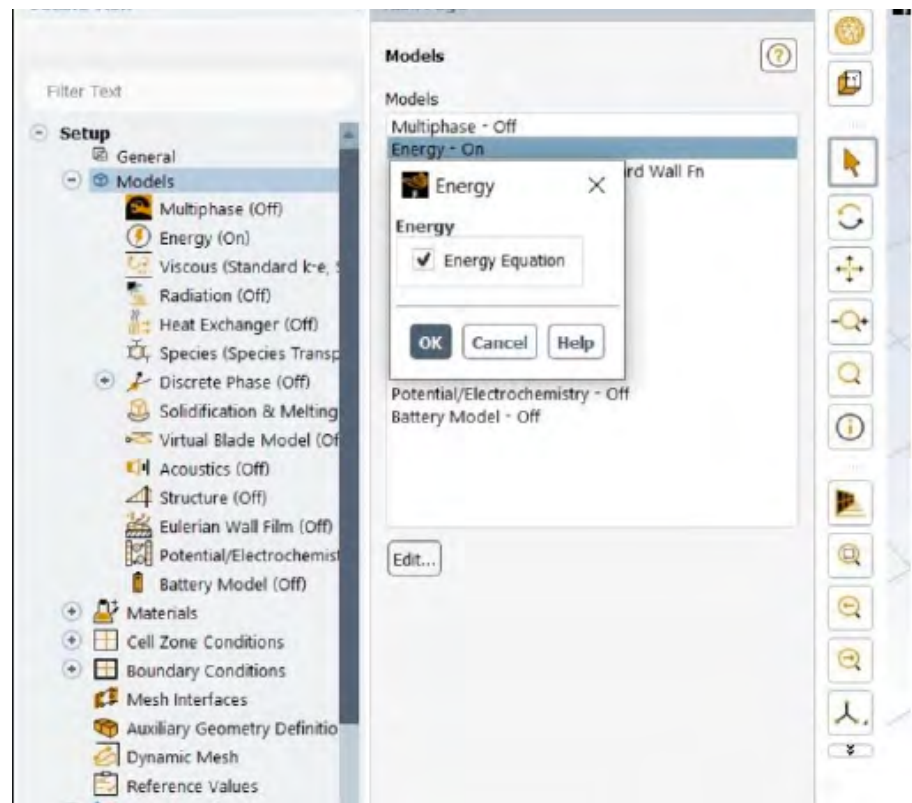


FIGURA 4. Interfaz de selección de la ecuación de conservación de energía en la biblioteca de modelos de ANSYS® Fluent™ 2023 R2.

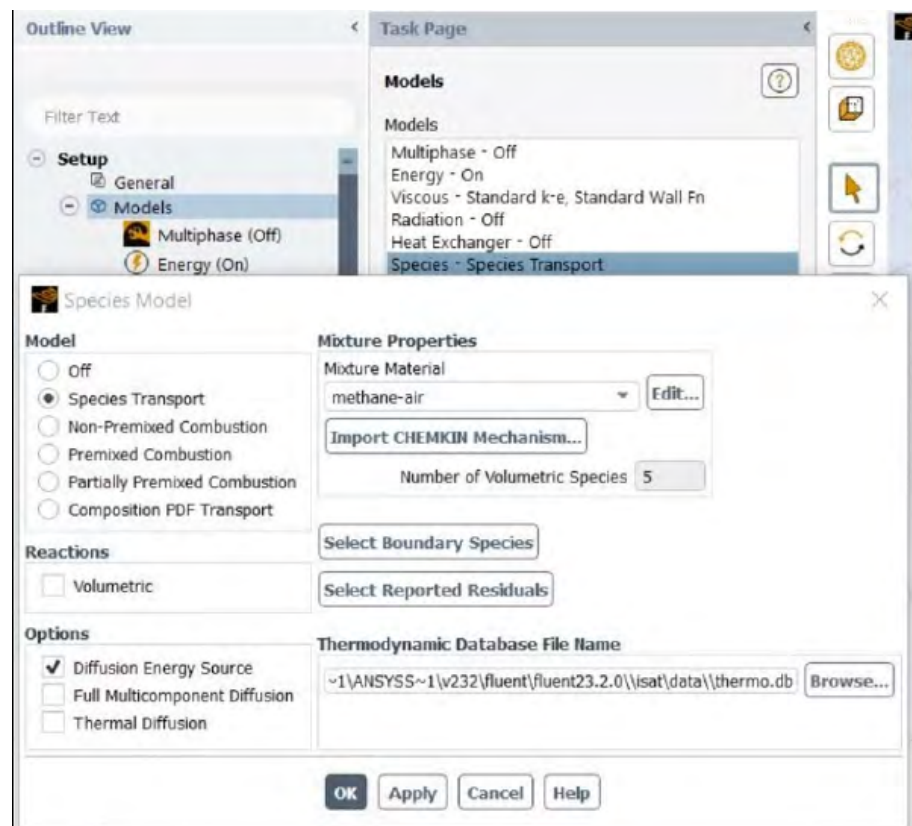


FIGURA 5. Interfaz de selección de la ecuación de transporte de especies químicas en la biblioteca de modelos de ANSYS® Fluent™ 2023 R2.

Como puede verse en la Figura 5, además de la selección de la ecuación de transporte de especies químicas, ANSYS® Fluent® 2023 R2 permite





especificar algunos submodelos para refinar la representación de esta fenomenología. Por ejemplo, es posible elegir el mecanismo de difusión que se desea representar (*Diffusion Energy Source*, *Full Multicomponent Diffusion*, o *Thermal Diffusion*), incluir o no reacciones químicas de tipo volumétrico (*Volumetric*), así como especificar el modelo de combustión (*Non-Premixed Combustion*, *Premixed Combustion*, *Partially Premixed Combustion*, etcétera). Además de la bibliografía especializada, ANSYS® Fluent® 2023 R2 proporciona una guía práctica con recomendaciones sobre el uso, ventajas y limitaciones de cada uno de los modelos y submodelos [70].

Modelado de la turbulencia

Las Ecuaciones (1) a (4) son válidas para flujos laminares, aunque también pueden aplicarse para el modelado de flujos turbulentos o caóticos, tal como se indicó al inicio de la descripción. En este sentido, los cambios abruptos en la presión y la velocidad propios de este tipo de flujos suelen tratarse mediante la descomposición de Reynolds [71], [72]; dicho método posibilita representar el valor instantáneo de cada una de las variables (X) que aparecen en las ecuaciones de conservación como la suma de sus valores promediados en el tiempo (\bar{X}) y un componente fluctuante (X'):

$$X = \bar{X} + X'$$

Cuando se sustituyen los valores instantáneos de las variables en las Ecuaciones (1) a (4), se obtienen las ecuaciones de conservación para flujos turbulentos; es decir, la presión y la velocidad instantáneas son reemplazadas por sus correspondientes cantidades promediadas en el tiempo. Por otro lado, el tensor de esfuerzos viscosos ($\boldsymbol{\tau}$) es reemplazado por la suma de los esfuerzos que toman en cuenta una velocidad promediada con el tiempo y el llamado tensor de esfuerzos de Reynolds ($\boldsymbol{\tau}^{(t)}$). El significado físico de los esfuerzos de Reynolds se relaciona con la interacción entre el movimiento fluctuante y el movimiento promediado en el tiempo de un fluido [72].

La principal dificultad al modelar flujos turbulentos es describir los esfuerzos de Reynolds, los cuales deben especificarse en términos de las variables promediadas en el tiempo; para tal fin puede recurrirse a los modelos de turbulencia: un conjunto de ecuaciones de tipo algebraico o



diferencial que permiten calcular los términos de transporte turbulento de momento en las ecuaciones de flujo promediadas en el tiempo [72].

La mayoría de los modelos de turbulencia se fundamentan en el concepto de la viscosidad de remolino de Boussinesq, el cual asume que los esfuerzos de Reynolds son proporcionales a los gradientes de las componentes de la velocidad promediada en el tiempo:

$$\tau_{ij}^{(t)} = \mu^{(t)} \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right] + \delta_{ij} \frac{2}{3} \rho \kappa$$

Donde:

$\mu^{(t)}$ representa la viscosidad turbulenta, una propiedad de los flujos de este tipo.

U_i y U_j son las componentes de la velocidad promediada en el tiempo en las direcciones x_j y x_i , respectivamente,

δ_{ij} denota la función delta de Kronecker.

El objetivo de un modelo de turbulencia consiste en proporcionar expresiones matemáticas para determinar la viscosidad turbulenta [72]. De este modo, los llamados *modelos de dos ecuaciones* ofrecen un buen equilibrio entre factores como poder de procesamiento, precisión y capacidad de aplicación para una amplia variedad de problemas de flujo [60], [72]. Este tipo de modelos incorporan dos ecuaciones de transporte que determinan el valor de dos variables turbulentas. Por ejemplo, en el modelo $\kappa - \varepsilon$ (Kappa-Épsilon) se resuelven dos ecuaciones de transporte, una de ellas para determinar la energía cinética turbulenta (κ) asociada a los remolinos en el flujo, y la otra para calcular la tasa de disipación viscosa de dicha energía (ε). En este caso, la viscosidad turbulenta está dada por la siguiente expresión:

$$\mu^{(t)} = C_\mu \rho \frac{\kappa^2}{\varepsilon}$$

Donde C_μ es una constante empírica.

Otros modelos de turbulencia de dos ecuaciones son el *RNG* $\kappa - \varepsilon$ y el *realizable* $\kappa - \varepsilon$, los cuales son variantes del Kappa-Épsilon, así como el modelo $\kappa - \omega$ (léase Kappa-Omega) y su variante, *SST* $\kappa - \omega$. La principal diferencia entre los modelos Kappa-Épsilon y Kappa-Omega es que estos últimos incorporan modificaciones para considerar los efectos asociados a bajas velocidades y compresibilidad de los fluidos, así como variaciones



en los esfuerzos de corte en los flujos [72], [73]. El modelo Kappa-Épsilon ha sido elegido en varios estudios para representar la dispersión turbulenta de gases tóxicos en plantas químicas con obstáculos (edificios, equipos de proceso, etcétera) [45], [46], [56] y sin ellos [43].

Otros modelos de dos ecuaciones han sido considerados en algunos estudios sobre dispersiones de gases tóxicos en espacios confinados. Por ejemplo, en uno de estos estudios se probaron diferentes modelos de turbulencia de dos ecuaciones para determinar cuál representa mejor la dispersión de una corriente de amoníaco en una planta de procesamiento de alimentos [74]. En este caso, se determinó que el modelo **RNG $\kappa - \epsilon$** proporciona resultados más fieles a los datos experimentales en comparación con los otros modelos.

Aunados a las ecuaciones de conservación energética y transporte de especies químicas, los softwares CFD cuentan con acervos de modelos de turbulencia. Por ejemplo, en la Figura 6 se observa la interfaz de selección de modelos con que cuenta el programa ANSYS® Fluent® 2023 R2 [69]. En este caso, es posible acceder a estos modelos por medio de la pestaña Models, la cual está incluida en el apartado Setup de ANSYS® Workbench™, tal como se indicó previamente para las ecuaciones de conservación de energía y de transporte de especies químicas. Como puede verse en la Figura 6, además de la selección de los modelos de turbulencia, ANSYS® Fluent® 2023 R2 permite especificar algunos sub-modelos y características especiales para una representación más precisa de las fluctuaciones turbulentas. En concreto, es posible elegir el tipo de tratamiento matemático que se establecerá en la cercanía de las paredes sólidas en el dominio computacional (*Near-Wall Treatment*), modificar los valores pre-establecidos para las constantes de los modelos de turbulencia (*Model Constants*) e incluir sub-modelos especiales relacionados con la producción de turbulencia (*Viscous Heating*, *Curvature Correction*, *Production Kato-Launder* y *Production Limiter*). En este caso, ANSYS® Fluent® 2023 R2 proporciona una guía práctica con recomendaciones sobre el uso, ventajas y limitaciones de cada uno de estos modelos y sub-modelos de turbulencia [70].

FIGURA 6. Interfaz de selección de modelos de turbulencia en la biblioteca de modelos de ANSYS® Fluentm 2023 R2.



Definición de las propiedades de transporte

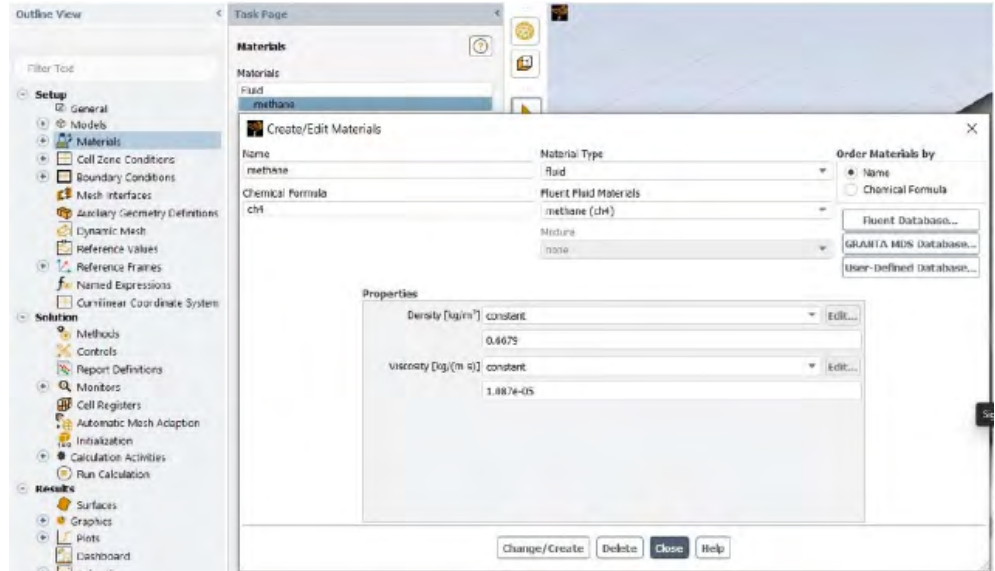
La viscosidad, densidad, conductividad térmica y difusividad molecular (conocidas como propiedades de transporte) son parteaguas en la representación de los fenómenos involucrados, y para cualquier sistema en particular deben especificarse al desarrollar un modelo basado en CFD. Asimismo, debe definirse si el valor para cada una será constante durante la simulación numérica del modelo, o bien si tendrán dependencia con alguna variable de interés, como la temperatura o la presión [38], [49].

En el caso de los modelos computacionales que se proponen representar la dispersión de gases tóxicos en plantas químicas, es necesario especificar las propiedades de transporte para el aire y para los componentes principales de las emisiones de gases tóxicos, incluyendo algunos de los mencionados previamente.

Una característica primordial de los programas de CFD es que cuentan con inventarios de componentes químicos y sus propiedades de transporte. Por ejemplo, en la Figura 7 se aprecia la interfaz de selección de componentes, así como de sus propiedades, de ANSYS® Fluent™ 2023 R2 [69]. Ahora bien, es posible desplegar la lista por medio de la pestaña Materials, la cual está incluida en el apartado Setup de ANSYS® Workbench™. En este caso se ha hecho la selección del metano (CH_4); aparecen en la interfaz el identificador (Name), la fórmula química (ChemicalFormula), la densidad (Density) y la viscosidad (Viscosity). Si el usuario lo desea, puede modificar a conveniencia los valores de éstas y otras propiedades.



FIGURA 7. Interfaz de selección de componentes químicos en la librería de materiales de ANSYS® Fluent™ 2023 R2.



Especificación de las condiciones de frontera

El desarrollo de un modelo CFD requiere especificar las condiciones en las fronteras del dominio computacional, es decir, entradas, salidas, paredes, entre otras. Dichas condiciones pueden ser velocidades, flujos mássicos, presiones, temperaturas, fracción mássica de los componentes, y variables turbulentas [38], [49].

En los estudios del modelado de la dispersión de gases en plantas químicas, la condición que por lo general se establece en las entradas del sistema es la velocidad del viento. Tal condición puede adoptar un valor constante [44], [47] o representarse mediante un perfil de valores en función de, por ejemplo, la altitud con respecto al nivel del suelo [31], [48], [54]. En este último caso con frecuencia se utiliza la siguiente expresión:

$$u = u_{\text{ref}} \left(\frac{z}{z_{\text{ref}}} \right)^{\gamma}$$

Donde:

u es la velocidad del viento;

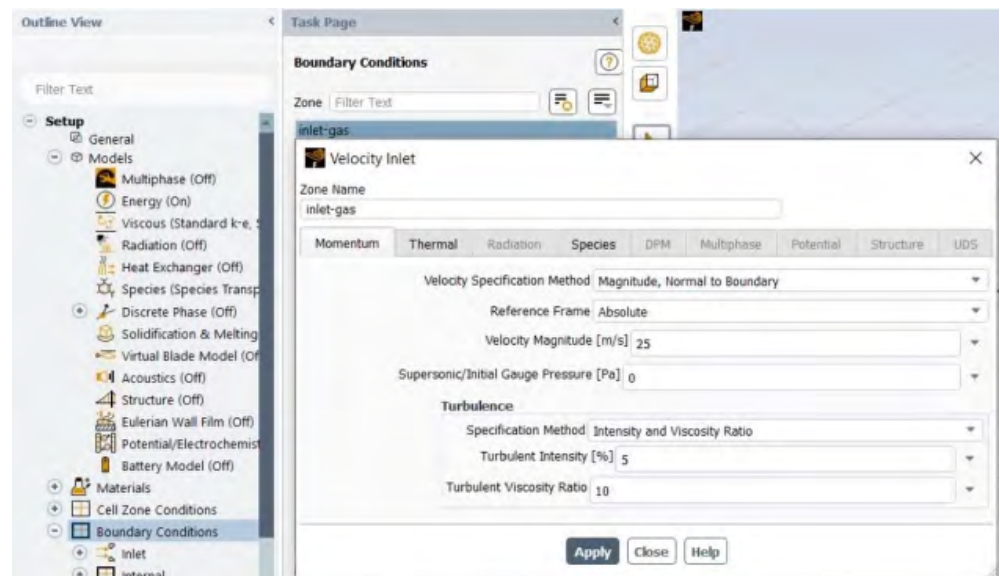
z es la altura;

u_{ref} es la velocidad del viento que corresponde a una altura de referencia (z_{ref});

γ es un parámetro que depende de la estabilidad atmosférica [75].

Además de las condiciones de flujo, es posible definir los valores de la temperatura (en los casos no-isotérmicos), la humedad y las variables turbulentas.

FIGURA 8. Interfaz de selección de componentes químicos en la librería de materiales de ANSYS® Fluent™ 2023 R2.



En la Figura 8, la frontera de ejemplo corresponde a la entrada del gas tóxico en el dominio computacional de una planta química. Dado que en dicha frontera se especificará la velocidad, los valores incluyen la dirección del flujo de gas tóxico respecto a la entrada (*Velocity Specification Method*), la magnitud de la velocidad (*Velocity Magnitude*) y las variables turbulentas, como la intensidad de la turbulencia (*Turbulent Intensity*) y proporción de viscosidad turbulenta (*Turbulent Viscosity Ratio*). Cabe mencionar que es posible especificar otras variables en las fronteras de un dominio computacional, como el flujo másico y la presión. ANSYS® Fluent™ 2023 R2 proporciona una guía con recomendaciones sobre la elección y especificaciones de cada condición de frontera disponible en función de las aplicaciones a llevar a cabo [69].

Respecto a las salidas en las plantas químicas, pueden definirse desde dos diferentes enfoques: valor fijo o flujo saliente (en inglés, *outflow*). En el primero de estos enfoques, se establece una presión constante que normalmente corresponde a la presión de la ubicación de la planta química

Otras fronteras a considerar en las plantas químicas son los puntos donde se origina la emisión de gases tóxicos; allí puede establecerse cierta cantidad de gases que fluye durante un lapso concreto (el flujo másico de la emisión). También es posible especificar la temperatura y las variables turbulentas.

En la Figura 8 se muestra la interfaz de especificación de condiciones frontera del programa ANSYS®Fluent™ 2023 R2 [69]. Es posible acceder a esta interfaz por medio de la pestaña Boundary Conditions en el apartado Setup de ANSYS® Workbench™.



[31], [47], [58], [61], [62], [64], [66], [67]. En el segundo de estos enfoques, se extrapolan los valores de las variables en las entradas (velocidades, presiones), con el fin de estimar sus contrapartes en las salidas [43], [54], [65]. Las fronteras de salida en el programa comercial ANSYS® Fluent® 2023 R2 [69] se especifican de forma similar a las de entrada (Figura 8).

Los obstáculos (equipos, cuartos de control, etcétera) y superficies sólidas en la planta química se tratan como muros en el dominio computacional y se les asigna la condición de *no-deslizamiento*, en la cual la velocidad de la corriente de gases será nula.

En la Tabla 1 se presentan las condiciones de frontera reportadas en algunos estudios recientes sobre la dispersión de gases tóxicos en plantas químicas.

TABLA 1. Condiciones de frontera en algunos estudios recientes sobre dispersiones de gases tóxicos en plantas químicas.

SISTEMA	CONDICIONES DE ENTRADA	CONDICIÓN DE SALIDA	REFERENCIA
Emisión de Cl ₂ en una planta química	Perfil de velocidad del viento: $v_{\text{ref}} = 1.9, 5.6$ m/s $z_{\text{ref}} = 10$ m $\gamma = 0.07, 0.15$ Flujo de Cl ₂ = 1.15 kg/s	Presión atmosférica	[30]
Emisión de NH ₃ en una planta química	Velocidad del viento: $U = 3, 5$ m/s Flujo de NH ₃ = 4.2, 3 kg/s Temperatura = 12.5, 24 °C	Flujo saliente	[43]
Emisión de HF en una planta química	Velocidad del viento: $U = 56, 4.2, 5.4$ m/s. Flujo de HF = 469.2, 175.1, 171.6 gal/min	Presión atmosférica	[44]
Emisión de gases pesados en una planta química	Perfil de velocidad del viento: $v_{\text{ref}} = 0.2$ m/s $z_{\text{ref}} = 3$ m $\gamma = 0.35$ Flujo de gases pesados = no especificado	Flujo saliente	[54]
Emisión de HF en una planta química	Velocidad del viento: $U = 4.2, 5.4$ m/s. Flujo de HF = 0.011 m ³ /s Temperatura = 36, 26.5 °C	Presión atmosférica	[61]
Emisión de Cl ₂ en una planta química	Velocidad del viento: $U = 5$ m/s. Velocidad equivalente al flujo de Cl ₂ = 5 m/s	Presión atmosférica	[62]
Emisión de Cl ₂ en una planta química	Velocidad del viento: $U = 0.1, 1$ m/s Flujo de Cl ₂ = 20 kg/h	Presión atmosférica	[64]



SISTEMA	CONDICIONES DE ENTRADA	CONDICIÓN DE SALIDA	REFERENCIA
Emisión de NH_3 en una planta química	Perfil de velocidad del viento: $u_{\text{ref}} = 1.5 \text{ m/s}$ $z_{\text{ref}} = 2 \text{ m}$ $\gamma = 0.4$ Velocidad equivalente al flujo de $\text{NH}_3 = 209.2 \text{ m/s}$	Presión atmosférica	[66]
Emisión de $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$ en una planta química	Velocidad del viento: $U = 0.1, 0.5 \text{ m/s}$ Flujo de $\text{HF} = 0.234 \text{ m}^3/\text{s}$	Presión atmosférica	[67]

Solución numérica de un modelo basado en *CFD*

Una vez definidas las ecuaciones que representarán los fenómenos relevantes, así como las propiedades de los fluidos y las condiciones de frontera e iniciales en el sistema, se procede con la solución numérica del modelo. Los programas de *CFD* se fundamentan en el *método del volumen finito*.

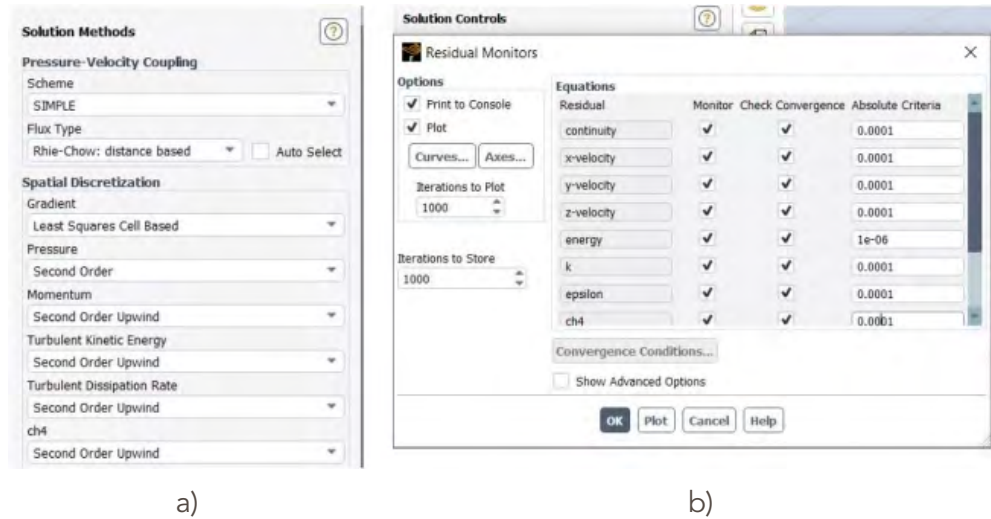
El algoritmo de solución en dichos programas consta de los siguientes pasos [38]:

- Integración de las ecuaciones gobernantes a través de los volúmenes de control que constituyen la malla del dominio computacional.
- Transformación de las ecuaciones integrales resultantes en un sistema de ecuaciones algebraicas.
- Solución del sistema de ecuaciones algebraicas por medio de un método numérico.

Los fenómenos físicos en el sistema pueden llegar a ser complejos y poseer un comportamiento matemático no lineal, por lo que es necesario contar con un enfoque basado en un procedimiento de solución iterativo. El método por antonomasia en *CFD* es el algoritmo *SIMPLE* (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) [66], el cual establece el acoplamiento entre las variables de presión y de velocidad [31], [43], [44].

Dada la naturaleza iterativa del procedimiento, otro de los parámetros esenciales que deben especificarse en la etapa de solución numérica del modelo en *CFD* son los criterios de convergencia numérica; es decir, la tolerancia cuantitativa de la diferencia entre los resultados de una iteración con respecto a la anterior: una vez que se satisfacen los criterios, las iteraciones terminan, y los resultados obtenidos en la última iteración se consideran definitivos. Por lo general, los criterios de convergencia en *CFD* se determinan a partir de los residuales (en inglés, *residuals*) de las variables en las

FIGURA 9. Interfaz de especificación de los controles de solución numérica del modelo computacional en ANSYS® Fluent™ 2023 R2: a) métodos de solución, y b) residuales.



Posprocesamiento

La etapa de posprocesamiento consiste en analizar la calidad de la solución numérica obtenida. En este sentido, las herramientas de posprocesamiento CFD han experimentado un importante desarrollo en años recientes. La mayoría de los softwares CFD poseen la capacidad de exportar datos para procesarlos *a posteriori* [53].

Los programas de CFD cuentan con instrumentos para la visualización de resultados debido a la creciente popularidad de las estaciones de trabajo o *workstations*, gracias a que cuentan con excepcionales capacidades gráficas; por ejemplo, gráficos vectoriales, gráficos de contorno, gráficos de superficie en 2D y 3D, líneas de flujo y rastreo de partículas. También es posible visualizar resultados dinámicos mediante el uso de herramientas de animación. El análisis de los resultados ofrece información de las variaciones

Adicionalmente, además de las condiciones de frontera, se deben detallar las condiciones iniciales del proceso bajo análisis en el caso de los sistemas no estacionarios; en estado estacionario, debe formularse una suposición inicial para comenzar los cálculos iterativos en la solución de las simulaciones.



locales en el flujo, la presión, la temperatura, las concentraciones, etcétera. Las herramientas de visualización y análisis recurrentes en los estudios sobre dispersión de gases tóxicos en plantas químicas comprenden mayormente sus perfiles de concentración; estos datos pueden visualizarse como planos, contornos y superficies de valores constantes, también llamadas *isosuperficies* [69].

Con el fin de ejemplificar este último aspecto, así como la aplicación de un programa de CFD en el modelado y la simulación de dispersión de gases tóxicos en plantas químicas, en la siguiente sección se presenta un caso de aplicación de esta herramienta computacional.

Caso de estudio

En esta sección se presentan generalidades de un modelo en CFD para la dispersión de metano (CH_4) a través de una planta química. En primer lugar, se establece como dominio computacional la planta química expuesta en la Figura 2, cuyas dimensiones son 20 x 20 x 10 m. Se proporciona también el área superficial ocupada por cada uno de los elementos internos: cuarto de control, 16 m²; tanque de almacenamiento, 9 m²; reactor químico, 2 m²; cada columna de destilación, 4 m².

En concordancia con la metodología, debe procederse con el mallado del dominio computacional: se generó una *malla no estructurada* conformada por elementos tetraédricos (Figura 3). Especialmente, se aplicó un refinamiento en las cercanías de las paredes de los elementos internos previamente descritos, con el fin de tener una representación óptima de los fenómenos relacionados con la dispersión del CH_4 . De este modo, la totalidad de elementos que conformaron la malla fue de 82 566 celdas.

Posteriormente, es necesario definir los modelos que deben representar la dispersión de CH_4 en la planta química. A tal efecto, se adoptó el enfoque basado en las ecuaciones de conservación de masa y de cantidad de movimiento (Ecuaciones (1) y (2)). En este caso de estudio, se consideró la ecuación para el transporte de especies químicas, siendo estas el aire y el CH_4 (Ecuación (4)). Por otro lado, el modelo Kappa-Épsilon sirvió de base para representar los efectos turbulentos. Se consideró un sistema a temperatura constante, por lo que se omitió la ecuación de energía (Ecuación (3)).



Tabla 2. Propiedades de transporte del aire y del CH₄ utilizadas en el caso de estudio.

PROPIEDAD	CH ₄	AIRE
Viscosidad [kg/(m s)]	1.087 X 10 ⁻⁵	1.7894 X 10 ⁻⁵
Densidad [kg/m ³]	0.6679	1.225

Tabla 3. Condiciones de frontera en el caso de estudio.

VARIABLE	ENTRADA DE CH ₄	ENTRADA DEL VIENTO
Velocidad (m/s)	25	1.5
Intensidad de la turbulencia (%)	5	5
Proporción de la viscosidad turbulenta (-)	10	10
Temperatura (K)	300	300

La etapa siguiente consiste en definir las propiedades de los fluidos involucrados, así como las condiciones de frontera del dominio computacional de la planta química. Los parámetros de transporte del aire y del CH₄ fueron obtenidos directamente del inventario de materiales de ANSYSFluent® 2023 R2 (Tabla 2); el coeficiente de difusión entre el ch₄ y el aire proporcionado por dicho programa fue de 2.88 X 10⁻⁵ m²/s.

Respecto a las fronteras de entrada, se estableció que el ch₄ proviene de una fuga en el reactor de la planta química; se impuso que dentro de la planta el viento tiende a moverse hacia las columnas I y II, arrastrando el CH₄ en esa dirección. En la Tabla 3 se presenta la especificación de las condiciones en las fronteras de entrada de la planta química.

En este caso, se especificó como condición de salida que la presión tuviera un valor de 101 325 Pa, es decir, 1 atmósfera.

Después de que se han establecido los últimos detalles de la etapa de preprocesamiento, se continúa con la definición de los parámetros de la solución numérica del modelo computacional. En esta aplicación, se especificó que el acoplamiento entre la presión y la velocidad se llevara a cabo por medio del algoritmo SIMPLE. En cuanto a los criterios de convergencia numérica, se estableció que los residuales alcanzaran un valor del orden de 10⁻⁴ para las variables de todas las ecuaciones del modelo computacional.

Una vez satisfechos los criterios de convergencia, se procede al análisis de resultados en la etapa de posprocesamiento. En la Figura 10 se muestran las isosuperficies en color cobrizo, obtenidas de la simulación de la dispersión de CH₄ a través de la planta química; éstas fueron generadas en el apartado Results del programa ANSYS® Fluent™ 2023 R2.

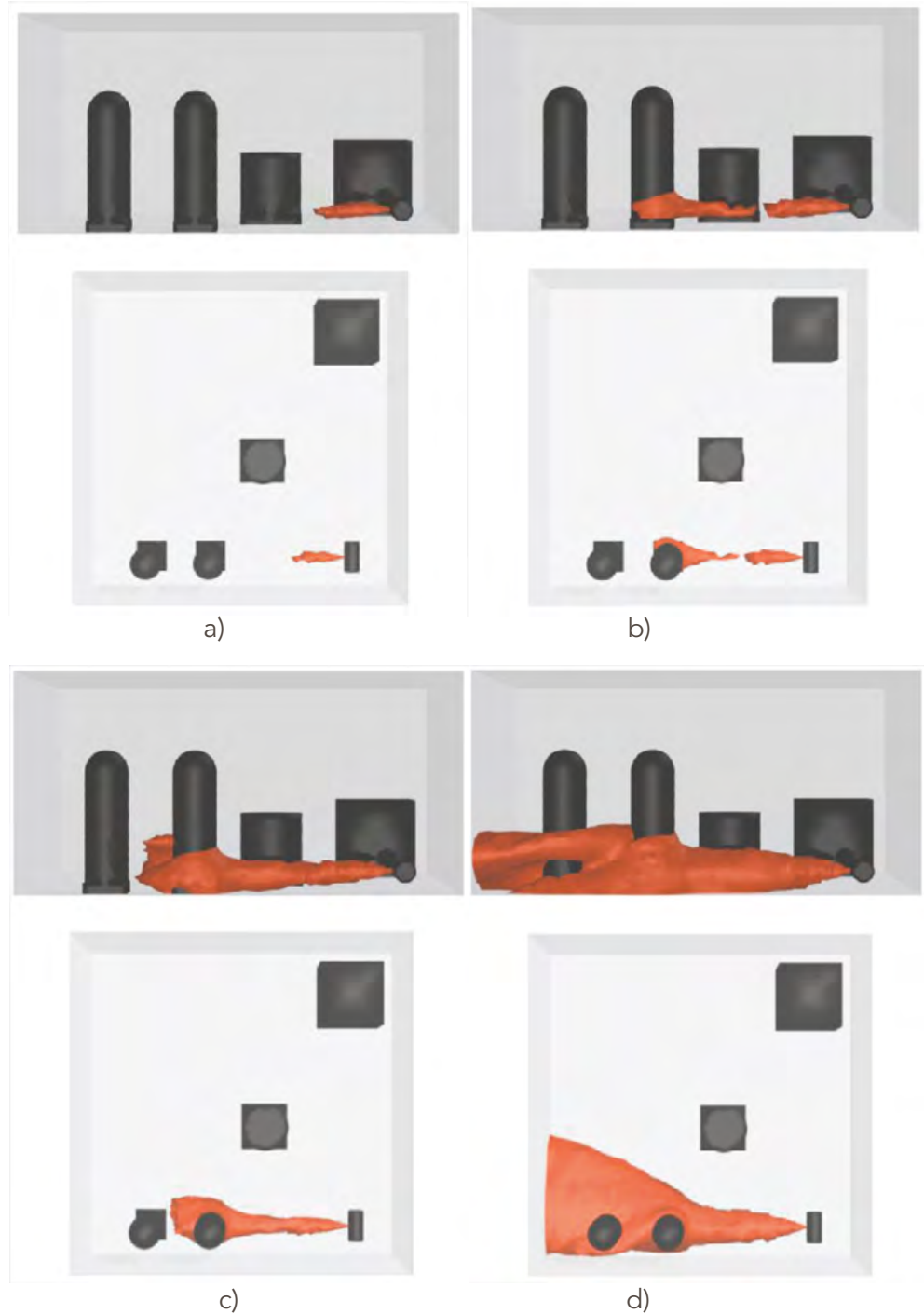


FIGURA 10. Isosuperficies para distintos valores de la fracción másica de CH_4 en una planta química (vista lateral y vista superior):
a) 0.020, b) 0.015,
c) 0.011, d) 0.004.

Cada isosuperficie mostrada en la Figura 10 representa la unión de las caras de todos los elementos de volumen de la malla que comparten un mismo valor de la fracción másica de CH_4 . Así, por ejemplo, la isosuperficie mostrada en la Figura 10a se compone de pocos elementos, cada uno con una fracción másica de 0.02; dado que dichos elementos son los más cercanos al reactor químico, puede considerarse que esta superficie marca el inicio de la fuga del CH_4 hacia el resto de la planta química. Por otro lado, la Figura 10d muestra la superficie compuesta por elementos con una fracción másica de 0.004. Se observa que el CH_4 alcanza esta concentración a una mayor distancia respecto al reactor, trascendiendo incluso la columna de destilación más lejana (columna II). Esta superficie evidencia el alcance de la nube de CH_4 en la planta.



Es importante obtener este tipo de perfiles para las especies tóxicas, como el CH_4 , porque permiten determinar si en algún punto específico de la planta las concentraciones superarán los umbrales estandarizados; tal como se indicó previamente, una situación así supondría un escenario de riesgo tanto para el personal de la planta como el medio ambiente. A partir de esta información, se trazan estrategias de prevención (mantenimiento preventivo, análisis de las condiciones de operación de los equipos, etcétera), o bien de mitigación (reubicación de las rutas de evacuación, realización de simulacros que consideren estas condiciones, entre otras). Estos puntos enfatizan cuán imprescindibles son las técnicas de CFD en los análisis de riesgo que se llevan a cabo en las plantas químicas, especialmente en aquellas donde existe el riesgo de fuga de gases tóxicos.

Conclusiones y perspectivas

Tras la revisión del estado del arte presentada en este trabajo, se deduce que los estudios que utilizan CFD son fundamentales en el modelado y análisis de la dispersión de gases tóxicos en plantas químicas; dicha labor sirve como referente principal en las tareas de análisis de consecuencia, la revisión de estrategias de mitigación y la evaluación del riesgo.

En comparación con los modelos de dispersión convencionales, la ventaja de los modelos CFD es su capacidad para predecir las interacciones entre las obstrucciones y el flujo gaseoso, especialmente cuando se dispersa en entornos geométricos complejos. Los resultados de la simulación CFD, los modelos de exposición y límites de toxicidad ayudan a identificar áreas peligrosas en las plantas químicas durante la planificación y evaluación de decisiones ante escenarios de riesgo. Asimismo, el modelado CFD se puede utilizar para evaluar el desempeño de los sistemas de mitigación para controlar el impacto de la liberación y dispersión de sustancias químicas tóxicas. Además de la concentración tóxica, el tiempo de exposición es otro parámetro importante para evaluar cuándo una exposición aguda a gases tóxicos supone una amenaza a los individuos en los modelos de dosis-respuesta.

El modelado CFD también proporciona información sobre el historial de concentración de los gases tóxicos en cualquier ubicación dentro y en los alrededores de la planta química. Junto con algunas funciones estadísticas, como las *probit*, este enfoque permite en principio calcular la probabilidad de daño y muerte por exposición a una sustancia tóxica. Es decir, re-



sulta factible realizar análisis de riesgo cuantitativos para una liberación accidental de gases tóxicos. Por otra parte, la generación del área geométrica de interés en un código CFD es un paso esencial para la estimación de resultados realistas. Sin embargo, la dispersión de gases tóxicos a menudo afecta un área relativamente grande en una planta química; en este caso, puede suponer un desafío representar de manera detallada la ubicación y la geometría de cada obstáculo.

Es importante mencionar que, incluso si se pueden generar geometrías complejas con alta calidad en los modelos CFD, la capacidad de cómputo disponible para los cálculos numéricos es una limitación severa en el monitoreo de la dispersión de gases en tiempo real; no obstante, existen estrategias que permiten superar estos inconvenientes. Respecto a la discretización de los dominios computacionales representativos de las plantas químicas, se simulan casos sencillos, ensayando varias mallas con diferentes números de elementos; la finalidad de este ejercicio es determinar qué tanto cambia la solución obtenida para cada una de las mallas. Si el cambio no es significativo, puede elegirse la malla con menor número de elementos, ya que supondrá menor tiempo de cómputo y costo de recursos computacionales para la solución del modelo.

En cuanto a la selección de las ecuaciones que representen el fenómeno de dispersión, una alternativa para tener un manejo eficiente de los recursos de cómputo disponibles, consiste en realizar las simulaciones añadiendo una por una las ecuaciones gobernantes. Por ejemplo, se puede empezar por efectuar una simulación sin considerar el modelo de turbulencia, y obtener así una solución primaria. Posteriormente, se puede incorporar el modelo de turbulencia y continuar la simulación desde esta solución primaria hasta obtener una solución final. Este enfoque posee la ventaja adicional de asegurar una mejor convergencia numérica. La implementación de estas estrategias puede contribuir al desarrollo a corto plazo del modelado de la dispersión de gases tóxicos en plantas químicas mediante técnicas de CFD; a modo de ejemplo, se puede pensar en sistemas hasta ahora poco explorados, como las biorrefinerías, donde se propiciaría el análisis del comportamiento de los gases tóxicos propios de ese tipo de industrias.





Agradecimientos

Los autores agradecen al Fondo para el Desarrollo del Conocimiento UAQ 2021, con el registro de proyecto FCQ-2021-16, por el apoyo financiero otorgado para el desarrollo de este trabajo.

Referencias

- [1] D. A. Crowl y J. F. Louvar, *Chemical Process Safety: Fundamentals with Applications*, 2nd. ed. Upper Saddle River, NJ, USA: Prentice Hall PTR, 2002.
- [2] R. Shen, Z. Jiao, T. Parker, Y. Sun y Q. Wang, "Recent application of Computational Fluid Dynamics (CFD) in process safety and loss prevention: A review", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 67, no. 104252, 2020.
- [3] S. Bathrinath, J. Devaganesh, B. Santhi y S. Saravanasankar, "The adverse human health effects due to ammonia, hydrogen sulphide and chlorine in process industry: A review", *IJMPERD*, vol. 8, pp. 394-402, 2018.
- [4] G. W. Hoyle y E. R. Svendsen, "Persistent effects of chlorine inhalation on respiratory health", *Ann. NY Acad. Sci.*, vol. 1378, no. 1, pp. 33-40, 2016.
- [5] J. A. Kim, S. Y. Yoon, S. Y. Cho, J. H. Yu, H. S. Kim, G. I. Lim y J. S. Kim, "Acute health effects of accidental chlorine gas exposure", *Ann. Occup. Env. Med.*, vol. 26, no. 29, pp. 1-11, 2014.
- [6] S. Achanta y S. E. Jordt, "Toxic effects of chlorine gas and potential treatments: A literature review", *Toxicol. Mech. Method.*, vol. 31, no. 4, pp. 244-256, 2019.
- [7] Z. Salamonowicz, M. Majder-Lopatka, A. Dmochowska, W. Rogula-Kozłowska, A. Piechota-Polanczyk y A. Polanczyk, "Ammonia dispersion in the closed space of an ammonia engine room with forced ventilation in an industrial plant", *Atmosphere (Basel)*, vol. 13, no. 7, pp. 1062-1089, 2022.
- [8] B. M. Sundblad, B. M. Larsson, F. Acevedo, L. Ernstgård, G. Johanson, K. Larsson y L. Palmberg, "Acute respiratory effects of exposure to ammonia on healthy persons", *Scand. J. Work Env. Hea.*, vol. 30, no. 4, pp. 313-321, 2004.
- [9] M. S. Yarandi, M. Mahdinia, J. Barazandeh y A. Soltanza-



- deh, "Evaluation of the toxic effects of ammonia dispersion: Consequence analysis of ammonia leakage in an industrial slaughterhouse", *Med. Gas Res.*, vol. 11, no. 1, pp. 24-29, Feb. 2021.
- [10] D. Leduc, P. Gris, P. Lheureux, P. A. Gevenois, P. De Vuyst y J. C. Yernault, "Acute and long term respiratory damage following inhalation of ammonia", *Thorax*, vol. 47, no. 9, pp. 755-757, 1992.
- [11] R. E. de la Hoz, D. P. Schlueter y W. N. Rom, "Chronic lung disease secondary to ammonia inhalation injury: a report on three cases", *Am. J. Ind. Med.*, vol. 29, no. 2, pp. 209-214, 1996.
- [12] D. P. Kelly, "A review of the inhalation toxicity of hydrogen fluoride", *HOTWC*, pp. 12-14, 1998.
- [13] W. J. Brock, "Hydrogen fluoride: How toxic is toxic? (A hazard and risk analysis)", *HOTWC*, pp. 559-566, 1999.
- [14] J. Y. Na, K. H. Woo, S. Y. Yoon, S. Y. Cho, I. U. Song, J. A. Kim y J. S. Kim, "Acute symptoms after a community hydrogen fluoride spill", *Ann. Occup. Env. Med.*, vol. 25, pp. 1-12, 2013.
- [15] S. Dugheri, A. Bonari, I. Pompilio, A. Monti, N. Mucci y G. Arcangeli, "Innovative monitoring of atmospheric gaseous hydrogen fluoride", *Int. J. Anal. Chem.*, vol. 2016, no. 2129053, 2016.
- [16] B. A. Plog y P. Quinlan, *Fundamentals of Industrial Hygiene*, 5th. ed. Itasca, IL, USA: NSC Press, 2002.
- [17] C. R. Roelofs, E. M. Barbeau, M. J. Ellenbecker y R. Moure-Eraso, "Prevention strategies in industrial hygiene: A critical literature review", *Am. Ind. Hyg. Assoc. J.*, vol. 64, no. 1, pp. 62-67, 2003.
- [18] American Conference of Governmental Industrial Hygienists (ACGIH), *Threshold Limit Values for Chemical Substances and Physical Agents and Biological Exposure Indices*, Cincinnati, OH, USA: ACGIH Signature Publications, 2023.
- [19] *Permissible Exposure Limits - Annotated Tables*, Occupational Safety and Health Administration (OSHA). [En línea]. Disponible: <https://www.osha.gov/annotated-pels/>. Feb. 14, 2024.
- [20] Secretaría del Trabajo y Previsión Social, Abr., 2024, *NOM-010-STPS-2014*, "Agentes químicos contaminantes del ambiente laboral - Reconocimiento, evaluación y control", *Diario Oficial de la Federación*. [En línea]. Disponible: https://dof.gob.mx/nota_detalle.php?codigo=5342372&fecha=28/04/2014



- [21] R. K. Goyal y N.M. Al-Jurashi, "Gas dispersion models", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 4, no. 3, pp. 151-160, 1991.
- [22] F. Pasquill, "The estimation of the dispersion of wind-borne material", *Meteoro. Mag.*, vol. 90, pp. 20-49, 1961.
- [23] F. A. Gifford, "Use of routine meteorological observations for estimating atmospheric dispersion", *Nucl. Safety*, vol. 2, pp. 47-51, 1961.
- [24] C. S. Borrego, M. S. Coutinho y M. J. Costa, "Introduction of terrain roughness effects into a Gaussian dispersion model", *Sci. Total Environ.*, vol. 99, no. 1-2, pp. 153-161, 1990.
- [25] T. O. Spicer y J. A. Havens, "Field test validation of the DEGADIS model", *J. Hazard. Mater.*, vol. 16, pp. 231-245, 1987.
- [26] J. P. Kunsch y T. K. Fanneløp, "Unsteady heat-transfer effects on the spreading and dilution of dense cold clouds", *J. Hazard. Mater.*, vol. 43, no. 3, pp. 169-193, 1995.
- [27] A. Kumar, A. Mahurkar y A. Joshi, "Study of the spread of a cold instantaneous heavy gas release with surface heat transfer and variable entrainment", *J. Hazard. Mater.*, vol. 101, no. 2, pp. 157-177, 2003.
- [28] S. R. Hanna, S. Tehranian, B. Carissimo, R. W. Macdonald y R. Lohner, "Comparisons of model simulations with observations of mean flow and turbulence within simple obstacle arrays", *Atmos. Environ.*, vol. 36, no. 32, pp. 5067-5079, 2002.
- [29] J. Xing, Z. Liu, P. Huang, C. Feng, Y. Zhou, D. Zhang y F. Wang, "Experimental and numerical study of the dispersion of carbon dioxide plume", *J. Hazard. Mater.*, vol. 256, pp. 40-48, 2013.
- [30] P. Dawson, D. E. Stock y B. Lamb, "The numerical simulation of airflow and dispersion in three-dimensional atmospheric recirculation zones", *J. Appl. Meteorol. Clim.*, vol. 30, no. 7, pp. 1005-1024, 1991.
- [31] J. Wang, X. Yu y R. Zong, "A dynamic approach for evaluating the consequences of toxic gas dispersion in the chemical plants using CFD and evacuation modelling", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 65, no. 3, 2020 DOI: 10.1016/j.jlp.2020.104156
- [32] M. A. McBride, A. B. Reeves, M. D. Vanderheyden, C. J. Lea y X. X. Zhou, "Use of advanced techniques to model the dispersion of chlorine in complex terrain", *Process Saf. Environ.*, vol. 79, no. 2, pp 89-102, 2001.
- [33] S. E. Gant y G. T. Atkinson, "Dispersion of the vapour cloud in the Buncefield inci-



- dent", *Process Saf. Environ.*, vol. 89, no. 6, pp. 391-403, 2011.
- [34] P. Joshi, P. Bikkina y Q. Wang, "Consequence analysis of accidental release of supercritical carbon dioxide from high pressure pipelines", *Int. J. Greenh. Gas Con.*, vol. 55, pp. 166-176, 2016.
- [35] S. Sklavounos y F. Rigas, "Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles", *J. Hazard. Mater.*, vol. 108, no. 1-2, pp. 9-20, Apr. 2004.
- [36] G. Li, J. Wang, M. Wang, Y. Lin, X. Yu y R. Zong, "Experimental and numerical study of heavy gas dispersion in presence of obstacle motion", *Process Saf. Environ.*, vol. 177, pp. 1494-1505, 2023.
- [37] P. K. Kundu y I. M. Cohen, *Fluid Mechanics*, 2nd. ed., Orlando, FL, USA: Academic Press, 2002.
- [38] H. K. Versteeg y W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, 2nd. ed., Essex, UK: Pearson Education Limited, 2007.
- [39] A. Chakrabarty, S. Mannan y T. Cagin, *Multiscale Modeling for Process Safety Applications*, Oxford, UK: Butterworth-Heinemann, 2015.
- [40] M. Pontiggia, M. Derudi, M. Alba, M. Scaioni y R. Rota, "Hazardous gas releases in urban areas: Assessment of consequences through CFD modelling", *J. Hazard. Mater.*, vol. 176, no. 1-3, pp. 589-596, 2010.
- [41] ANSYS, *Workbench User's Guide*, Release 2023 R2, ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA, 2023.
- [42] ANSYS, *DesignModeler User's Guide*, Release 2023 R2, ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA, 2023.
- [43] D. S. Min, S. Choi, E-Y. Oh, J. Lee, C. G. Lee, K-Y. Choi y S. Jung, "Numerical modelling for effect of water curtain in mitigating toxic gas release", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 63, no. 103972, 2020.
- [44] H. Lim, K. Um y S. Jung, "A study on effective mitigation system for accidental toxic gas releases", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 49, part. B, pp. 636-644, 2017.
- [45] V. Busini, V y R. Rota, "Influence of the shape of mitigation barriers on heavy gas dispersion", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 29, pp. 13-21, 2014.
- [46] V. Busini, M. Lino y R. Rota, "Influence of large obstacles and mitigation barriers on heavy gas cloud dispersion: a liquefied natural gas case-study", *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 51, no. 22, pp. 7643-7650, 2012.



- [47] M. Siddiqui, S. Jayanti y T. Swaminathan, "CFD analysis of dense gas dispersion in indoor environment for risk assessment and risk mitigation", *J. Hazard. Mater.*, vol. 209, pp. 177-185, 2012.
- [48] R. Vázquez Román, C. Díaz Ovalle, E. Quiroz Pérez y M. S. Mannan, "A CFD-based approach for gas detectors allocation", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 44, pp. 633-641, Nov. 2016.
- [49] B. Andersson, R. Andersson, L. Hakansson, M. Mortensen, R. Sudiyo, B. Van Wachem, *Computational Fluid Dynamics for Engineers*, New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2011.
- [50] R. Eymard, T. Gallouët y R. Herbin, "Finite Volume Methods" en *Handbook of Numerical Analysis*, P. G. Ciarlet y J. L. Lions, Eds., Amsterdam, Netherlands: North Holland Publishing, 2000, pp. 713-1018.
- [51] G. Raithby, P. Galpin y J. van Doormaal, "Prediction of heat and fluid flow in complex geometries using general orthogonal coordinate", *Numerical Heat Transfer*, vol. 9, no. 2, pp. 125-142, 1986.
- [52] ANSYS, *Meshing User's Guide*, Release 2023 R2, ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA, 2023.
- [53] J. Tu, G. H. Yeoh y C. Liu, *Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach*, Oxford, UK: Butterworth-Heinemann, 2018.
- [54] L. Dong, H. Zuo, L. Hu, B. Yang, L. Li y L. Wu, "Simulation of heavy gas dispersion in a large indoor space using CFD model", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 46, pp. 1-12, 2017.
- [55] B. Zhang y G. M. Chen, "Quantitative risk analysis of toxic gas release caused poisoning - A CFD and dose-response model combined approach", *Process Saf. Environ.*, vol. 88, no. 4, pp. 253-262, 2010.
- [56] B. Zhang, Y. Liu y S. Qiao, "A quantitative individual risk assessment method in process facilities with toxic gas release hazards: a combined scenario set and CFD approach", *Process Saf. Prog.*, vol. 38, no. 1, pp. 52-60, 2019.
- [57] R. B. Bird, W. E. Stewart y E. N. Lightfoot, *Fenómenos de Transporte*, 2nd. ed., México D. F., México: Limusa Wiley, 2006.
- [58] P. Kassomenos, A. Karayannis, I. Panagopoulos, S. Karakitsios y M. Petrakis, "Modelling the dispersion of a toxic substance at a workplace", *Environmental Modelling & Software*, vol. 23, no. 1, pp. 82-89, 2008.



- [59] C. Diaz Ovalle, R. Vazquez Roman, R. Lesso Arroyo y S. Mannan, "A simplified steady-state model for air, water and steam curtains", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 25, no 6, pp. 974-981, Nov. 2012.
- [60] J. Kuipers y W. P. M. van Swaaij, "Computational fluid dynamics applied to chemical reaction engineering", in *Advances in Chemical Engineering*, New York, NY, USA: Academic Press, 1998.
- [61] S. Chen, Z. Zhou, Y. Ma, L. Zhang, T. Wang, S. Wang y Y. Zhang, "Study on hazardous areas of hydrogen fluoride diffusion based on CFD simulation", *Processes*, vol. 9, no. [62] W. Wang, D. Mou, B. Sun, C. Zhu y H. Mi, "Characteristics of leakage and diffusion for a chlorine storage tank based on simulation", *ACS Chem. Health Saf.*, vol. 28, no. 6, pp. 436-443, Aug. 2021.
- [63] J. Wang, X. Yu, R. Zong y S. Lu, "Evacuation route optimization under real-time toxic gas dispersion through CFD simulation and Dijkstra algorithm", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 76, 2022 DOI: 10.1016/j.jlp.2022.104733.
- [64] M. Muscetta, M. Portarapillo, A. Di Benedetto y R. Andreozzi, "Risk analysis of the sodium hypochlorite production process: Focus on the chlorine line", *Chemical Engineering Journal Advances*, vol. 12, no. 100381, 2022.
- [65] W. Tan, D. Lv, X. Guo, H. Du, L. Liu y Y. Wang, "Accident consequence calculation of ammonia dispersion in factory area", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 67, 2020 DOI: 10.1016/j.jlp.2020.104271.
- [66] S. Yuan, J. Cai, G. Reniers, M. Yang, C. Chen, J. Wu, "Safety barrier performance assessment by integrating computational fluid dynamics and evacuation modeling for toxic gas leakage scenarios", *Reliability Engineering & System Safety*, vol. 226, 2022 DOI: 10.1016/j.ress.2022.108719.
- [67] A. Horiguchi y S. Numazawa, "Simulation-based risk assessment for the leakage of toxic substances in a chemical plant and the effects on the human body: ethanol as a working model", *J. Toxicol. Sci.*, vol. 48, no. 5, pp. 285-298, 2023.
- [68] G. Li, J. Wang, M. Wang y R. Zong, "Experimental and numerical study of CO₂ plume diffusion in a confined space." *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 81, no. 104949, 2023.
- [69] ANSYS, *Fluent User's Guide*, Release 2023 R2, ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA, 2023.



- [70] ANSYS, Fluent Theory Guide, Release 2023 R2, ANSYS Inc., Canonsburg, PA, USA, 2023.
- [71] Z. U. A. Warsi, Fluid Dynamics: Theoretical and Computational Approaches, Boca Raton, FL: CRC Press, 2005.
- [72] D. C. Wilcox, Turbulence Modeling for CFD, La Cañada, CA, USA: DCW Industries, Inc., 1994.
- [73] B. E. Launder y D. B. Spalding, Mathematical Models of Turbulence, Orlando, FL, USA: Academic Press, 1972.
- [74] W. Tan, H. Du, L. Liu, T. Su y X. Liu, "Experimental and numerical study of ammonia leakage and dispersion in a food factory", *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, vol. 47, pp. 129-139, 2017.
- [75] CCPS, *Guidelines for Consequence Analysis of Chemical Releases*, Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, 1999.
- [76] S. V. Patankar y D. B. Spalding, "A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows" in *Numerical Prediction of Flow, Heat Transfer, Turbulence and Combustion*, S. V. Patankar, A. Pollard, A. K. Singhal y S. P. Vanka, Eds., Elmsford, NY, USA: Pergamon Press, 1983, pp. 54-73.